

Fachhochschule Aachen

Campus Jülich

Fachbereich: Medizintechnik und Technomathematik
Studiengang: Angewandte Mathematik und Informatik

**Erzeugen von Kugelpackungen mit vorgegebener
Größenverteilung zur Darstellung von porösen
Sinterkörpern in der Simulation von Elektrolyseuren**

Bachelorarbeit

Autor: Karin Havemann

Matrikelnummer: 3233010

1. Prüfer: Prof. Dr. rer. nat. Matthias Grajewski

2. Prüfer: Diplom-Inf. Dieter Froning

Angefertigt am

Institut für Energie- und Klimaforschung - Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14),
Forschungszentrum Jülich GmbH

Jülich, den 22. August 2022

Erklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen benutzt habe, alle Ausführungen, die anderen Schriften wörtlich oder sinngemäß entnommen wurden, kenntlich gemacht sind und die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Fassung noch nicht Bestandteil einer Studien- oder Prüfungsleistung war.

Ich verpflichte mich, ein Exemplar der Bachelorarbeit fünf Jahre aufzubewahren und auf Verlangen dem Prüfungsamt des Fachbereiches Medizintechnik und Technomathematik auszuhändigen.

Jülich, den 22. August 2022

Ort, Datum

Karin Havemann

Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Software entwickelt, die die Struktur von Porösen Transportschichten (PTLs) über ein kugelbasiertes Geometriemodell nachbilden soll. PTLs werden bei der Produktion von Wasserstoff in Elektrolyseuren eingesetzt und spielen dort eine wichtige Rolle beim Gas- und Wassertransport. Um die Leistungsfähigkeit von Elektrolyseuren zu verbessern, sollen die Transportprozesse innerhalb einer PTL über Transportsimulationen untersucht werden. Dabei sollen auch die nachgebildeten Strukturen zum Einsatz kommen.

Das Programm erstellt Kugelpackungen aus Kugeln einer vorgegebenen Größenverteilung. Eingabeparameter sind die Dimension einer Kugelpackung, die Radienverteilung und ein Überlappungskriterium $p_{overlap}$ als Grenze für das maximale relative überlappende Volumen zwischen zwei Kugeln. Die Aufgabe in der vorliegenden Bachelorarbeit war es, die Software zu erstellen, die in der Software angewendete Methodik zu beschreiben und die mit der Software generierten Kugelpackungen zu untersuchen.

Das Generieren einer Kugelpackung erfolgt über einen Sedimentationsalgorithmus, der die Kugeln nacheinander platziert. In den einzelnen Sedimentationsschritten werden zu einem zufällig vorgegebenen Radius mögliche Kugelpositionen berechnet. Dabei kommt zunächst ein geometrisches Verfahren zur Berechnung einer berührenden Kugelposition und, falls dies nicht möglich ist, ein Verfahren zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition zum Einsatz. Im Methodikteil der Arbeit wird der Sedimentationsalgorithmus erläutert und die beiden Verfahren zur Berechnung einer Kugelposition beschrieben.

Bei der Untersuchung der generierten Kugelpackungen konnte festgestellt werden, dass die Wahl des Überlappungskriteriums $p_{overlap}$ die Struktur der Kugelpackung verändert. Je höher $p_{overlap}$ gewählt ist, desto mehr Kugeln werden in einer Kugelpackung platziert und desto geringer ist die Porosität der nachgebildeten Struktur. Zudem konnte gezeigt werden, dass die Wahl von $p_{overlap}$ die Richtungen zwischen direkt benachbarten Kugeln und somit die Anordnung der Kugeln innerhalb der Kugelpackung verändert.

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	1
1.1	Einsatz von Porösen Transportschichten in Elektrolyseuren	1
1.2	Kugelbasiertes Geometriemodell	2
1.3	Ziel und Aufbau der Arbeit	4
2	Methoden	6
2.1	Sedimentationsalgorithmus	6
2.2	Berechnung der Pocketposition	10
2.2.1	Geometrisches Verfahren	10
2.2.2	Verfahren zur Berechnung von überlappenden Kugelpositionen . . .	16
2.3	Qualitätsmaß Überlappung	21
2.4	Sonderfälle	24
2.5	Verteilung der Kugelradien	33
3	Auswertung	36
3.1	Auswahl sinnvoller Parameter	36
3.2	Anwendungsbezogene Auswertung	40
3.3	Auftreten von Sonderfällen	48
4	Fazit und Ausblick	51
	Literatur	53
A	Irregularitätsmaß	54
B	Visualisierung des geometrischen Verfahrens zur Pocketberechnung	57

1 Motivation

1.1 Einsatz von Porösen Transportschichten in Elektrolyseuren

Bei der Elektrolyse wird durch den Einsatz von elektrischen Strom Wasserstoff produziert. Dafür wird bei der sogenannten Polymer-Elektrolyt-Membran-Elektrolyse (PEM-Elektrolyse) Wasser an einer für Protonen durchlässigen Membran aufgespalten. Neben dieser Membran sind poröse Transportschichten (porous transport layer, PTL) ein weiteres Bauteil von Elektrolysezellen in der PEM-Elektrolyse. Die PTLs werden sowohl auf der Anoden- als auch auf der Kathodenseite eingesetzt und spielen eine wichtige Rolle im Gas-Wasser-Transport.

Auf der Anodenseite wird Wasser durch eine PTL zur Polymer-Elektrolyt-Membran hintransportiert. An der Membran wird das Wasser aufgespalten. Es entsteht Sauerstoff und es werden jeweils vier Elektronen und Protonen freigesetzt. Der entstandene Sauerstoff wird auf der Anodenseite aus der Zelle heraus transportiert. Die Protonen wandern durch die protonendurchlässige Membran zur Kathodenseite. Dorthin gelangen zudem die Elektronen durch den äußeren Stromkreis. Auf der Kathodenseite entsteht dann durch die Reaktion der Protonen und Elektronen Wasserstoff [1].

Für eine kontinuierliche Wasserstoffproduktion muss die Membran stets gewässert sein und entstehende Gase müssen schnell abtransportiert werden. Für eine effiziente Elektrolyse ist also eine gleichmäßige Wasserversorgung und eine effiziente Gasabfuhr nötig. Beide Transportprozesse, Wasserzufuhr und Gasabfuhr, finden innerhalb einer PTL statt. Um Elektrolyseure weiterzuentwickeln und ihre Leistungsfähigkeit zu optimieren, müssen die Transportprozesse innerhalb der PTL betrachtet werden. Da die Struktur einer PTL die Transportprozesse und somit auch die Elektrolyseleistung beeinflusst, werden die PTL und Merkmale ihrer Struktur wie Porosität und Permeabilität Gegenstand wissenschaftlicher Untersuchungen [2].

Eine poröse Transportschicht besteht zum Beispiel aus gesintertem Titanpulver [1]. Der Querschnitt einer PTL aus solch einem gesinterten Material ist in Abbildung 1.1 dargestellt. Die Aufnahme ist mit einem Nano-CT-Gerät entstanden. Es ist eine poröse Struktur aus kugelförmigen Partikeln unterschiedlicher Größe erkennbar. Dabei sind die Querschnitte der einzelnen Partikel nicht klar abgrenzbar, sondern überlappen sich. Der Partikeldurchmesser liegt im μm -Bereich.

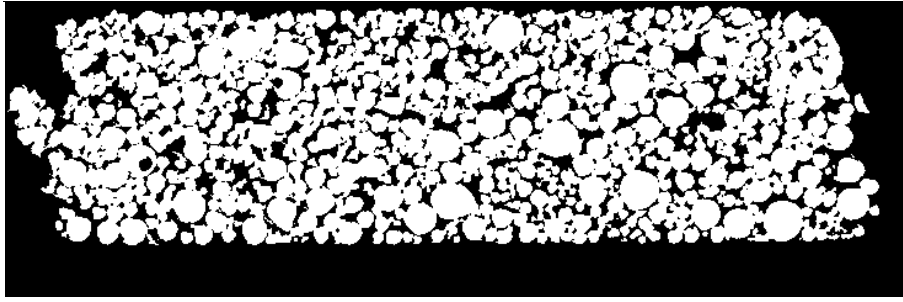


Abbildung 1.1: Schnittbild eines Titan-Sinterkörpers mit einem Zeiss Xradia Nano-CT (Quelle: Deepjyoti Borah, IEK-14).

1.2 Kugelbasiertes Geometriemodell

Im Rahmen des Software-Technik-Projekts (SWT-Projekt) [3] wurde ein Programm „Ku-Pa 1“ (Kugelpackung 1) zum Erzeugen einer Kugelpackung entwickelt, um ein irreguläres kugelbasiertes Modell zu entwickeln, das in Kenngrößen wie der Porosität mit der realen PTL-Struktur übereinstimmt. Über dieses kugelbasierte Geometriemodell wurde versucht, die Struktur einer gesinterten PTL nachzubilden. Das Programm kann Querschnitte durch die generierte kugelbasierte Struktur als Schwarz-Weiß-Bildserie generieren. Eine Bildserie kann dann genutzt werden, um die Transportprozesse innerhalb eines Elektrolyseurs zu simulieren.

Die über das SWT-Programm generierten Kugelpackungen sind mit Kugeln befüllte quaderförmige Räume und bestehen aus Kugeln gleicher Größe, die sich berühren. Eine Kugelpackung wird über einen Sedimentationsalgorithmus generiert. Ein ähnlicher Sedimentationsalgorithmus wurde von A. Elsner [4] beschrieben. Zunächst wird eine Initialisierungsebene erzeugt, in der die Kugeln in versetzten Gitterpositionen mit geringen Abständen angeordnet werden. Die Kugeln dieser Initialisierungsebene werden aus ihren Gitterpositionen heraus zufällig in x-, y- und z-Richtung verschoben und bilden die unterste Schicht der Kugelpackung. Über der Initialisierungsebene entsteht dann eine Kugelpackung.

Das Füllen des Raums mit Kugeln erfolgt in einzelnen Sedimentationsschritten. Um die Schwerkraft nachzubilden, wird in jedem Schritt der Sedimentation eine Kugel an der niedrigsten möglichen Kugelposition der Kugelpackung platziert. Eine mögliche Kugelposition, die auch als Pocket bezeichnet wird, ist ein Punkt innerhalb des quaderförmigen Raumes, an dem eine neue Kugel so platziert werden kann, dass sie drei bereits platzierte Kugeln berührt. Die Sedimentation endet, wenn der gesamte Raum mit Kugeln gefüllt ist.

Die über das SWT-Programm erzeugten Kugelpackungen weisen andere Porositäten auf, als sie in realen PTLs aus gesintertem Titan ermittelt werden konnten [2]. Während die ermittelten Porositäten realer Strukturen zwischen 26 und 34% lagen, weisen die generierten Strukturen Porositäten von über 40% auf. Aufbauend auf das SWT-Projekt wurde daher ein Postprocessing entwickelt, durch das die Kugeln einer Kugelpackung zufällig vergrößert

bert werden, bis eine gewünschte Porosität erreicht wurde. Durch das zufällige Vergrößern entsteht eine Überlappung der sich ursprünglich berührenden Kugeln einer Kugelpackung. Zudem sind die Kugeln anschließend unterschiedlich groß. Beide Effekte sind dabei erwünscht, denn anhand der Aufnahmen einer realen PTL (siehe Abbildung 1.1) ist zu erkennen, dass die Partikel der porösen Struktur von verschiedener Größe sind und sich überlappen.

Eine mit dem SWT-Programm generierte Kugelpackung der Dimension $700 \times 600 \times 200$ ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Die Dimension orientiert sich dabei an der Größe realer PTLs, wie sie von D. Borah [2] untersucht wurden. Die Einheit der Dimensionen ist daher μm . Die Kugeln sind entsprechend ihrer Radien eingefärbt. Vor dem zufälligen Vergrößern der einzelnen Kugeln hatten alle Kugeln den Radius 10. Nach dem Vergrößern treten Kugelradien etwa im Intervall $[10; 15]$ auf. Insgesamt sind in einer mit diesen Parametern generierten Kugelpackung ungefähr 12.000 Kugeln enthalten. In der Abbildung 1.2a ist die Unterseite der Kugelpackung abgebildet. Die Gitterstruktur der Kugeln in der Initialisierungsebene ist erkennbar. Die Kugeln der oberen Schichten scheinen hingegen zufällig angeordnet zu sein (siehe Abbildung 1.2b).

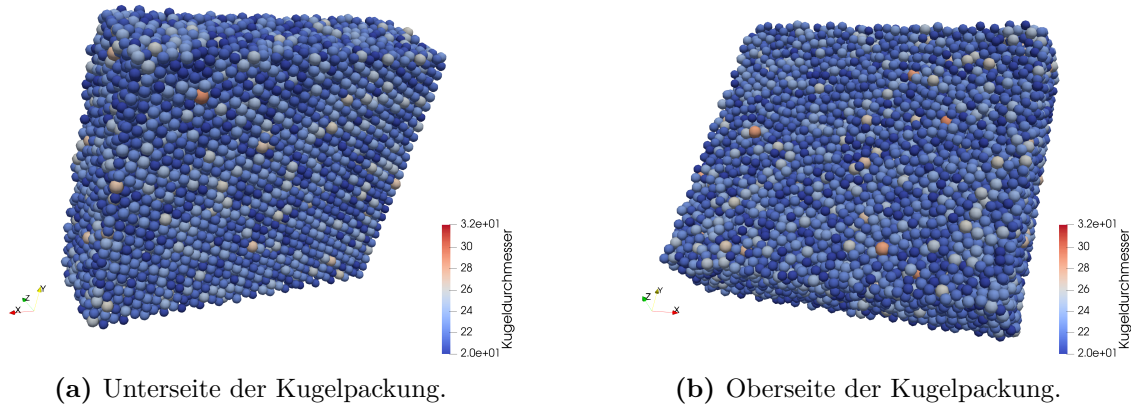


Abbildung 1.2: Kugelpackung der Dimension $700 \times 600 \times 200 \mu\text{m}^3$ mit Kugeln unterschiedlicher Größe erzeugt mit dem SWT-Programm und visualisiert in Paraview. Die Kugeln sind entsprechend der Größe ihrer Radien eingefärbt.

Im Rahmen der Seminararbeit [5] wurde überprüft, ob die Kugeln einer Kugelpackung tatsächlich irregulär angeordnet sind, indem die Verteilungen von Richtungen zwischen den Mittelpunkten direkt benachbarter Kugeln untersucht wurden. Direkt benachbarte Kugeln sind Kugeln, die sich berühren oder überlappen. Es wurde angenommen, dass eine irreguläre Anordnung von Kugeln innerhalb einer Kugelpackung bedeutet, dass die Richtungen gleichmäßig verteilt sind. Da es in den untersuchten Samples jedoch Richtungen gab, die besonders häufig innerhalb einer Kugelpackung auftraten, konnte eine irreguläre Anordnung im Sinne von gleichmäßig verteilten Kugeln nicht bestätigt werden. Es traten allerdings auch nicht ausschließlich bestimmte Richtungen auf. Die Anordnung der Kugeln konnte daher auch nicht als regulär bewertet werden.

Zusätzlich konnte gezeigt werden, dass die Initialisierungsebene Einfluss auf die Richtungen

in den untersten Schichten einer Kugelpackung hat. Es wurde außerdem die Vermutung aufgestellt, dass die Gitterstruktur der Kugeln in der Initialisierungsebene für das häufige Auftreten bestimmter Richtungen in der gesamten Kugelpackung verantwortlich ist, da die gleich großen Kugeln schichtweise in die Lücken der Initialisierungsebene einsinken und somit eine neue Kugelschicht bilden. Das Einsinken von Kugeln in eine Schicht könnte insgesamt zu einer schichtweisen Anordnung der Kugeln über die gesamte Kugelpackung führen.

Vor dem Hintergrund des Anwendungskontextes erscheint es sinnvoll, ein weiteres kugelbasiertes Geometriemodell „KuPa 2“ zu entwickeln, das mit Kugeln unterschiedlicher Größe arbeitet, denn es ist das Ziel, ein Modell zu entwickeln, das in Struktur und Merkmalen wie der Porosität mit einer realen PTL übereinstimmt. Da Nano-CT-Aufnahmen einer realen PTL-Struktur Partikel unterschiedlicher Größe vermuten lassen, sollte das Modell zur Nachbildung mit Kugeln verschiedener Größe arbeiten.

1.3 Ziel und Aufbau der Arbeit

Es ist das Ziel, eine Software zur Erstellung von Kugelpackungen aus Kugeln unterschiedlicher Größe zu entwickeln, um mit den Kugelpackungen die porösen Strukturen von realen PTLs nachzubilden. Generierte und reale Struktur sollen in Kenngrößen wie der Porosität übereinstimmen. Während bei der Vorgängervariante „KuPa 1“ Kugeln gleicher Größe nach der Platzierung zufällig vergrößert wurden, sollen die Kugeln nun bereits bei der Platzierung unterschiedliche Radien haben. In der Regel sollen die Kugeln dabei so platziert werden, dass sie einander berühren.

Um eine übereinstimmende Porosität von realer und nachgebildeter Struktur zu erreichen, können die einzelnen Kugeln der Kugelpackung im Postprocessing zufällig vergrößert werden, bis eine gewünschte Porosität erreicht wird. Die Porosität Φ ist das Verhältnis aus Hohlraumvolumen V_H und dem Raumvolumen V_R des zu füllenden Körpers (siehe Formel 1.1). Durch das Vergrößern der einzelnen Kugeln sinkt das Hohlraumvolumen V_H und somit auch die Porosität. Durch das Vergrößern der Kugeln tritt außerdem der Nebeneffekt auf, dass sich die Kugeln der Kugelpackung nicht mehr nur berühren, sondern sich an ihren Rändern auch überlappen.

$$\Phi = \frac{V_H}{V_R} \quad (1.1)$$

Vor dem Hintergrund, dass sich die Kugeln nach dem Vergrößern im Postprocessing ohnehin überlappen, soll eine Überlappung von Kugeln bereits beim Generieren der Kugelpackung möglich sein, solange die Überlappung eine festgelegte Toleranzgrenze nicht überschreitet. Die Platzierung von sich berührenden Kugeln soll dabei bevorzugt werden. Die Möglichkeit zur Platzierung von überlappenden Kugeln dient dem Abfangen einiger Fälle, in denen die Platzierung einer Kugel an einer bestimmten Position der Kugelpackung ohne

Überlappung nicht möglich wäre. Für die Berechnung von berührenden und überlappenden Kugelpositionen sind zwei verschiedene Verfahren notwendig.

In der vorliegenden Arbeit sollen nun die hinter der Software „KuPa 2“ liegende Methodik vorgestellt und die mithilfe der Software erstellten Kugelpackungen untersucht werden. Zu Beginn wird dafür der Sedimentationsalgorithmus zum Erstellen der Kugelpackung erläutert, bei dem die einzelnen Kugeln nacheinander platziert werden. Anschließend wird die Berechnung einer Pocketposition beschrieben. Hierfür werden ein geometrisches Verfahren zur Berechnung einer berührenden Kugelposition und ein Verfahren zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition vorgestellt. Außerdem wird beschrieben, wie die Überlappung berechnet und als Entscheidungskriterium für die Auswahl von Kugelpositionen genutzt wird. Es folgt eine Vorstellung möglicher Sonderfälle, bei denen die Berechnung einer Kugelposition nicht oder nur über das Verfahren zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition möglich ist, sowie die Beschreibung der für die Kugelradien verwendeten Größenverteilungen.

Anschließend sollen die mithilfe der entwickelten Software „KuPa 2“ generierten Kugelpackungen hinsichtlich ihrer Porosität und Struktur untersucht werden. Die Porosität soll über das Pixelzählen in Schwarz-Weiß-Bildserien bestimmt werden, die Querschnitte durch eine Kugelpackung abbilden. Die Struktur der Kugelpackungen soll analysiert werden, indem wie in der Seminararbeit [5] die Richtungen zwischen benachbarten Kugeln untersucht werden. Zudem soll der Einfluss des Verfahrens zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition berechnet werden.

2 Methoden

Das Programm „KuPa 2“ zum Erzeugen von Kugelpackungen aus Kugeln mit vorgegebener Größenverteilung ist in drei Teilprogramme aufgeteilt. In der Initialisierung wird eine Initialisierungsebene als unterste Ebene der Kugelpackung erstellt. Dieser erste Teil konnte weitestgehend aus dem SWT-Programm [3] „KuPa 1“ übernommen werden. Im zweiten Teil ist der Sedimentationsalgorithmus (siehe Kapitel 2.1) zum Erzeugen der Kugelpackung implementiert. Im Postprocessing, dem dritten Teil, kann die Porosität der Kugelpackung durch zufälliges Vergrößern der Kugeln angepasst werden. Zudem werden Kugellisten und eine Schwarz-Weiß-Bildserie, die Querschnitte durch die Kugelpackung darstellt, als Ausgabedateien erzeugt. Die Initialisierung und das Postprocessing sind in Java implementiert, der Sedimentationsalgorithmus in Python.

2.1 Sedimentationsalgorithmus

Im Programm „KuPa 2“ zum Generieren einer Kugelpackung wird angelehnt an Elsner [4] ein Sedimentationsalgorithmus genutzt. Hierbei wird ein meist quaderförmiger Körper schrittweise mit Kugeln befüllt. Das Prinzip dieses Algorithmus wurde bereits im Software-Technik-Projekt (SWT-Projekt) [3] zum Erzeugen einer Kugelpackung aus gleichgroßen und sich nicht überschneidenden Kugeln genutzt. Wie in Kapitel 1.2 beschrieben, bildet dieses Programm „KuPa 1“ die Vorarbeit für diese Bachelorarbeit. Aus dem SWT-Programm konnte daher die Initialisierung weitestgehend übernommen werden.

Bei der Initialisierung wird mit der sogenannten Initialisierungsebene eine unterste Schicht aus Kugeln angelegt, die den Boden des zu füllenden Körpers bilden soll. Während Elsner beschreibt, dass die Kugeln der untersten Schicht zufällig platziert werden und sich nicht überlappen, ist im entwickelten Programm eine Überlappung möglich und die Kugeln werden gitterförmig angeordnet. Ausgehend von ihrer Gitterposition werden die Kugelmittelpunkte zufällig in x-, y- und z-Richtung verschoben.

Die Zufallsvariable R repräsentiert die verschiedenen Kugelradien, die einer vorgegebenen Größenverteilung folgen. Zur Berechnung der Abstände der Kugeln in der Gitterstruktur wird der Erwartungswert $E[R]$ der Kugelradien genutzt. Durch die Platzierung von Kugeln mit Radien größer als $E[R]$ sowie die zufällige Verschiebung der Positionen ist es möglich, dass sich Kugeln in der Initialisierungsebene überlappen. Da die Kugeln im Postprocessing gegebenenfalls vergrößert werden, um eine vorgegebene Porosität zu erhalten, stellt eine

Überlappung von Kugeln eine bewusste Abweichung zum Algorithmus von Elsner dar. Wie groß das von der Überlappung betroffene Kugelvolumen ist, wird nicht überprüft. In der Anwendung kann aber ein zusätzlicher Abstand der Kugeln in der Gitterstruktur relativ zum Erwartungswert für den Kugelradius angegeben werden und somit Einfluss auf die Größenordnung der Überlappung genommen werden.

Bei der Wahl des Abstandes zwischen den Gitterpositionen gilt es, einen Kompromiss aus überlappenden Kugeln in der Initialisierungsebene und großen Lücken zwischen den Kugeln der Initialisierungsebene zu finden. Dass Kugeln der Initialisierungsebene sich überlappen, tritt vor allem dann auf, wenn benachbarte Kugeln der Initialisierungsebene große Radien haben. Zudem können die Kugeln durch die zufällige Verschiebung der Positionen näher zusammenrücken. Ob dabei eine Grenze für eine maximale relative Überlappung eingehalten wird, wird nicht überprüft. Große Lücken in der Initialisierungsebene können hingegen auftreten, wenn benachbarte Kugeln kleine Radien haben. Zudem können die Kugeln sich hier durch die zufällige Verschiebung der Positionen weiter voneinander entfernen.

In Abbildung 2.1 ist eine der generierten Initialisierungsebenen dargestellt. Die Kugeln sind entsprechend ihrer Radien eingefärbt, die im dargestellten Beispiel einer Gleichverteilung folgen. Sowohl eine Überlappung zwischen mehreren Kugeln mit großen Radien und weitere Abstände zwischen Kugeln mit kleineren Radien sind erkennbar.

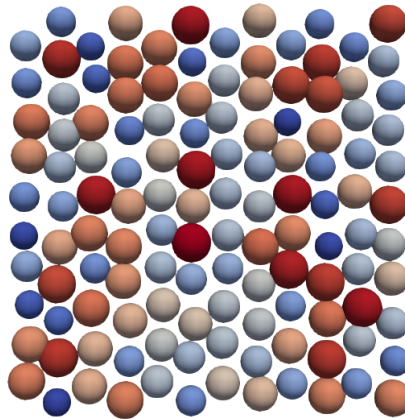


Abbildung 2.1: Initialisierungsebene aus Kugeln mit gleichverteilten Radien im Intervall $[7; 10]$ der Dimension 200×200 .

Nach der Initialisierung werden schrittweise die einzelnen Kugeln platziert. Im von Elsner beschriebenen Algorithmus folgen die Kugeln dabei den Richtungen eines Kraftfeldes, bis sie eine stabile Position erreichen. Eine stabile Position liegt zum Beispiel vor, wenn die zu platzierende Kugel des aktuellen Simulationsschritts mindestens drei bereits vorhandene Kugeln berührt. Dieser Prozess soll an die Sedimentation erinnern.

Auch im entwickelten Programm werden die einzelnen Kugeln schrittweise platziert. Dafür

gibt eine Zufallsvariable den Radius r der zu positionierenden Kugel vor. Die Zufallsvariable folgt einer vorgegebenen Verteilung. Welche Verteilungen genutzt werden, wird in Kapitel 2.5 beschrieben. Unter allen möglichen Positionen für eine neue Kugel wird die mit der niedrigsten z -Koordinate ausgewählt, um dort die Kugel mit dem Radius r zu platzieren. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis der gesamte Raum mit Kugeln befüllt ist und eine vollständige Kugelpackung entstanden ist.

Für die Positionierung einer Kugel wurde die Idee der stabilen Kugelposition von Elsner übernommen. Eine neue Kugel kann genau dort platziert werden, wo sie mindestens drei bereits vorhandene Kugeln berührt. Das bedeutet, eine mögliche Kugelposition wird aus drei bereits platzierten Kugeln und dem vorgegebenen Radius r berechnet. Dabei muss an der berechneten Position eine Kugel mit Radius r genau so platziert werden können, dass sie die drei bereits platzierten Kugeln jeweils berührt.

Aus Laufzeitgründen sollen nicht in jedem Sedimentationsschritt für einen vorgegebenen Radius r alle möglichen Kombinationen aus drei bereits platzierten Kugeln zu Berechnung einer neuen Kugelposition durchgegangen werden. Weil zum Beispiel drei Kugeln zu weit entfernt voneinander liegen, kommen nicht alle der Kombinationen für die Positionierung einer neuen Kugel infrage. Die Positionierung von Kugeln basiert im Programm daher auf sogenannten Pockets.

Der Begriff der Pocket wird angelehnt an die Beschreibung von Bennett [6] verwendet. Bennett hat Kugelpackungen aus Kugeln gleicher Größe konstruiert, indem einzelne Kugeln jeweils schrittweise an Positionen, an denen sie drei bereits platzierte Kugeln berühren, hinzugefügt wurden. Definiert wird eine Pocket von ihm als ein Punkt, der von drei Kugelmittelpunkten exakt einen Kugeldurchmesser entfernt liegt und zu allen weiteren Kugelmittelpunkten einen Abstand von mindestens einem Kugeldurchmesser hat.

In der vorliegenden Arbeit wird der Begriff der Pocket auch für Kugelpackungen aus Kugeln unterschiedlicher Größe genutzt. Eine Pocket ist dabei ein möglicher Mittelpunkt für eine neue Kugel mit vorgegebenen Radius r , an dem die neue Kugel so platziert wird, dass sie drei bereits platzierte Kugeln berührt. Sie ist somit eine mögliche Position für eine neue Kugeln und lässt sich aus drei gegebenen Kugeln und dem Radius r berechnen. Um eine Pocket zu berechnen, sind neben dem Radius r der neuen Kugel also genau drei bereits platzierte Kugeln nötig.

Kombinationen aus drei bereits platzierten Kugeln, die für die Positionierung einer neuen Kugel, also der Berechnung einer Pocket, infrage kommen, werden in einer Pocketliste gespeichert. In jedem Sedimentationsschritt werden für einen vorgegebenen Radius r nur die in der Pocketliste angegebenen Kombinationen durchgegangen. In Abhängigkeit von der Positionierung der drei Kugeln und dem vorgegebenen Radius ist eine Pocketberechnung nicht immer möglich. Von den Pockets, die berechnet werden konnten, wird diejenige mit der niedrigsten z -Koordinate ausgewählt und an dieser Stelle die neue Kugel platziert. Anschließend wird die Pocketliste aktualisiert und der nächste Iterationsschritt startet. Konnte mit dem vorgegebenen Radius keine Kugel platziert werden, startet der nächste Sedimentationsschritt mit einem neuen Radius. Der Algorithmus endet, wenn die Pocketlis-

te leer ist und somit keine weiteren Kugeln mehr platziert werden können. Der Rechenweg zur Pocketberechnung wird in Kapitel 2.2 beschrieben.

In der Pocketliste werden alle Kombinationen aus drei Kugeln gespeichert, die für die Berechnung einer Pocket infrage kommen. Nach der Platzierung einer neuen Kugel mit dem Radius r muss die Pocketliste aktualisiert werden. Die drei Kugeln, anhand derer die Position der letzten neuen Kugel berechnet wurde, werden als mögliche Kombination für eine Pocket gelöscht. Gleichzeitig entstehen neue Kombinationen aus drei Kugeln für mögliche Kugelpositionen. An diesen neuen Kombinationen sind die neue Kugel und jeweils zwei bereits platzierte Kugeln beteiligt. Um die Kombinationen zu ermitteln, die für eine Pocketberechnung infrage kommen, werden alle Paare aus Kugeln durchgegangen, deren Abstände zur neuen Kugel mit dem Radius r in x-, y- und z-Richtung jeweils kleiner sind, als $3 \cdot r_{max} + r$. r_{max} ist dabei der maximale Radius einer Kugel. Um die Länge der Pocketliste zu begrenzen, werden Kombinationen verworfen, deren berechnete Kugelposition zu einem vorgegeben Radius r außerhalb der Raumdimensionen liegt oder zu einer zu großen Überlappung (siehe Kapitel 2.3) mit einer der bereits platzierten Kugeln führt.

Insgesamt ist die Laufzeitkomplexität des Algorithmus abhängig von der Dimension des Raumes und den Kugelradien. n_x , n_y , n_z seien die Eingabegrößen für die x-, y- und z-Dimension der Kugelpackung in Relation zum Kugelradius. Die Laufzeitkomplexität zur Berechnung aller Kugeln in einer Kugelpackung liegt in $O(n_x) \cdot O(n_y) \cdot O(n_z)$ (siehe Formel 2.1). Für jede Kugel in einer Kugelpackung muss zudem die gesamte Pocketliste durchgegangen werden. Die Laufzeit für das Durchgehen der Pocketliste für eine Kugel kann abgeschätzt werden über $O(n_x) \cdot O(n_y)$ (siehe Formel 2.2), denn die Länge der Liste ist vor allem abhängig von der Größe der Grundfläche der Kugelpackung. Die Gesamtlaufzeit lässt sich dann als Produkt dieser Laufzeiten ausdrücken (siehe Formel 2.3).

$$f_{\text{Anzahl der Kugeln}} = O(n_x) \cdot O(n_y) \cdot O(n_z) \quad (2.1)$$

$$f_{\text{Anzahl der Pockets}} = O(n_x) \cdot O(n_y) \quad (2.2)$$

$$f_{\text{gesamt}} = f_{\text{Anzahl der Kugeln}} \cdot f_{\text{Anzahl der Pockets}} = O(n_x^2) \cdot O(n_y^2) \cdot O(n_z) \quad (2.3)$$

2.2 Berechnung der Pocketposition

2.2.1 Geometrisches Verfahren

Für die Platzierung einer neuen Kugel in der Kugelpackung müssen mögliche Positionen für diese neue Kugel berechnet werden. Solche möglichen Positionen werden Pockets genannt und für eine neue Kugel mit vorgegebenen Radius r_4 anhand von drei bereits platzierten Kugeln berechnet. Die neue Kugel K_4 soll so positioniert werden, dass sie die drei bereits platzierten Kugeln K_1 , K_2 und K_3 jeweils berührt. K_1 , K_2 und K_3 müssen sich jedoch nicht zwingend berühren. Jede Kugel K_i wird eindeutig beschrieben durch ihren Mittelpunkt $M_i = (x_i, y_i, z_i)$ im dreidimensionalen Raum und einen Radius r_i .

Von allen bereits platzierten Kugeln eignen sich nicht alle Kombinationen aus drei Kugeln zur Berechnung einer Pocket für den Radius r_4 . Ein Grund kann zum Beispiel die Positionierung dieser drei Kugeln zueinander sein, zum Beispiel wenn die drei Mittelpunkte auf einer Geraden liegen. Ein weiterer Grund können zu große Abstände zwischen K_1 , K_2 und K_3 sein. Zur Beschreibung des geometrischen Verfahrens wird angenommen, dass die vier Radien und die drei Kugelpositionen von K_1 , K_2 und K_3 so gewählt sind, dass eine Positionierung von K_4 mit vorgegebenen Radius r_4 unter der Nebenbedingung, K_4 berührt jeweils K_1 , K_2 und K_3 , möglich ist. Für die Fälle, bei denen eine Platzierung unter der Bedingung, K_4 berührt jeweils K_1 , K_2 und K_3 , nicht möglich ist, wird auf das später beschriebene Verfahren zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition und die Darstellung verschiedener Sonderfälle verwiesen (siehe Kapitel 2.4).

Gegeben sind für die Berechnung einer Pocket die Mittelpunkte M_1 , M_2 und M_3 sowie die Radien r_1 , r_2 und r_3 der drei bereits platzierten Kugeln und ein vorgegebener Radius r_4 für die neue Kugel, deren mögliche Position berechnet werden soll. Gesucht wird der Mittelpunkt M_4 der neuen Kugel.

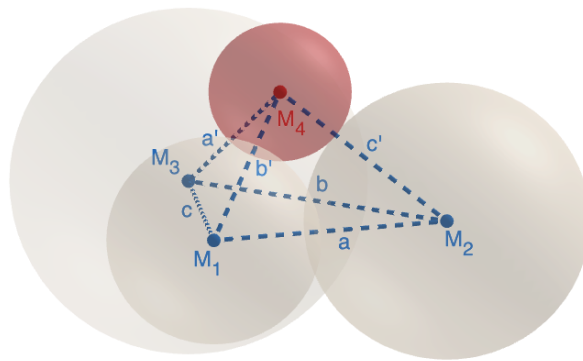


Abbildung 2.2: Kugelmittelpunkte M_1 , M_2 , M_3 und M_4 bilden eine Pyramide nach der Platzierung einer neuen Kugel.

Ausgangspunkt des geometrischen Verfahrens ist die Überlegung, dass nach einer Positio-

nierung der Kugel K_4 im Raum ein allgemeines Tetraeder bzw. eine Pyramide als Körper mit vier Eckpunkten und insgesamt vier dreieckigen Seitenflächen entsteht (siehe Abbildung 2.2). Die vier Kugelmittelpunkte M_1 bis M_4 bilden die Eckpunkte dieser Pyramide. Die Kantenlängen der Seitenfläche entsprechen dann den Abständen zwischen den jeweiligen Kugelmittelpunkten. Die Berechnung einer Pocket funktioniert genau dann, wenn sich aus den Abständen a , b und c (siehe Formeln 2.4 - 2.6) und den addierten Radien a' , b' und c' (siehe Formeln 2.7 - 2.9) sechs Kantenlängen ergeben, aus denen sich eine Pyramide bilden lässt. Zur Unterstützung der Beschreibung des geometrischen Verfahrens dienen die Abbildungen 2.3 - 2.8b. Dort werden die einzelnen Verfahrensschritte in aufeinander aufbauenden Teilabbildungen dargestellt. Im Anhang B sind die einzelnen Teilabbildungen in aufbauender Reihenfolge erneut aufgeführt.

$$a = ||M_1 - M_2|| \quad (2.4)$$

$$b = ||M_2 - M_3|| \quad (2.5)$$

$$c = ||M_1 - M_3|| \quad (2.6)$$

$$a' = r_4 + r_3 \quad (2.7)$$

$$b' = r_4 + r_1 \quad (2.8)$$

$$c' = r_4 + r_2 \quad (2.9)$$

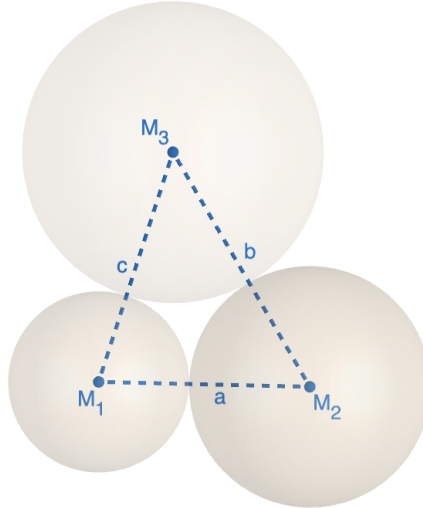


Abbildung 2.3: Geometrisches Verfahren - Visualisierung Pocketberechnung Teil 1: M_1 , M_2 und M_3 spannen die Grundfläche der Pyramide auf.

Die Mittelpunkte M_1 , M_2 und M_3 spannen eine Ebene E im dreidimensionalen Raum auf und bilden die Grundfläche der Pyramide (siehe Abbildung 2.3). In dieser Ebene E liegt der Punkt H_s , von dem aus ein zu E senkrechter Vektor der Länge h zur Spitze der Pyramide führt. Die Spitze ist die gesuchte Position M_4 und h ist die Höhe der Pyramide (siehe Abbildung 2.4). Das geometrische Verfahren funktioniert auch dann, wenn alle vier Mittelpunkte in einer Ebene liegen, auch wenn die Punkte M_1 bis M_4 dann keine Pyramide bilden. In diesem Fall beträgt die Höhe der Pyramide Null.

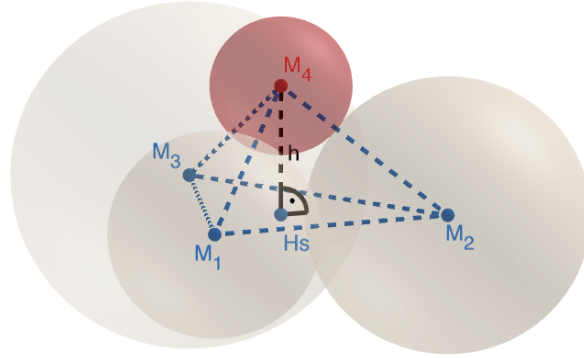


Abbildung 2.4: Pyramide mit den Kugelmittelpunkten M_1 , M_2 , M_3 und M_4 als Eckpunkte mit der Höhe h .

Zur Berechnung von M_4 wird mit der Vorstellung gearbeitet, dass die Seitenflächen der Pyramide so aufgeklappt sind, dass sie in der Ebene E liegen, in der auch die Grundfläche der Pyramide liegt (siehe Abbildung 2.5). Dabei sind die Positionen der Dreiecksspitzen P_{41} , P_{42} und P_{43} nicht bekannt, dafür aber alle Seitenlängen der aufgeklappten Dreiecke, die den Kantenlängen der Pyramide entsprechen. Die Seitenlängen a , b und c lassen sich als Abstände zwischen den Mittelpunkten M_1 , M_2 und M_3 berechnen (siehe Formeln 2.4 - 2.6) und bilden jeweils eine Grundlinie der drei aufgeklappten Seitenflächen, während a' , b' und c' die addierten Radien von K_4 mit jeweils einer der Kugeln K_1 , K_2 und K_3 sind (siehe Formeln 2.7 - 2.9).

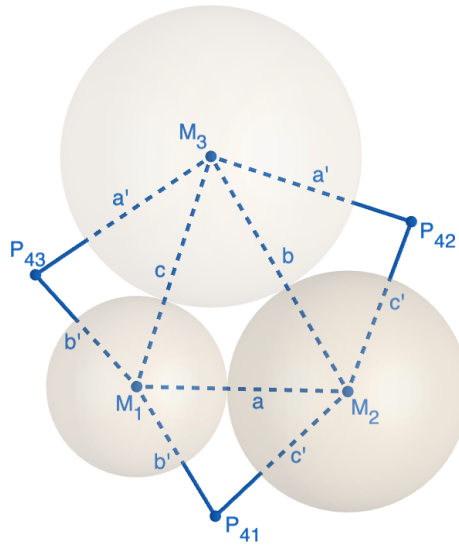
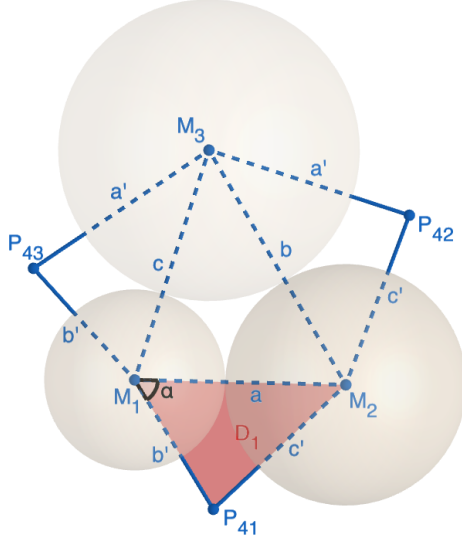


Abbildung 2.5: Geometrisches Verfahren - Visualisierung Pocketberechnung Teil 2: Grundfläche und drei aufgeklappte Seitenflächen der Pyramide.

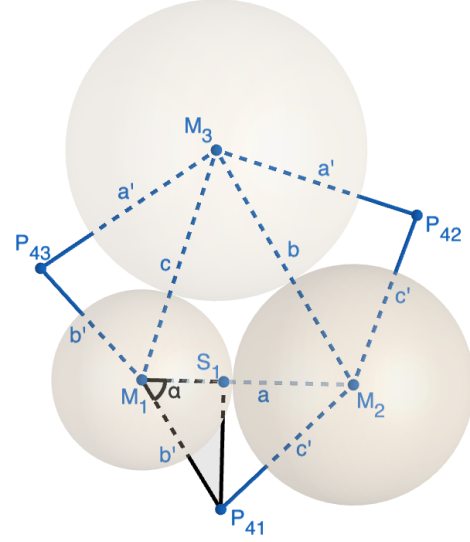
Der nächste Schritt des Verfahrens wird für eine der drei aufgeklappten Seitenflächen beschrieben und bei der Berechnung für die anderen beiden Seitenflächen analog ausgeführt. Die Bezeichnungen der Linien und Punkte beziehen sich auf das Dreieck D_1 in Abbildung

2.6a. Über den Kosinussatz (siehe Formel 2.10) kann für die aufgeklappte Seitenfläche anhand der drei Seitenlängen a , b' und c' der Winkel α zwischen der Grundlinie a des Dreiecks und genau einer Seitenlänge berechnet werden.

$$\alpha = \arccos\left(\left|\frac{a^2 + b'^2 - c'^2}{2 \cdot a \cdot b'}\right|\right) \quad (2.10)$$



(a) Winkel α im Dreieck D_1 über Kosinussatz zu bestimmen.



(b) S_1 als Schnittpunkt zwischen Höhe und Grundlinie von D_1 .

Abbildung 2.6: Geometrisches Verfahren - Visualisierung Pocketberechnung Teil 3 und 4.

In der Abbildung 2.6a liegt der Winkel α am Punkt M_1 . Dieser Punkt M_1 , der Punkt P_{41} und der Punkt S_1 bilden ein rechtwinkliges Dreieck (Abbildung 2.6b), wobei die Seitenlänge zwischen P_{41} und S_1 der Höhe der aufgeklappten dreieckigen Seitenfläche der Pyramide entspricht. S_1 liegt auf der Geraden der Grundlinie zwischen M_1 und M_2 . Mithilfe des Kosinus für rechtwinklige Dreiecke kann die Seitenlänge p_{s1} zwischen S_1 und M_1 bestimmt werden (siehe Formel 2.11) und anschließend die Position von S_1 (siehe Formel 2.14). S_2 und S_3 (siehe Abbildung 2.7a und 2.7b) können analog bestimmt werden (siehe Formeln 2.12-2.13 und 2.15-2.16).

$$p_{s1} = \cos(\alpha) \cdot b' \quad (2.11)$$

$$p_{s2} = \cos(\beta) \cdot c' \quad (2.12)$$

$$p_{s3} = \cos(\gamma) \cdot a' \quad (2.13)$$

$$S_1 = M_1 + \frac{p_{s1}}{||\overrightarrow{M_1 M_2}||} \cdot \overrightarrow{M_1 M_2} \quad (2.14)$$

$$S_2 = M_2 + \frac{p_{s2}}{||\overrightarrow{M_2 M_3}||} \cdot \overrightarrow{M_2 M_3} \quad (2.15)$$

$$S_3 = M_3 + \frac{p_{s3}}{||\overrightarrow{M_3 M_1}||} \cdot \overrightarrow{M_3 M_1} \quad (2.16)$$

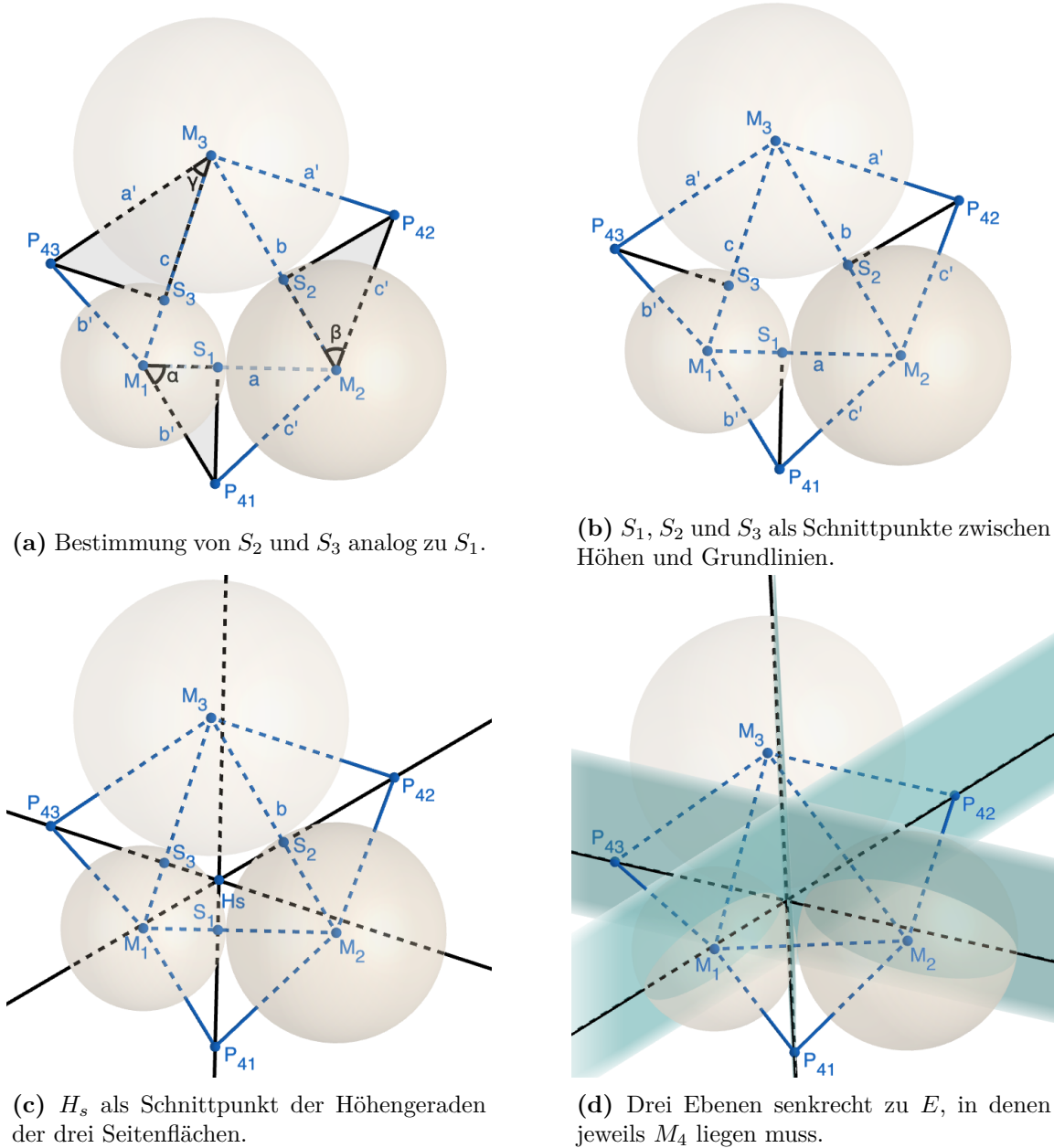


Abbildung 2.7: Geometrisches Verfahren - Visualisierung Pocketberechnung Teil 5 bis 8.

S_1 , S_2 und S_3 sind jeweils der Aufpunkt einer Geraden (siehe Formeln 2.17 - 2.19) mit einem Richtungsvektor, der senkrecht zur Grundlinie des jeweiligen aufgeklappten Dreiecks und in der Ebene E liegt (siehe Abbildung 2.7c). Diese Geraden g_1 , g_2 und g_3 können jeweils als Schnittgerade zwischen zwei Ebenen interpretiert werden (siehe Abbildung 2.7d). Die eine Ebene ist die Ebene E und in der anderen Ebene, die wiederum senkrecht zu E steht, muss jeweils M_4 liegen. Dies kann veranschaulicht werden, indem die aufgeklappten Seitenflächen der Pyramide solange eingeklappt werden, bis sich die drei Spitzen der dreieckigen Seitenflächen berühren. Der Punkt, an dem sich die Spitzen der Seitenflächen berühren, ist der gesuchte Punkt M_4 . Während des Prozesses des Einklappens bewegen

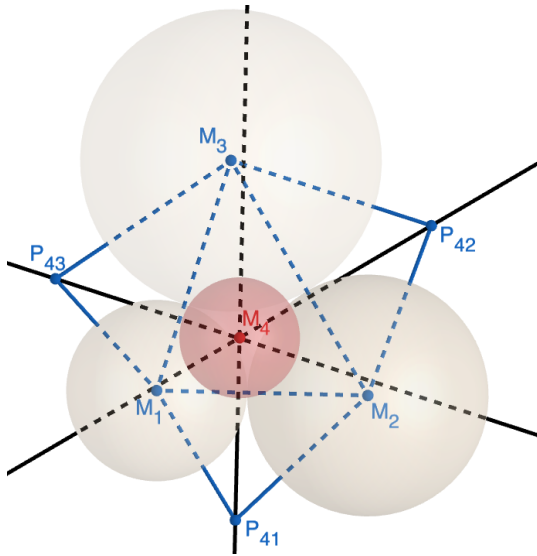
sich die Spitzen der Seitenflächen in der jeweiligen Ebene.

$$g_1 : \vec{x} = S_1 + \lambda_1 \cdot (\vec{n} \times \overrightarrow{M_1 M_2}) \quad (2.17)$$

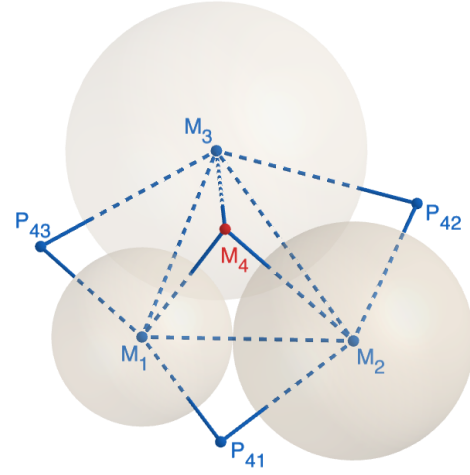
$$g_2 : \vec{x} = S_2 + \lambda_2 \cdot (\vec{n} \times \overrightarrow{M_2 M_3}) \quad (2.18)$$

$$g_3 : \vec{x} = S_3 + \lambda_3 \cdot (\vec{n} \times \overrightarrow{M_1 M_3}) \quad (2.19)$$

Als nächstes wird der Schnittpunkt H_s der drei Geraden g_1 , g_2 und g_3 bestimmt. Dieser muss der Lotfußpunkt der Pyramide sein, der in der Ebene E und senkrecht unterhalb der Spitze der Pyramide liegt. Im Programm wird jedoch kein Schnittpunkt berechnet, sondern ein Lotfußpunkt von windschiefen Geraden, da aufgrund der Floating-Point-Arithmetik kein Schnittpunkt existieren muss, sondern die Geraden mit sehr geringem Abstand aneinander vorbeilaufen können.



(a) M_4 als Mittelpunkt der neuen Kugel senkrecht über H_s .



(b) Pyramide mit den Eckpunkten M_1 , M_2 , M_3 und M_4 .

Abbildung 2.8: Geometrisches Verfahren - Visualisierung Pocketberechnung Teil 9 und 10.

Senkrecht über H_s muss M_4 liegen (siehe Abbildung 2.8a). Der Abstand von H_s und M_4 entspricht der Höhe h der Pyramide. Die Höhe h wird über die Volumenformel des allgemeinen Tetraeders von Leonhard Euler (siehe Formeln 2.20 - 2.26) bestimmt. Die Position M_4 kann nun ausgehend über den Aufpunkt H_s in Richtung des Normalenvektors $\vec{n}$ von E mit Abstand h bestimmt werden (siehe Formel 2.27). M_1 , M_2 , M_3 und M_4 bilden eine Pyramide (siehe Abbildung 2.8b).

$$f_a = b^2 + b'^2 + c^2 + c'^2 - a^2 - a'^2 \quad (2.20)$$

$$f_b = a^2 + a'^2 + c^2 + c'^2 - b^2 - b'^2 \quad (2.21)$$

$$f_c = a^2 + a'^2 + b^2 + b'^2 - c^2 - c'^2 \quad (2.22)$$

$$\delta = a^2 \cdot b^2 \cdot c^2 + a^2 \cdot b'^2 \cdot c'^2 + a'^2 \cdot b^2 \cdot c'^2 + a'^2 \cdot b'^2 \cdot c^2 \quad (2.23)$$

$$V = \frac{1}{12} \cdot \sqrt{a^2 \cdot a'^2 \cdot f_a + b^2 \cdot b'^2 \cdot f_b + c^2 \cdot c'^2 \cdot f_c - \delta} \quad (2.24)$$

$$A = \frac{1}{4} \cdot \sqrt{(a + b + c) \cdot (-a + b + c) \cdot (a - b + c) \cdot (a + b - c)} \quad (2.25)$$

$$h = \frac{3 \cdot V}{A} \quad (2.26)$$

$$M_4 = H_s \pm \frac{h}{||\vec{n}||} \cdot \vec{n} \quad (2.27)$$

Wenn h größer 0 ist, stehen am Ende zwei verschiedene Positionen für M_4 in Abhängigkeit von der Richtung, von der aus ab H_s gegangen wird, zur Auswahl. Der eine Punkt liegt sozusagen oberhalb von E , der andere unterhalb. Im Programm wird immer der Punkt mit der höheren z-Koordinate ausgewählt, da davon ausgegangen wird, dass die Kugelpackung von unten nach oben befüllt wird und die Kugelpackung dementsprechend nach oben wachsen soll, nicht nach unten.

2.2.2 Verfahren zur Berechnung von überlappenden Kugelpositionen

Mit dem geometrischen Verfahren wurde bereits ein Verfahren zum Berechnen einer Pocket anhand von drei bereits platzierten Kugeln K_1 , K_2 und K_3 vorgestellt. Das geometrische Verfahren berechnet die neue Kugelposition zu einem vorgegebenen Radius r_4 unter der Bedingung, dass die neue Kugel so platziert wird, dass sie K_1 , K_2 und K_3 jeweils berührt. Die Positionierung unter der Bedingung, K_4 berührt K_1 , K_2 und K_3 , ist nicht möglich (siehe Kapitel 2.4), wenn der in Formel 2.24 beschriebene Wurzelterm sich nicht berechnen lässt, weil der Radikand negativ ist. Eine Überlappung von Kugeln soll gleichzeitig grundsätzlich möglich sein (siehe Kapitel 1.3). Daher sollen über ein weiteres Verfahren mögliche Kugelpositionen berechnet werden können, bei denen K_4 mindestens eine der drei Kugeln K_1 , K_2 und K_3 überlappt. Eine schwebende Platzierung einer Kugel soll nicht möglich sein. Das bedeutet, dass zwischen K_4 und den drei anderen Kugeln kein Abstand sein darf (siehe Formeln 2.28 - 2.30). Die Kugeln müssen sich entweder berühren oder überlappen.

$$||M_1 - M_4|| \leq r_1 + r_4 \quad (2.28)$$

$$||M_2 - M_4|| \leq r_2 + r_4 \quad (2.29)$$

$$||M_3 - M_4|| \leq r_3 + r_4 \quad (2.30)$$

Umgesetzt wird diese Idee, indem zunächst versucht wird, die Kugelposition zu einem vorgegebenen Radius r_4 aus drei bereits platzierten Kugeln über das beschriebene geometrische Verfahren zu berechnen. Falls dies jedoch nicht möglich ist, soll versucht werden, unter Beibehaltung des Radius r_4 eine Position für die neue Kugel so zu berechnen, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt oder überlappt. Die Positionen und Radien von K_1 , K_2 und K_3 bleiben dabei unverändert.

Zur Berechnung einer überlappenden Position wurden zwei Varianten erarbeitet. Für beide Verfahren ist der Einstiegspunkt die Formel 2.24 bei der Berechnung der Höhe des allgemeinen Tetraeders, dessen Eckpunkte die vier Kugelmittelpunkte M_1 bis M_4 sind. Die Verfahren starten jeweils, wenn sich der in Formel 2.24 beschriebene Wurzelterm nicht berechnen lässt, da der Radikand negativ ist. Die Kugel lässt sich dann nicht so platzieren, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt. Die im Folgenden beschriebene Berechnung stellt einen Versuch dar, die Kugel dennoch zu platzieren.

Der Radikand sei durch die Funktion in Formel 2.31 dargestellt. a , b und c sind jeweils die Abstände zwischen den Kugelmittelpunkten von K_1 , K_2 und K_3 (siehe Formel 2.4 - 2.6) und r_1 , r_2 und r_3 die Kugelradien von K_1 , K_2 und K_3 . Die Variable x der Funktion steht für den Radius r_4 . Die Formel entspricht dem nach r_4 -Potenzen geordnetem Radikanden aus Formel 2.24.

$$w(x) = x^2 \cdot a_{pq} + x \cdot b_{pq} + c_{pq} \quad (2.31)$$

mit:

$$\begin{aligned} a_{pq} = & a^2 \cdot (b^2 + c^2 - a^2 + r_1^2 + r_2^2 + 4r_3 \cdot (r_1 + r_2 - r_3)) \\ & + b^2 \cdot (a^2 + c^2 - b^2 + r_3^2 + r_2^2 + 4r_1 \cdot (r_3 + r_2 - r_1)) \\ & + c^2 \cdot (a^2 + b^2 - c^2 + r_3^2 + r_1^2 + 4r_2 \cdot (r_3 + r_1 - r_2)) \\ & - a^2 \cdot (r_1^2 + 4r_1r_2 + r_2^2) - b^2 \cdot (r_3^2 + 4r_2r_3 + r_2^2) - c^2 \cdot (r_3^2 + 4r_1r_3 + r_1^2) \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} b_{pq} = & 2a^2r_3 \cdot (b^2 + c^2 - a^2 + r_1^2 + r_2^2 - r_3^2 + r_3 \cdot (r_1 + r_2 - r_3)) \\ & + 2b^2r_1 \cdot (a^2 + c^2 - b^2 + r_3^2 + r_2^2 - r_1^2 + r_1 \cdot (r_3 + r_2 - r_1)) \\ & + 2c^2r_2 \cdot (a^2 + b^2 - c^2 + r_3^2 + r_1^2 - r_2^2 + r_2 \cdot (r_3 + r_1 - r_2)) \\ & - 2a^2r_1r_2 \cdot (r_1 + r_2) - 2b^2r_2r_3 \cdot (r_3 + r_2) - 2c^2r_1r_3 \cdot (r_3 + r_1) \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} c_{pq} = & a^2r_3^2 \cdot (b^2 + c^2 - a^2 + r_1^2 + r_2^2 - r_3^2) + b^2r_1^2 \cdot (a^2 + c^2 - b^2 + r_3^2 + r_2^2 - r_1^2) \\ & + c^2r_2^2 \cdot (a^2 + b^2 - c^2 + r_3^2 + r_1^2 - r_2^2) - a^2b^2c^2 - a^2r_1^2r_2^2 - b^2r_2^2r_3^2 - c^2r_1^2r_3^2 \end{aligned} \quad (2.34)$$

Variante: minimaler Überlapp

Bei der ersten Variante wird ein iteratives numerisches Verfahren zur Berechnung einer Kugelposition genutzt. Die vierte Kugel wird dabei so platziert, dass sie mindestens eine der drei anderen Kugeln K_1 , K_2 oder K_3 überlappt und der Überlapp minimal wird. Ein Abstand zwischen der neuen Kugel und einer der anderen Kugeln darf nicht entstehen. Es handelt es sich um ein Minimierungsproblem in drei Variablen mit Nebenbedingungen. Die drei Variablen sind die Koordinaten der Position der vierten Kugel. Zusätzlich gilt es, die

Nebenbedingungen zu beachten, dass der jeweilige Abstand zwischen K_4 zu den anderen Kugeln nicht größer werden darf, als die addierten Radien (siehe Formeln 2.28 - 2.30).

Als Minimierungsverfahren wird der Constrained Optimization BY Linear Approximation-Algorithmus (COBYLA) genutzt, der über die `scipy.optimize.minimize()`-Funktion aus der Python SciPy-Bibliothek [7] als Methode zur Verfügung steht. Der Funktion werden eine zu minimierende Funktion, ein Startwert und die Nebenbedingungen übergeben. Die zu minimierende Funktion berechnet das überlappende Volumen zwischen K_4 und den anderen drei Kugeln. Als Startwert wird die in der z-Koordinate leicht vergrößerte Position H_s aus dem geometrischen Verfahren übergeben (siehe Abbildung 2.7d).

Variante: Nullstellensuche der Wurzelfunktion

Bei der zweiten Varianten wird der Kugelradius so gewählt, dass der Radikand aus der Berechnung des Pyramidenvolumens (siehe Formel 2.24) nicht mehr negativ ist, sondern Null beträgt. Es handelt sich daher um eine Nullstellensuche der Funktion $w(x)$ aus Formel 2.31, also eine Nullstellensuche in einer Variablen. Die Nullstelle ist ein neuer Radius r_{neu} .

Die Berechnung der Kugelposition erfolgt mit dem neu bestimmten Radius r_{neu} anhand des geometrischen Verfahrens, eine ggf. folgende Platzierung der Kugel an dieser Position erfolgt jedoch mit dem ursprünglichen Radius r_4 . Hierbei gilt es zu beachten, dass ein Radius r_{neu} kleiner sein muss als der vorgegebene Radius r_4 , um die Nebenbedingungen, dass es keine Abstände zwischen K_4 und den anderen drei Kugeln darf, einzuhalten. Es wird also eine Kugelposition mit $r_{neu} < r_4$ berechnet, sodass K_4 die Kugeln K_1 , K_2 und K_3 berührt. Bei einer tatsächlichen Platzierung einer Kugel mit dem Radius $r_4 > r_{neu}$ an dieser berechneten Position, wird K_4 die Kugeln K_1 , K_2 und K_3 überlappen. Wenn hingegen eine Kugelposition mit $r_{neu} > r_4$ berechnet würde, sodass die vierte Kugel die drei anderen Kugel berührt, dann müsste an dieser Position eine Kugel mit dem kleineren Radius r_4 schwebend platziert werden. Eine Änderung des Radius von r_4 in r_{neu} wird nicht vorgenommen, da die Kugelradien insgesamt einer vorgegebenen Verteilung folgen sollen.

Für die Nullstellensuche wird die pq-Formel (2.35) zum Lösen von quadratischen Gleichungen genutzt, denn die Funktion $w(x)$ ist ein Polynom vom Grad zwei. Ist dabei die Diskriminante D der pq-Formel negativ, so hat $w(x)$ keine reelle Nullstelle. Da bereits $w(x)$ an der Stelle r_4 negativ ist, gilt $w(x) < 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$ und es kann kein passender Radius gefunden werden. Ist D positiv bzw. gleich Null, dann hat $w(x)$ zwei bzw. eine Nullstelle. Von den erhaltenen Nullstellen wird diejenige ausgewählt, die größer Null und kleiner r_4 und dabei näher an r_4 liegt. Ist keine der beiden Nullstellen größer Null und kleiner r_4 , dann kann für die Kombination unter dem vorgegebenen Radius r_4 keine Kugel platziert

werden.

$$x_{1;2} = -\frac{b_{pq}}{2 \cdot a_{pq}} \pm \sqrt{\underbrace{\left(\frac{b_{pq}}{2 \cdot a_{pq}}\right)^2 - \frac{c_{pq}}{a_{pq}}}_{=D}} \quad (2.35)$$

Auswahl eines Verfahrens

Erste Versuche, die beiden Varianten anzuwenden, haben Laufzeitvorteile bei der Nullstellensuche gezeigt. Bei dem Laufzeitvergleich wurden 28 Testfälle für die Kugelpositionen M_1 , M_2 und M_3 und die Radien r_1 , r_2 , r_3 und r_4 erstellt. In elf von diesen 28 Fällen kann die vierte Kugel über das geometrische Verfahren so platziert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt, in den anderen 17 Fällen ist dies nicht möglich und das jeweilige Verfahren zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition kommt zum Einsatz. Auch diese Verfahren finden nicht in allen Fällen eine Position für K_4 . Für den Laufzeitvergleich wurden alle Testfälle jeweils über 100 und 1000 Wiederholungen ausgeführt. Das Ergebnis ist in Tabelle 2.1 dargestellt. Die Laufzeittests beider Verfahren zeigen, dass die Optimierung des Überlapps die etwas mehr als fünffache Zeit gegenüber der Nullstellensuche benötigt.

Tabelle 2.1: Laufzeiten in Sekunden des Optimierungsverfahrens in drei Variablen und der Nullstellensuche in einer Variablen bei 100 bzw. 1000 Wiederholungen aller 28 Testfälle.

Anzahl Wiederholungen	Optimierungsverfahren	Nullstellensuche
100	6,46	1,24
1000	64,73	12,51

Der Grund für die Laufzeitunterschiede ist die Art des jeweiligen Verfahrens zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition. Das Verfahren zum Finden eines optimalen Überlapps arbeitet numerisch, während die Nullstellensuche analytisch erfolgt. Das iterative Optimierungsverfahren zum Finden einer Kugelposition mit minimalem Überlapp ist ein dreidimensionales Problem, da für die optimale Position die x-, y- und z-Koordinate bestimmt werden müssen. Zudem müssen die Nebenbedingungen überprüft werden. Die Nullstellensuche zum Ermitteln eines passenden Radius ist hingegen eine eindimensionale Problemstellung und kann analytisch gelöst werden. Zudem hat die Komplexität der Probleme Auswirkungen auf die Anzahl der Funktionsauswertungen. Beim Optimierungsverfahren lag die Anzahl der Funktionsauswertungen in den überprüften Testfällen meistens zwischen 50 und 100, in einigen Ausnahmen betrug sie sogar mehrere Hundert. Bei der Nullstellensuche ist hingegen nur eine Funktionsauswertung nötig, da es sich um die analytische Berechnung der pq-Formel handelt.

Aufgrund der hohen Laufzeiten des Optimierungsverfahren ist dieses aus Anwendungssicht nicht geeignet. Eine möglichst geringe Laufzeit ist in der Anwendung unbedingt notwendig,

da das gewählte Verfahren bei der Berechnung möglicher Kugelpositionen sehr oft aufgerufen wird. Die Anzahl der Aufrufe liegt bei den für die Auswertung gewählten Parametern (siehe Kapitel 3.1) bei über eine Million. Da sich die Kugeln am Ende ohnehin überlappen sollen und die Porosität durch Vergrößern der Kugeln im Postprocessing angepasst wird, ist das Finden einer optimalen Überlappung auch nicht zwingend erforderlich. Wichtig ist, dass die Überlappung innerhalb einer Toleranzgrenze bleibt. Dies kann durch beide Varianten erreicht werden.

Für den Laufzeitvorteil würde bei der Nullstellensuche der Nachteil in Kauf genommen werden müssen, dass nicht alle Fälle, bei denen eine Positionierung mit Überlappung möglich wäre, aufgelöst werden können. Eine nähere Beschreibung zu einem solchen Fall folgt in der Beschreibung der Sonderfälle (siehe Kapitel 2.4).

2.3 Qualitätsmaß Überlappung

Die Kugeln in einer Kugelpackung sollen in der Regel so platziert werden, dass sie sich berühren. Daher wird eine mögliche Kugelposition für eine neue Kugel K_4 aus drei bereits platzierten Kugeln K_1 , K_2 und K_3 berechnet, sodass K_4 die drei Kugeln K_1 , K_2 und K_3 berührt. Eine Überlappung von Kugeln innerhalb einer Toleranzgrenze soll jedoch möglich sein. Dieser sogenannte Überlapp kommt an zwei Stellen im Algorithmus zum Einsatz. Zum einen soll es, wie im Verfahren zur Berechnung von überlappenden Kugelpositionen beschrieben, möglich sein, eine vierte Kugelposition aus drei bereits platzierten Kugeln so zu berechnen, dass die vierte Kugel eine oder mehrere der drei anderen Kugel überlappt (siehe Kapitel 2.2.2). Zum anderen soll eine Kugel an einer berechneten Position platziert werden können, während sie irgendeine der umliegenden Nachbarkugeln überlappt. Dies müssen nicht nur die zur Berechnung der Position M_4 genutzten Kugeln K_1 , K_2 oder K_3 sein.

Die Überlappung wird relativ als Verhältnis von überlappendem Volumen zum Kugelvolumen einer an der Überlappung beteiligten Kugel berechnet. Ist der berechnete relative Überlapp größer als eine in den Eingabeparametern der Software frei wählbare Toleranzgrenze $p_{overlap} \in [0; 1]$, kann an der berechneten Position keine Kugel platziert werden.

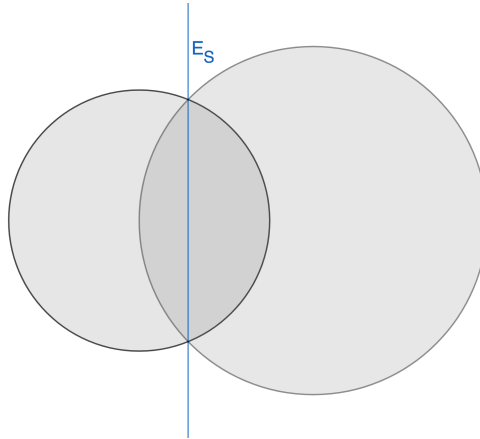


Abbildung 2.9: Querschnitt durch zwei sich schneidende Kugeln mit der eingezeichneten Schnittebene E_S .

Damit sich zwei Kugeln überlappen, muss der Abstand $d(M_1, M_2)$ zwischen den beiden Kugelmittelpunkten kleiner sein als ihre addierten Radien r_1 und r_2 . Wenn der Betrag der Differenz der Radien $|r_1 - r_2|$ größer ist als der Abstand $d(M_1, M_2)$ zwischen den Mittelpunkten, befindet sich die kleinere der beiden Kugeln mit ihrem vollständigen Volumen innerhalb der größeren Kugel. Zwei Kugeln haben daher eine gemeinsame Schnittebene E_S (siehe Abbildung 2.9), wenn die Bedingung in Formel 2.36 gilt.

$$|r_1 - r_2| < d(M_1, M_2) < r_1 + r_2 \quad (2.36)$$

Um das überlappende Volumen zwischen zwei Kugeln mit den Mittelpunkten $M_1 = (x_1, y_1, z_1)$ und $M_2 = (x_2, y_2, z_2)$ und den Radien r_1 und r_2 zu berechnen, muss die Ebene E_S der beiden Kugeln bestimmt werden, in der der Schnittkreis der beiden Kugeln liegt (siehe Abbildung 2.9). Hierfür werden die beiden Kugelgleichungen (siehe Formeln 2.37 - 2.38) gleichgesetzt. Das Ergebnis ist die Gleichung der Ebene E_S (siehe Formel 2.39) in Normalform mit dem Normalenvektor $||\vec{n}_{E_S}||$ (siehe Formel 2.40).

$$(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2 = r_1^2 \quad (2.37)$$

$$(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2 + (z - z_2)^2 = r_2^2 \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} E_S : & (2 \cdot (x_1 - x_2)) \cdot x + (2 \cdot (y_1 - y_2)) \cdot y + (2 \cdot (z_1 - z_2)) \cdot z \\ & = r_2^2 + x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 - r_1^2 - x_2^2 - y_2^2 - z_2^2 \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$||\vec{n}_{E_S}|| = 2 \cdot ||M_1 - M_2|| \quad (2.40)$$

Mithilfe der Hesseschen Normalform können die Abstände d_{E1} und d_{E2} der beiden Kugelmittelpunkte zur Ebene E_S bestimmt werden:

$$d_{E1} = \left| \frac{2 \cdot \langle M_1, M_1 - M_2 \rangle - ||M_1||^2 + ||M_2||^2 - r_1^2 - r_2^2}{2 \cdot ||M_1 - M_2||} \right| \quad (2.41)$$

$$d_{E2} = \left| \frac{2 \cdot \langle M_2, M_1 - M_2 \rangle - ||M_1||^2 + ||M_2||^2 - r_1^2 - r_2^2}{2 \cdot ||M_1 - M_2||} \right| \quad (2.42)$$

Anhand dieser Abstände und mithilfe der Formeln für Kugelvolumen und Kugelsegmente V_{KS1} und V_{KS2} (siehe Formeln 2.43 - 2.44) kann dann das überlappende Volumen U der beiden Kugeln berechnet werden:

$$V_{KS1} = \frac{\pi}{3} \cdot (r_1 - d_{E1})^2 \cdot (3r_1 - (r_1 - d_{E1})) \quad (2.43)$$

$$V_{KS2} = \frac{\pi}{3} \cdot (r_2 - d_{E2})^2 \cdot (3r_2 - (r_2 - d_{E2})) \quad (2.44)$$

$$U = \begin{cases} V_{KS1} + V_{KS2} & : d_{E1} \leq d(M_1, M_2) \quad \text{und} \quad d_{E2} \leq d(M_1, M_2) \\ V_{KS1} + (\frac{4}{3}\pi \cdot r_2 - V_{KS2}) & : d_{E1} > d(M_1, M_2) \quad \text{und} \quad d_{E2} \leq d(M_1, M_2) \\ (\frac{4}{3}\pi \cdot r_1 - V_{KS1}) + V_{KS2} & : d_{E1} \leq d(M_1, M_2) \quad \text{und} \quad d_{E2} > d(M_1, M_2) \end{cases} \quad (2.45)$$

Es wurde ein Überlappkriterium implementiert, bei dem die Überlappung zwischen zwei Kugeln betrachtet wird. Nachdem eine neue Kugelposition M_4 für eine Kugel mit dem Radius r_4 berechnet wurde, muss überprüft werden, ob die Überlappung einer Kugel K_4 , die an der berechneten Position M_4 mit dem Radius r_4 platziert werden würde, zu ihren Nachbarkugeln innerhalb der frei wählbaren Grenze $p_{overlap}$ liegt. Das bedeutet, zwischen der Kugel K_4 und jeder ihrer Nachbarkugeln darf das Verhältnis aus überlappendem Volumen und dem Volumen der jeweiligen Nachbarkugel nicht größer sein als $p_{overlap}$. Zudem darf auch das Verhältnis aus überlappendem Volumen und dem Volumen der Kugel K_4 nicht größer sein als $p_{overlap}$.

Mathematisch kann dies folgendermaßen beschrieben werden: Sei $n_{overlap}$ die Anzahl der bereits platzierten Kugeln, die sich mit der neuen Kugel K_4 überlappen würden, und $O = \{O_1, \dots, O_{n_{overlap}}\}$ sei die Menge der Kugeln, die sich mit K_4 überlappen würden. Die Menge O kann auch die Kugeln K_1 , K_2 und K_3 enthalten, anhand derer die Position für K_4 berechnet wurde. U_i sei das überlappende Volumen zwischen O_i und K_4 und V_i das Volumen der Kugel O_i . V_{K_4} sei das Volumen von K_4 . Damit die neue Kugel K_4 tatsächlich an der berechneten Position platziert werden kann, muss $\forall i \in \{1, \dots, n_{overlap}\}$ gelten:

$$\frac{U_i}{V_i} \leq p_{overlap} \quad (2.46)$$

$$\frac{U_i}{V_{K_4}} \leq p_{overlap} \quad (2.47)$$

2.4 Sonderfälle

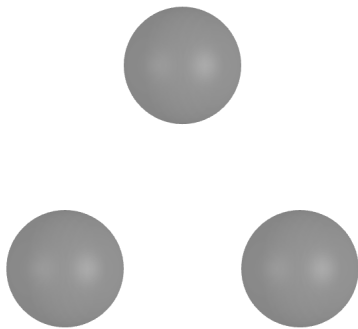
Eine mögliche Kugelposition wird aus drei bereits platzierten Kugel K_1 , K_2 und K_3 sowie einem vorgegebenen Radius r_4 berechnet. Nicht bei allen Kombinationen aus drei Kugeln der bereits generierten Kugelpackung kann eine neue Kugel mit vorgegebenem Radius so platziert werden, dass diese K_1 , K_2 und K_3 berührt. Gründe hierfür können zum Beispiel zu große Abstände zwischen K_1 , K_2 und K_3 sein oder die Lage von K_1 , K_2 und K_3 zueinander. Auch eine überlappende Positionierung der neuen Kugel zu einem vorgegebenen Radius r_4 ist in einigen Fällen nicht möglich. Anhand von Beispielen werden mögliche Fälle im Folgenden beschrieben.

Abstand zwischen drei Kugeln zu groß

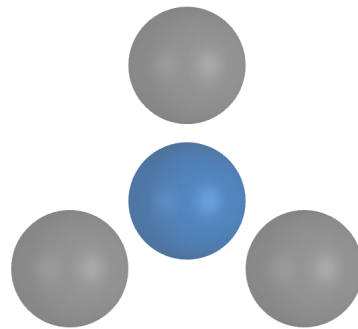
Als erstes werden zwei Fälle vorgestellt, bei denen die drei Kugeln K_1 , K_2 und K_3 so angeordnet sind, dass die einzelnen Abstände zwischen jeweils zwei der drei Kugeln passend wären für eine Platzierung einer Kugel K_4 mit vorgegebenem Radius r_4 , aber der Abstand aller drei Kugeln untereinander zu groß ist. Die Kugelpositionen und Radien zu diesen beiden Fällen sind in Tabelle 2.2 dargestellt und in den Abbildungen 2.10a und 2.11a visualisiert.

Tabelle 2.2: Beispielpositionen M_i und -radien r_i für die Sonderfälle A1 und A2 mit zu großem Abstand zwischen drei Kugeln für die vierte Kugel mit vorgegebenen Radius r_4 .

	Kugel 1		Kugel 2		Kugel 3		Kugel 4
	M_1	r_1	M_2	r_2	M_3	r_3	r_4
Fall A1	(0; 0; 0)	1	(4; 0; 0)	1	(2; 3,46; 0)	1	1
Fall A2	(0; 0; 0)	1	(4; 0; 0)	1	(2; 2,0001; 0)	1	1



(a) Kugeln K_1 , K_2 und K_3 .



(b) Schwebende Kugel K_4 hinzugefügt.

Abbildung 2.10: Darstellung der Kugelpositionen K_1 , K_2 , K_3 und K_4 im Sonderfall A1. Die Position von K_4 wurde händisch bestimmt.

Im Fall A1 (siehe Abbildung 2.10a) sind die Kugeln zu weit voneinander platziert, um die vierte Kugel K_4 mit $r_4 = 1$ zu platzieren. K_4 kann nicht K_1 , K_2 und K_3 gleichzeitig berühren und darf aber auch nicht schwebend platziert werden. Abbildung 2.10b zeigt, wie die blaue Kugel mit dem Radius $r_4 = 1$ schwebend im Raum hängt, ohne Kontakt zu einer der drei anderen Kugeln.

Die Rechnung für diesen Fall bricht bei der Berechnung der Höhe der durch die Mittelpunkte M_1 , M_2 , M_3 und M_4 gebildeten Pyramide ab. $w(x)$ (siehe Formel 2.31 - 2.34) ist an der Stelle $x = r_4 = 1$ kleiner Null und die berechneten Nullstellen sind $x_1 \approx 1,31$ und $x_2 \approx -3,31$ (siehe Abbildung 2.12). Somit ist $x_2 < 0$ und $x_1 > r_4$. Da der Radius zur Berechnung der vierten Kugelposition nicht vergrößert werden soll, würde ein solcher Fall im Sedimentationschritt mit dem aktuellen Radius r_4 ignoriert werden und in späteren Schritten für größere vorgegebene Radien wieder als Möglichkeit zur Positionierung einer Kugel in Betracht gezogen werden.

Bei dem anderen Fall A2 (siehe Abbildung 2.11a) ist der Abstand zwischen K_1 , K_2 und K_3 hingegen nur etwas zu groß, um dort eine Kugel mit dem vorgegeben Radius $r_4 = 1$ zu platzieren. $x_1 \approx 1,0000000025$ liegt als eine der beiden Nullstellen von $w(x)$ mit $|x_1 - r_4| \approx 2,5 \cdot 10^{-9}$ nahe dem vorgegebenen Radius $r_4 = 1$. In der Abbildung 2.12 ist die Nullstelle x_1 daher auch nicht erkennbar größer als r_4 und auch in Abbildung 2.11b ist nach dem händischen Hinzufügen einer weiteren Kugel an der Position $M_4 = (2, 0, 0)$ mit dem Radius $r_4 = 1$ optisch kein Abstand zu den anderen drei Kugeln erkennbar. Da aber $x_1 > r_4$ gilt, wird in dieser Kombination von K_1 , K_2 und K_3 zu dem vorgegebenen Radius $r_4 = 1$ keine Kugel platziert.

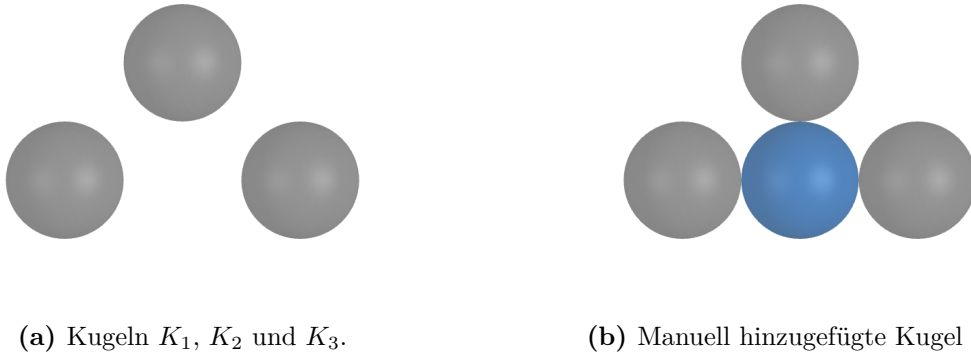


Abbildung 2.11: Darstellung der Kugelpositionen K_1 , K_2 , K_3 und K_4 im Sonderfall A2. Die Position von K_4 wurde händisch bestimmt.

Beide Beispiele haben genau eine Nullstelle x_1 größer als Null. Erst Kugeln mit einem Radius jeweils größer diesem Wert x_1 könnten so platziert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berühren. Negative Radien sind nicht möglich. Daher werden negative Nullstellen im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.

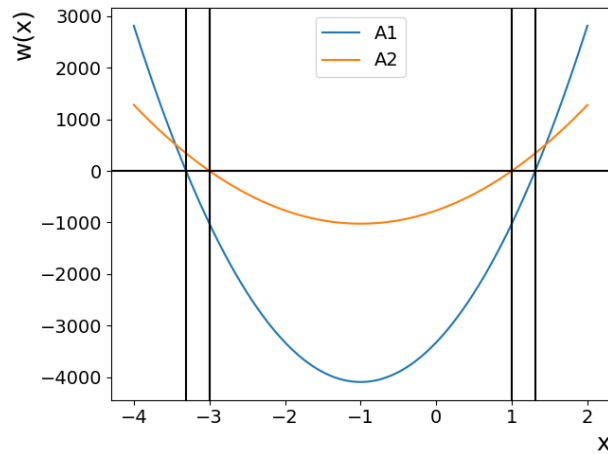


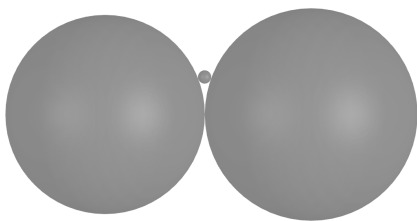
Abbildung 2.12: Funktion $w(x)$ für die Sonderfälle A1 und A2.

Große und kleine Kugeln

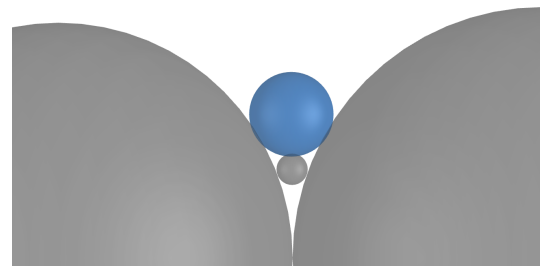
Die Kugelpositionen und -radien für die Beispiele der nächsten Sonderfälle sind in Tabelle 2.3 aufgeführt. Die Beispiele B1 bis B3 veranschaulichen mögliche Sonderfälle, wenn Kugeln mit deutlichen Größenunterschieden kombiniert werden.

Tabelle 2.3: Beispielpositionen M_i und -radien r_i für die Sonderfälle B1, B2 und B3 mit großen und kleinen Kugeln.

	Kugel 1		Kugel 2		Kugel 3		Kugel 4
	M_1	r_1	M_2	r_2	M_3	r_3	r_4
Fall B1	(0; 0; 0)	15	(31; 0; 0)	16	(14,9677; 5,6539; 0)	1	2,7
Fall B2	(0; 0; 0)	6	(7; 0; 0)	1	(1,8117; 6,7615; 0)	1	10
Fall B3	(0; 0; 0)	10	(12; 0; 0)	2	(0; 11; 0)	1	20



(a) Kugeln K_1 , K_2 und K_3 .



(b) Kugeln K_1 , K_2 , K_3 und K_4 .

Abbildung 2.13: Darstellung der Kugelpositionen K_1 , K_2 , K_3 und K_4 im Sonderfall B1.

Im Fall B1 (siehe Abbildung 2.13a) sind zwei große und eine kleine Kugel so platziert, dass

sie einander berühren. Es soll eine weitere kleine Kugel mit dem Radius $r_4 = 2,7$ platziert werden. K_4 kann jedoch nicht so positioniert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt. Die Höhe der Pyramide, deren Eckpunkte die Kugelmittelpunkte M_1 , M_2 , M_3 und M_4 sind, kann nicht berechnet werden, da der Radikand aus der Berechnung der Pyramidenhöhe, also die Funktion $w(x)$ an der Stelle $x = r_4 = 2,7$, negativ ist (siehe Abbildung 2.14). $w(x)$ hat die Nullstellen $x_1 \approx 2,507$ und $x_2 \approx 0,538$. Nur Kugeln mit einem Radius in dem Intervall $[0,538; 2,507]$ können so platziert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berühren. Beide Nullstellen sind kleiner als der ursprünglich vorgegebene Radius $r_4 = 2,7$ und jeweils größer Null. Die größere der beiden Nullstellen wird ausgewählt, da sie näher an $r_4 = 2,7$ liegt, und die Kugelposition M_4 für eine Kugel mit dem Radius $r_{neu} = x_1 \approx 2,507$ mit dem geometrischen Verfahren berechnet. An der Position M_4 wird dann eine Kugel mit dem Radius $r_4 = 2,7 > r_{neu} \approx 2,507$ platziert, wenn eine über die Eingabeparameter der Software frei wählbare Toleranzgrenze des überlappenden Volumens eingehalten wird. Die neue Kugel wird die drei anderen Kugeln überlappen, da die Position für eine Kugel K_4 mit kleinerem Radius berechnet wurde, so dass diese K_1 , K_2 und K_3 berührt, aber schließlich eine größere Kugel platziert werden soll. In dem vorliegenden Beispiel beträgt das durchschnittliche überlappende Volumen von K_4 zu den drei anderen Kugeln ungefähr $1,95 \cdot 10^{-5}$.

In Abbildung 2.13b sind alle vier Kugeln dargestellt. Die neu platzierte Kugel K_4 ist blau. Von den beiden großen Kugeln K_1 und K_2 ist jeweils nur ein Ausschnitt abgebildet, um eine nähere Darstellung des überlappenden Bereichs zu erhalten.

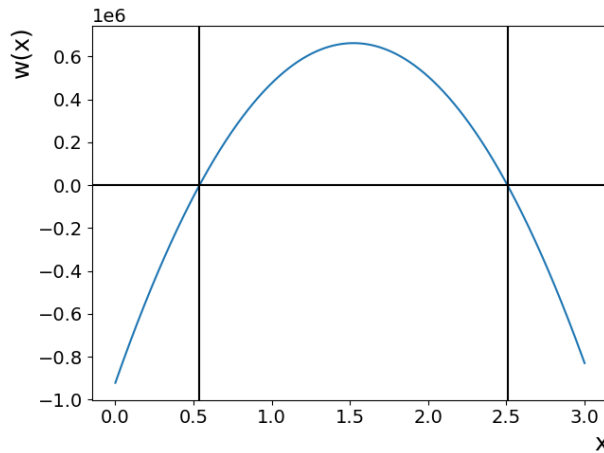


Abbildung 2.14: Funktion $w(x)$ für den Sonderfall B1.

Im Fall B2 (siehe Abbildung 2.15a) soll zu einer großen und zwei kleinen Kugeln eine weitere große Kugel hinzugefügt werden. Die beiden kleinen Kugeln M_2 und M_3 berühren dabei jeweils die große Kugel M_1 und sind auf der Oberfläche der großen Kugel verteilt. Der Winkel zwischen den Strecken $\overline{M_1 M_2}$ und $\overline{M_1 M_3}$ beträgt dabei 75° . Unter dem gegebenen Radius $r_4 = 10$ kann keine neue Kugel so platziert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt. Auch in diesem Fall bricht die Berechnung ab, da $w(x)$ an der Stelle $x = r_4 = 10$ negativ ist. Eine Nullstelle von $w(x)$ ist $x_1 \approx 15,681$ (siehe Abbildung 2.16). Die andere Nullstelle ist negativ. Das bedeutet, nur Kugeln mit einem Radius größer als $x_1 \approx 15,681$ könnten

anliegend an K_1 , K_2 und K_3 platziert werden. Da aber $r_4 = 10$ kleiner ist als diese Grenze $x_1 \approx 15,681$ wird in diesem Fall keine Kugelposition berechnet. Die Kombination K_1 , K_2 und K_3 würde im laufenden Programm aber für spätere Sedimentationsschritte zum Positionieren einer Kugel mit größerem Radius in Frage kommen.

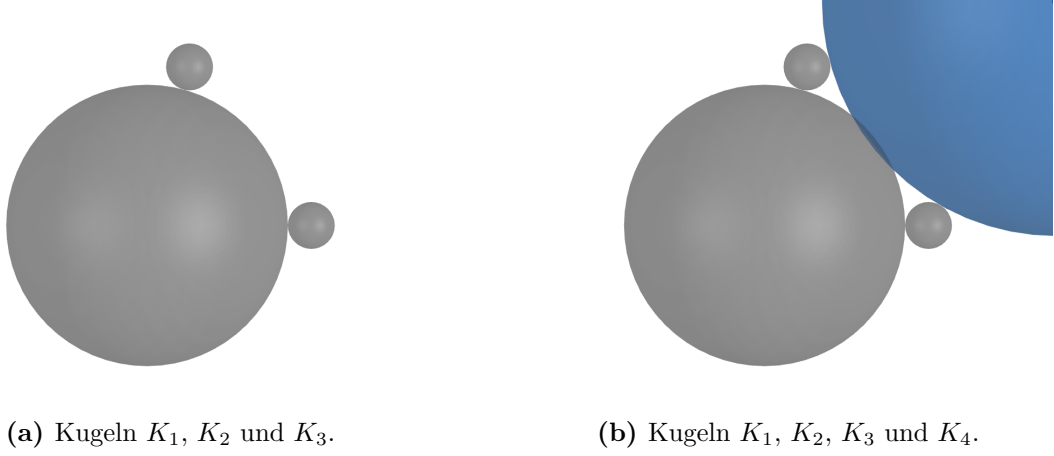


Abbildung 2.15: Darstellung der Kugelpositionen K_1 , K_2 , K_3 und K_4 im Sonderfall B2. Position von K_4 wurde über die Methode des minimalen Überlapps berechnet.

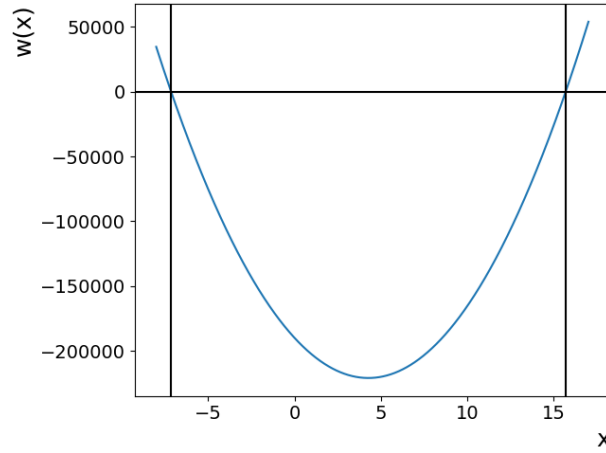


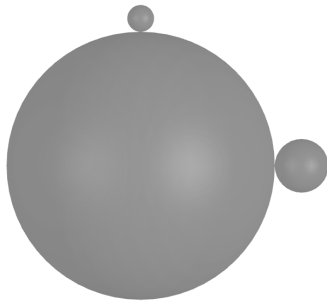
Abbildung 2.16: Funktion $w(x)$ für den Sonderfall B2.

In der Theorie wäre es in diesem Beispiel möglich, die Kugel K_4 mit dem Radius $r_4 = 10$ überlappend zu K_1 , K_2 und K_3 zu platzieren. Eine mögliche Lösung hierzu ist in Abbildung 2.15b dargestellt, wobei von der neu platzierten blauen Kugel K_4 nur ein Ausschnitt abgebildet ist. Die abgebildete Position der Kugel K_4 wurde hier mit dem Verfahren zur Berechnung einer Kugelposition mit minimalem Überlapp (siehe Kapitel 2.2.2) berechnet. Mit der im Programm verwendeten Nullstellensuche kann das Verfahren jedoch keine Position finden. Würde $r_{neu} = x_1 \approx 15,681$ gewählt werden, dann würde eine Position M_4 für eine vierte Kugel mit dem Radius 15,681 berechnet werden. Wenn an dieser Position M_4 eine Kugel mit Radius $r_4 = 10$ platziert werden würde, dann hätte diese Kugel keinen Kontakt zu K_1 , K_2 und K_3 .

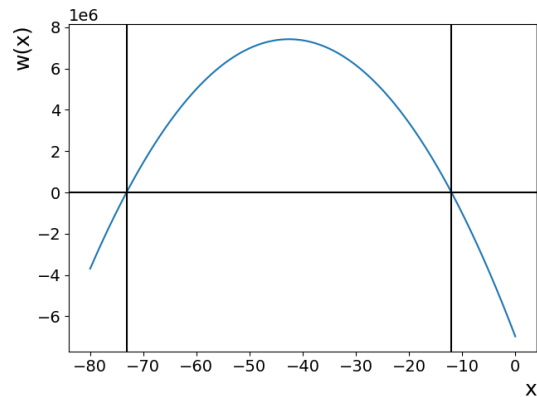
Dieses Beispiel zeigt, dass das gewählte Verfahren nicht in der Lage ist, alle Fälle mit einer überlappenden Positionierung aufzulösen, auch wenn eine überlappende Positionierung grundsätzlich möglich wäre. In der Anwendung stellt dies jedoch kein Problem dar, da die Kombination K_1 , K_2 und K_3 als Möglichkeit zur Positionierung einer Kugel mit größerem Radius in einem späteren Sedimentationsschritt erhalten bleibt. Zudem wird die geometrische Berechnung einer Kugelposition mit K_4 berührt K_1 , K_2 und K_3 bevorzugt.

Ein ähnliches Beispiel ist der Fall B3 (siehe Abbildung 2.17a). Auch hier soll zu einer großen und zwei kleinen Kugeln eine weitere große Kugel hinzugefügt werden. Die beiden kleinen Kugeln berühren jeweils die große Kugel und sind mit einem Winkel von 90° auf der Oberfläche der großen Kugel verteilt. Mit dem vorgegebenen Radius $r_4 = 20$ kann keine Kugel so platziert werden, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt.

Im Gegensatz zum Fall B2 hat dieses Beispiel jedoch mit $x_1 \approx -12,005$ und $x_2 \approx -73,157$ nur negative Nullstellen (siehe Abbildung 2.17b). Nur im Intervall von $[-73,157; -12,005]$ ist die Funktion $w(x)$ größer als Null. Negative Radien sind jedoch nicht möglich. Daraus folgt, dass zu der Kombination von K_1 , K_2 und K_3 keine Kugel ohne Überlappung platziert werden kann. Im laufenden Programm werden K_1 , K_2 und K_3 daher nicht als mögliche Kombination zur Positionierung einer neuen Kugel betrachtet.



(a) Kugeln K_1 , K_2 und K_3 im Sonderfall B3.



(b) Funktion $w(x)$ für den Sonderfall B3.

Abbildung 2.17: Kugelpositionen K_1 , K_2 und K_3 sowie die Funktion $w(x)$ im Sonderfall B3.

Drei Kugeln nahe einer Geraden

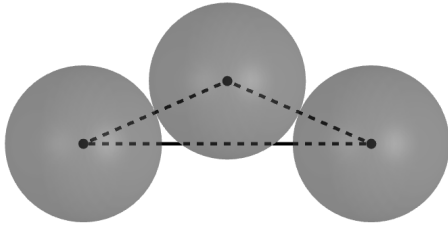
Im Folgenden werden drei Sonderfälle vorgestellt, bei denen die Mittelpunkte M_1 , M_2 und M_3 der drei vorgegebenen Kugeln ein stumpfwinkliges Dreieck bilden bzw. nahe oder auf einer Geraden liegen und die Kugelradien so gewählt sind, dass sich keine Kugel mit dem vorgegebenen Radius r_4 platzieren lässt. Die Kugelpositionen und -radien sind in Tabelle 2.4 aufgeführt.

Im ersten Beispiel C1 (siehe Abbildung 2.18a) haben alle Kugeln den gleichen Radius

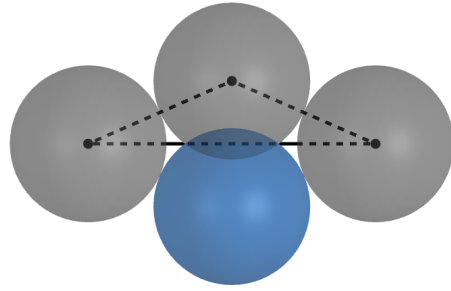
Tabelle 2.4: Beispielpositionen M_i und -radien r_i für die Sonderfälle C1, C2 und C3 bei denen K_1 , K_2 und K_3 in einem stumpfwinkligen Dreieck so angeordnet sind, dass sich keine Position der Kugel K_4 mit dem Radius r_4 berechnen lässt.

	Kugel 1		Kugel 2		Kugel 3		Kugel 4
	M_1	r_1	M_2	r_2	M_3	r_3	r_4
Fall C1	(0; 0; 0)	1	(3,666; 0; 0)	1	(1,833; 0,8; 0)	1	1
Fall C2	(0; 0; 0)	0,5	(1,9667; 0,7364; 0)	1,5	(6; 0; 0)	2	3,5
Fall C3	(0; 0; 0)	2	(3; 0; 0)	1	(6; 0; 0)	2	6

$r = 1$. Die Kugelmittelpunkte M_1 , M_2 und M_3 bilden ein stumpfwinkliges Dreieck und liegen somit nahe einer Geraden. Die Berechnung der Pocketposition M_4 bricht bei der Berechnung der Höhe der Pyramide ab, da $w(x)$ an der Stelle $x = r_4 = 1$ negativ ist. Die Funktion hat die Nullstelle $x_1 = 1,5$ und eine negative Nullstelle $x_2 < 0$ (siehe Abbildung 2.19). Da $x_1 > r_4$ ist, wird für diese Kombination aus K_1 , K_2 und K_3 mit dem Radius $r_4 = 1$ keine Pocketposition berechnet.



(a) Kugeln K_1 , K_2 und K_3 .



(b) Manuell hinzugefügte Kugel.

Abbildung 2.18: Darstellung der Kugelpositionen K_1 , K_2 , K_3 und K_4 im Sonderfall C1. Position von K_4 wurde händisch bestimmt.

Analog zum Beispiel C1 verhält es sich mit dem nächsten Beispiel C2, das in Abbildung 2.20a dargestellt ist. Es handelt sich jedoch um ein Beispiel mit Kugeln unterschiedlicher Größe. Die Kugelmittelpunkte liegen nahe einer Geraden und die Berechnung der Pocket bricht ab, da $w(x)$ an der Stelle $x = r_4 = 0,5$ negativ ist. Für das Beispiel C2 hat die Funktion $w(x)$ die Nullstelle $x_1 \approx 16,475$ und eine negative Nullstelle (siehe Abbildung 2.20b). Keine der beiden Nullstellen befindet sich im Intervall $]0; r_4]$. Für den vorgegebenen Radius $r_4 = 0,5$ wird daher keine Pocket aus K_1 , K_2 und K_3 berechnet.

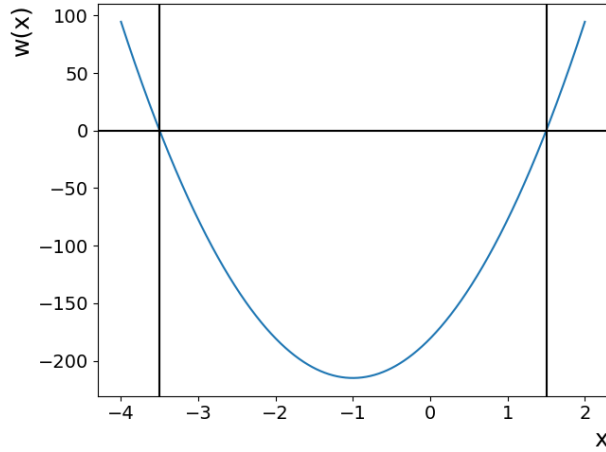
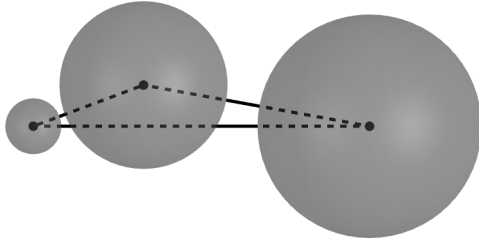
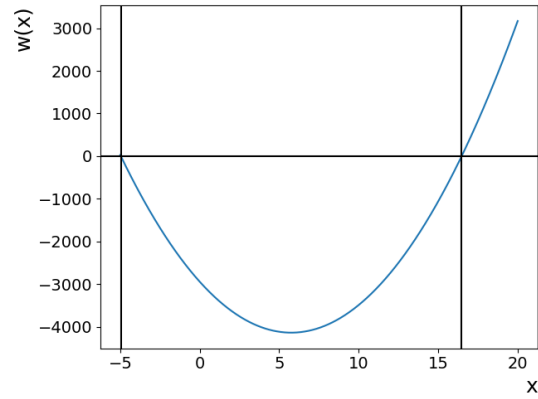


Abbildung 2.19: Funktion $w(x)$ für den Sonderfall C1.



(a) Kugeln K_1 , K_2 und K_3 im Sonderfall C2.



(b) Funktion $w(x)$ für den Sonderfall C2.

Abbildung 2.20: Kugelpositionen K_1 , K_2 und K_3 sowie die Funktion $w(x)$ im Sonderfall C2.

Das letzte Beispiel C3 (siehe Abbildung 2.21) behandelt den Fall, dass die drei Kugeln K_1 , K_2 und K_3 auf einer Geraden liegen. Die Vektoren $\overrightarrow{M_1M_2}$ und $\overrightarrow{M_1M_3}$ sind dann parallel, ihr Kreuzprodukt ist der Nullvektor. Dass die drei Kugeln exakt auf einer Geraden liegen, ist sehr unwahrscheinlich. Beim Generieren einer Kugelpackung wird aber die Methode zum Berechnen einer Pocket sehr oft aufgerufen, bei einer Kugelpackung der Dimension $200 \times 200 \times 200$ mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ mehrere Millionen Mal.

$$||\vec{n}|| < 10^{-9} \quad (2.48)$$

Da die Berechnung einer Pocket mithilfe des geometrischen Verfahrens in dem Fall, dass K_1 , K_2 und K_3 auf einer Geraden liegen, nicht möglich ist, wird der Fall bei der Berechnung des Normalenvektors $\vec{n}$ der Ebene E abgefangen, indem die Norm des Normalenvektors geprüft wird (siehe Formel 2.48). Wenn die drei Kugeln auf einer Geraden liegen, spannen sie keine Ebene auf. Der Normalenvektors $\vec{n}$ der Ebene E , in der die drei Mittelpunkte M_1 ,

M_2 und M_3 liegen sollen, wird als Kreuzprodukt der beiden Richtungsvektoren zwischen den drei Mittelpunkten berechnet. Im Fall C3 wäre $\vec{n} = \vec{0}$ und die Berechnung einer Pocketposition M_4 mithilfe des geometrischen Verfahrens wäre nicht möglich. K_1 , K_2 und K_3 werden als Kombination für die Berechnung einer weiteren Kugel verworfen, auch wenn es in einigen Fällen möglich sein kann, dass eine vierte Kugel K_4 so platziert werden kann, dass sie K_1 , K_2 und K_3 berührt.

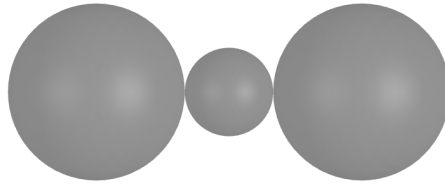


Abbildung 2.21: Kugeln K_1 , K_2 und K_3 im Sonderfall C3.

2.5 Verteilung der Kugelradien

Das übergeordnete Ziel ist es, die Struktur einer PTL nachzubilden. Es existieren Nano-CT-Aufnahmen, die Querschnitte durch eine reale PTL-Struktur zeigen (siehe Abbildung 2.22). In diesen Aufnahmen sind kugelförmige Partikel unterschiedlicher Größe erkennbar. Wie in Kapitel 1.2 beschrieben, ist es daher die Idee, die reale Struktur durch eine Kugelpackung aus Kugeln unterschiedlicher Größe nachzubilden. Die Kugeln sollen dabei einer vorgegebenen Größenverteilung folgen. Für die Wahl der Größenverteilung gibt es jedoch keine Vorgabe, da die Verteilung der Partikelgrößen einer realen Struktur nicht bekannt ist. Anforderungen an die Größenverteilung müssen daher aus dem Anwendungskontext abgeleitet werden.

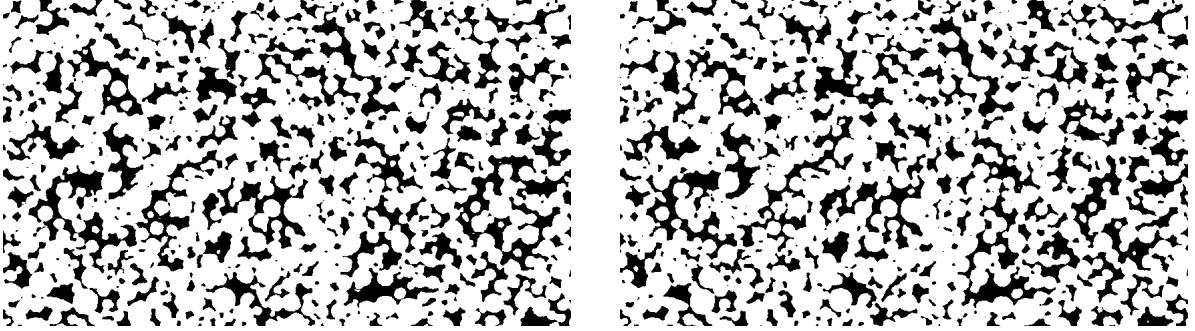


Abbildung 2.22: Zwei aufeinander folgende Schnittbilder eines Titan-Sinterkörpers mit einem Zeiss Xradia Nano-CT (Quelle: Deepjyoti Borah, IEK-14).

Die Nano-CT-Aufnahmen zeigen Querschnitte durch eine reale PTL-Struktur. Dementsprechend werden Querschnitte durch die kugelförmigen Partikel abgebildet. Es ist jedoch nicht bekannt, an welchen Stellen die Querschnitte durch die Partikel entstehen. Ein Querschnitt kann den Rand eines Partikels, die Mitte oder irgendwas dazwischen darstellen. Die Größenverteilung der Partikel lässt sich daher nicht trivial aus den Schnittbildern ableiten.

Als Größenverteilung der Kugelradien der nachgebildeten Struktur soll eine stetige Verteilung innerhalb von frei wählbaren positiven Intervallgrenzen ausgewählt werden. Dabei soll der maximale mögliche Kugelradius r_{max} nicht größer sein als der 1,5-fache minimale mögliche Kugelradius r_{min} . Insgesamt sollen folgende drei Bedingungen gelten:

$$r_{max}, r_{min} > 0 \quad (2.49)$$

$$r_{min} \leq r_{max} \quad (2.50)$$

$$r_{max} \leq 1,5 \cdot r_{min} \quad (2.51)$$

Hintergrund für diese Bedingungen 2.49 - 2.51 ist, dass die Größenunterschiede zwischen den Radien beschränkt werden, denn es wird vermutet, dass Sonderfälle, wie sie in Kapitel 2.4 beschrieben wurden, häufiger bei der Kombination von großen und kleinen Kugeln

aufzutreten. Aus dem gleichen Grund sollen auch keine bimodalen Verteilungen verwendet werden. Die geringen Größenunterschiede zwischen den Kugelradien und das Ausschließen von bimodalen Verteilungen scheinen jedoch aus Anwendungssicht keine Einschränkungen zu sein, denn die PTL-Schnittbilder aus den Nano-CT-Aufnahmen liefern keine Hinweise auf bimodale Größenverteilungen oder Kugeln stark unterschiedlicher Größe.

In der vorliegenden Arbeit wird mit zwei verschiedenen Größenverteilungen gearbeitet, einer stetigen Gleichverteilung und einer Beta-Verteilung. Beide Verteilungen sind Verteilungen innerhalb von Intervallgrenzen. Die stetige Gleichverteilung [8] im Intervall $[r_{min}; r_{max}]$ hat eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichte $f_g(x)$ (siehe Formel 2.53) und den Erwartungswert μ_g (siehe Formel 2.52).

$$\mu_g = \frac{r_{min} + r_{max}}{2} \quad (2.52)$$

$$f_g(x) = \begin{cases} \frac{1}{r_{max} - r_{min}} & : r_{min} < x < r_{max} \\ 0 & : x \leq r_{min} \quad \text{oder} \quad x \geq r_{max} \end{cases} \quad (2.53)$$

Die Beta-Verteilungen sind eine Familie von Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit den beiden Parametern $p, q > 0$ im Intervall $[0; 1]$ [9]. Eine Beta-Verteilung ist symmetrisch, wenn $p = q$ gilt. Allgemein hat eine Beta-Verteilung den Erwartungswert μ_b (siehe Formel 2.54) und die Dichte f_b , in der die Gamma-Funktion zum Einsatz kommt (siehe Formeln 2.55 - 2.57).

$$\mu_b = \frac{p}{p + q} \quad (2.54)$$

$$f_b(x) = \frac{1}{B(p, q)} x^{p-1} (1 - x)^{q-1} \quad (2.55)$$

$$\text{mit } B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p + q)} \quad (2.56)$$

$$\text{und } \Gamma(n) = (n - 1)! \quad (2.57)$$

Um eine symmetrische unimodale Verteilung der Kugelradien über die Beta-Verteilung zu erhalten, wurde $p, q = 2$ gewählt. Die Dichtefunktion mit $p, q = 2$ ist in Abbildung 2.23 dargestellt. Zudem wird die beta-verteilte Zufallsvariable X linear transformiert (siehe Formel 2.58), um statt einer Verteilung im Intervall $[0; 1]$ eine Verteilung im Intervall $[r_{min}; r_{max}]$ zu erhalten. Somit ergibt sich für die in der Software verwendete Beta-Verteilung der Erwartungswert $\mu_{b;2;2}$ (siehe Formel 2.59) und die Dichte $f_{b;2;2}$ (siehe Formel 2.60).

$$Y = (r_{max} - r_{min}) \cdot X + r_{min} \quad (2.58)$$

$$\mu_{b;2;2} = (r_{max} - r_{min}) \cdot \mu_b + r_{min} = (r_{max} - r_{min}) \cdot \frac{1}{2} + r_{min} \quad (2.59)$$

$$f_{b;2;2}(y) = \frac{1}{6(r_{max} - r_{min})} \cdot \left(\frac{y - r_{min}}{(r_{max} - r_{min})} - \left(\frac{y - r_{min}}{(r_{max} - r_{min})} \right)^2 \right) \quad (2.60)$$

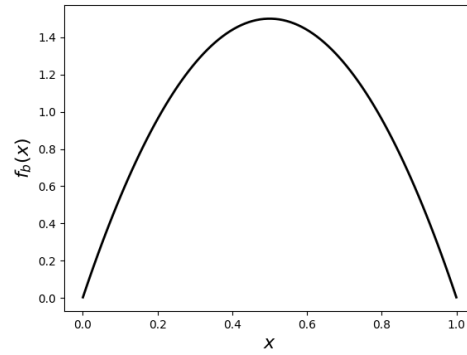


Abbildung 2.23: Dichtefunktion der Beta-Verteilung mit $p,q = 2$.

3 Auswertung

Mithilfe der entwickelten Software zur Erstellung von Kugelpackungen mit Kugeln unterschiedlicher Größe lassen sich Kugelpackungen verschiedener Dimensionen generieren. Beispielhaft ist eine der generierten Kugelpackungen der Dimension 200x200x200 in Abbildung 3.1 dargestellt. Die Kugeln sind entsprechend der Größe ihrer Radien eingefärbt.

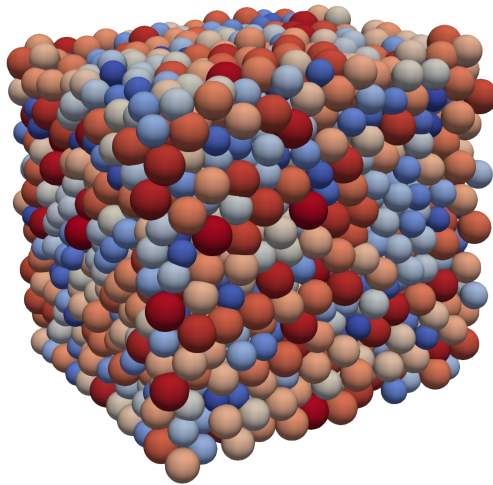


Abbildung 3.1: Kugelpackung der Dimension 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und $p_{overlap} = 0,1$ visualisiert in Paraview.

3.1 Auswahl sinnvoller Parameter

Die generierten Kugelpackungen sollen im Folgenden ausgewertet werden. Dabei soll zunächst eine anwendungsbezogene Auswertung erfolgen, bei der die Porositäten und die Struktur der generierten Kugelpackungen untersucht werden. Um die Struktur der Kugelpackungen zu analysieren, werden die Richtungen zwischen benachbarten Kugeln ausgewertet. In der Anwendung ist die Struktur der Kugelpackung relevant, da es das Ziel ist, Kugelpackungen zu generieren, um Strukturen einer realen PTL nachzubilden. Dafür sollten generierte und reale Strukturen in Merkmalen wie der Porosität übereinstimmen.

Die Struktur der Kugelpackung soll wie in der Seminararbeit [5] untersucht werden, indem

die Lage von direkt benachbarten Kugeln in den Kugelpackungen analysiert wird. Dafür werden die Richtungen direkt benachbarter Kugeln ausgewertet, die sich über zwei Winkel beschreiben lassen, einen azimuthalen Winkel $\varphi \in [0^\circ; 180^\circ[$ und einen polaren Winkel $\theta \in [0^\circ; 180^\circ]$. Direkt benachbarte Kugeln sind Kugeln, die sich berühren oder überlappen.

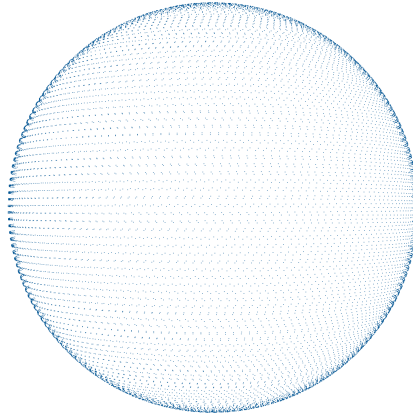


Abbildung 3.2: 12.000 Punkte, die gleichmäßig auf der Hälfte der Oberfläche einer Einheitskugel verteilt sind visualisiert in Paraview (Quelle: [5]).

Über die Untersuchung der Richtungen zwischen direkten Nachbarkugeln sollte bewertet werden, ob die Kugeln irregulär angeordnet sind. In der Seminararbeit wurde angenommen, dass eine irreguläre Anordnung der Kugeln eine gleichmäßige Verteilungen der Richtungen bedeutet. Mithilfe eines Algorithmus von Saff und Kuijlaars [10] wurden Punkte gleichmäßig auf der Oberfläche einer Kugel verteilt (siehe Abbildung 3.2) und deren Richtungen ausgehend vom Mittelpunkt bestimmt, um Verteilungen für den azimuthalen Winkel φ und den polaren Winkel θ bei gleichmäßig verteilten Richtungen zu erhalten. Der azimuthale Winkel φ folgt dann einer Gleichverteilung, der polare Winkel θ einer unimodalen Verteilung mit einem Maximum bei 90° (siehe Abbildung 3.3b). Die Dichtefunktion des polaren Winkels erinnert zudem an eine trigonometrische Verteilung, worauf auch die von Saff und Kuijlaars verwendete Formel mit Arkuskosinus-Funktion zur Berechnung des Winkels θ bei gleichmäßig verteilten Richtungen schließen lässt. Eine nähere Beschreibung des verwendeten Irregularitätsmaßes anhand von Richtungen zwischen benachbarten Kugeln ist im Anhang A zu finden und ist aus der Seminararbeit [5] entnommen.

Das Ergebnis für die Verteilung von θ für ein Sample der Seminararbeit aus fünf Kugelpackungen mit sich berührenden Kugeln gleicher Größe ist in Abbildung 3.3b dargestellt. Die Kugelpackungen haben die Dimension $700 \times 600 \times 200$ mit dem Kugelradius 10. Es konnte gezeigt werden, dass der azimuthale Winkel im Intervall $[0^\circ; 180^\circ[$ einer Gleichverteilung entsprechen kann, wie es bei gleichmäßig verteilten Richtungen zu erwarten ist. Der polare Winkel θ folgt hingegen einer bimodalen Verteilung mit Maxima in der geschätzten Dichtefunktion bei etwa 50° und 130° und entspricht somit nicht der Verteilung bei gleichmäßig verteilten Richtungen.

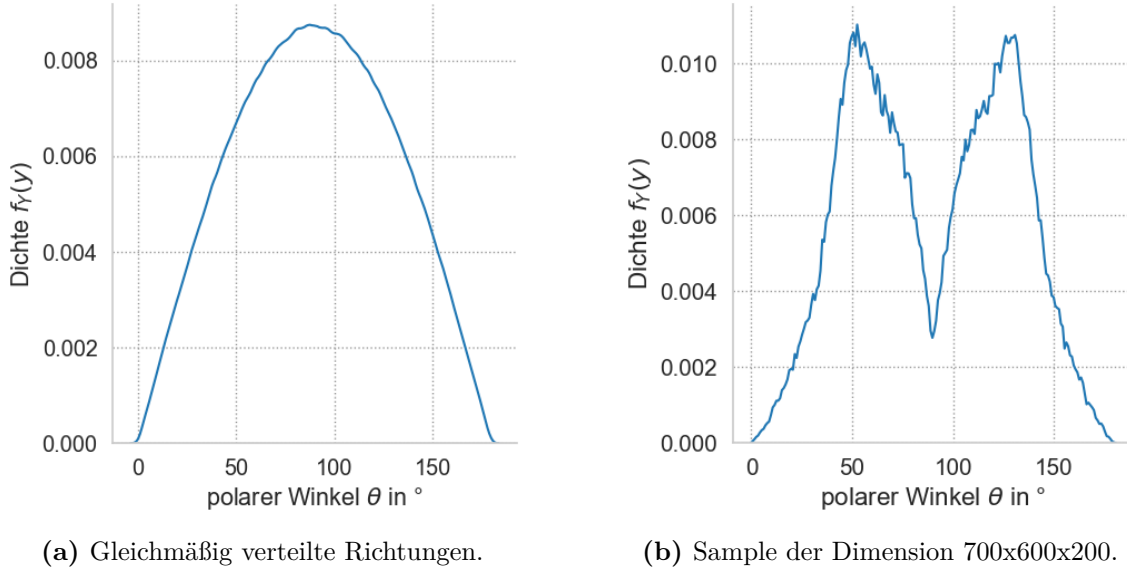


Abbildung 3.3: Kerndichteschätzer (kde) des polaren Winkels θ für gleichmäßig verteilte Richtungen und ein Sample der Dimension 700x600x200 mit gleich großen Kugeln mit Radius 10 (Quelle: [5]).

Als Grund für die Verteilung des polaren Winkels θ mit den Positionen der beiden Maxima bei etwa 50° und 130° wurde die Initialisierungsebene vermutet. Ohne die zufällige Verschiebung von Kugeln in der Initialisierungsebene konnten die Richtungen benachbarter Kugeln analytisch berechnet werden. Die berechneten Positionen lagen bei den in der Seminararbeit gewählten Parametern bei ungefähr 46° und 134° .

Zudem konnte im Rahmen der Seminararbeit gezeigt werden, dass die Initialisierungsebene Einfluss auf die Winkelverteilungen in den unteren Schichten einer Kugelpackung hat. Dies gilt für die beiden untersten Kugelebenen mit einer Höhe von etwa zwei Kugeldurchmessern. Insgesamt konnte für die Kugelpackungen mit Kugeln gleicher Größe gezeigt werden, dass keine irreguläre Struktur direkter Nachbarkugeln im Sinne von gleichmäßig verteilten Richtungen vorliegt. Da jedoch ebenfalls keine sich stets wiederholenden Strukturen auftraten, konnte die Struktur auch nicht als regulär bewertet werden.

Nach der Untersuchung der Struktur der Kugelpackung folgt eine Auswertung über das Auftreten von Sonderfällen beim Generieren von Kugelpackungen. Hierfür werden mögliche eintretende Fälle in der Pocketberechnung unterschieden und gezählt. Eine Überprüfung der Radienverteilung der generierten Testfälle wird nicht durchgeführt. Im Algorithmus wird in jedem Sedimentationsschritt für jede neu zu platzierende Kugel ein Radius r_4 durch eine beta- oder gleichverteilte Zufallsvariable vorgegeben. Für diesen Radius r_4 wird unter verschiedenen berechneten möglichen Positionen für eine neue Kugel die niedrigste Position ausgewählt und dort tatsächlich eine Kugel platziert. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis der gesamte Raum mit Kugeln gefüllt ist. Wenn dabei zu einem Radius r_4 keine mögliche Position gefunden wird, startet der nächste Sedimentationsschritt und ein neuer Radius r_4 wird vorgegeben. Da der Radius r_4 eines Sedimentationsschritts durch eine Zufallsvariable vorgegeben wird, sind die Anzahl der Schleifendurchläufe, bei denen

in Folge keine neue Kugelposition berechnet werden kann, begrenzt. Die maximale Anzahl an Schleifendurchläufen n_{loop} ist dabei abhängig von der Raumgröße mit den Dimensionen x , y und z und dem maximalen Kugelradius r_{max} (siehe Formel 3.1). Wurden also in Folge über die maximale Anzahl an Schleifendurchläufen verschiedene Radien r_4 vorgegeben, ohne dass eine mögliche Kugelposition berechnet werden konnte, an der anschließend eine Kugel platziert werden kann, bricht das Programm ab.

$$n_{loop} = \frac{1}{16} \cdot x \cdot y \cdot z \cdot \frac{1}{r_{max}^3} \quad (3.1)$$

Beobachtungen in der ersten Analyse haben gezeigt, dass der Fall, bei dem zu einem Radius r_4 keine mögliche Kugelposition berechnet werden kann, nur gegen Ende des Sedimentationsalgorithmus auftritt, wenn insgesamt nur noch wenige Pockets zur Platzierung einer neuen Kugel zur Verfügung stehen. Nur die letzten Sedimentationsschritte sind daher unter den später beschriebenen gewählten Eingabeparametern von diesem Fall betroffen. Bei insgesamt ca. 2.000 bis 4.000 Kugeln in den Kugelpackungen unter den gewählten Eingabeparametern dürften solche Fälle keine deutlichen Auswirkungen auf die Radienverteilungen haben.

Im Anwendungskontext haben die von D. Borah [2] untersuchten PTLs die Dimensionen zum Beispiel im Bereich von etwa 800 µm x 700 µm x 200 µm. Für die Auswertung der Kugelpackungen spielen die Größendimensionen keine Rolle. Die Eingabeparameter der Software werden daher ohne Einheiten angegeben. Um einen Testsatz aus Kugelpackungen zu erstellen, müssen zunächst die verschiedenen Eingabeparameter der Software festgelegt werden. Für die Dimension der Kugelpackung wurde aufgrund steigender Laufzeiten bei zunehmenden Raumgrößen (siehe Kapitel 2.1) überwiegend mit einer Größe von 200x200x200 bzw. 200x200x300 gearbeitet.

Die Kugelradien liegen im Intervall [7; 10]. Damit werden alle Bedingungen an den minimalen Radius r_{min} und den maximalen Radius r_{max} eingehalten (siehe Formeln 2.49 - 2.51). Beide Radien sind größer Null und der maximale Radius ist größer als der minimale Radius. Zudem ist $r_{max} = 10$ kleiner als der 1,5-fache minimale Radius $r_{min} = 7$. Die Kugelradien folgen dabei entweder einer Beta-Verteilung mit den Parametern $p, q = 2$ oder einer Gleichverteilung. Die Toleranzgrenze für den relativen Überlapp zwischen zwei Kugeln wurde für Werte im Intervall $[10^{-6}; 0,1]$ variiert. Als Abstand der Gitterpositionen der Kugeln in der Initialisierungsebene wurde 20% des maximalen Radius angegeben. Dies entspricht bei Radien im Intervall [7; 10] dem Wert 2.

3.2 Anwendungsbezogene Auswertung

Porositäten

Mithilfe der erstellten Kugelpackungen soll die reale Struktur einer PTL nachgebildet werden. Dabei sollen die generierte und die reale Struktur in Merkmalen wie der Porosität übereinstimmen. Damit eine generierte Kugelstruktur eine gewünschte Porosität erreicht, wie sie in einer PTL vorliegt, gibt es die Möglichkeit, durch zufälliges Vergrößern der Kugeln im Postprocessing die Porosität einer Kugelpackung zu reduzieren. PTLs aus gesintertem Titanpulver weisen zum Beispiel Porositäten zwischen 26 und 34% auf [2]. Die Porosität der im Rahmen der Seminararbeit generierten Kugelpackungen aus sich berührenden, gleich großen Kugeln mit dem Radius zehn der Dimension 700x600x200 betrug hingegen etwa 42%. Im Postprocessing wurden die Kugeln dieser Kugelpackungen daher vergrößert bis eine Zielporosität von etwa 27% erreicht wurde. Die Porosität der Kugelpackungen wird über das Pixelzählen von Schwarz-Weiß-Bildserien bestimmt, die die Querschnitte durch eine Kugelpackung abbilden.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Programm zum Erstellen von Kugelpackungen aus sich überlappenden Kugeln unterschiedlicher Größe entwickelt. Auch die Porositäten der mithilfe dieses Programms erzeugten Kugelpackungen können im Postprocessing reduziert werden, indem die Kugeln zufällig vergrößert werden. Zunächst wird jedoch betrachtet, welche Porositäten die erzeugten Strukturen bei unterschiedlichen Eingabeparametern aufweisen.

Die Dimension der Kugelpackung mit 200x200x200 und das Radienintervall von [7; 10] blieben für alle bezüglich der Porosität ausgewerteten Samples unverändert. Als Eingabeparameter wurden die Radienverteilungen (siehe Kapitel 2.5) und die Höhe des Überlappkriteriums $p_{overlap}$ (siehe Kapitel 2.3) variiert. Jeweils für beta- und gleichverteilte Radien im Intervall [7; 10] wurden Samples aus je fünf Kugelpackungen erstellt. Dabei wurde das Überlappkriterium einmal mit $p_{overlap} = 0,1$ und einmal mit $p_{overlap} = 0,02$ gewählt. Zugelassen war somit ein maximaler relativer Überlapp zwischen zwei Kugeln von 10 bzw. 2%. Für beide Radienverteilungen lag der Erwartungswert bei $\mu = 8,5$. Die Ergebnisse für die Porositäten sind in Tabelle 3.1 aufgeführt. Zudem sind in Tabelle 3.2 die Anzahl der Kugeln in jeder Kugelpackung für die verschiedenen Testfälle aufgelistet.

Tabelle 3.1: Porositäten in % für Kugelpackungen der Dimension 200x200x200 mit beta- und gleichverteilten Radien im Intervall [7; 10] mit $p_{overlap} = 0,1$ bzw. $p_{overlap} = 0,02$.

	TC01	TC02	TC03	TC04	TC05	Mittelwert
beta; $p_{overlap} = 0,1$	22,91	23,31	22,97	22,99	22,92	23,02
beta; $p_{overlap} = 0,02$	37,03	36,76	36,68	36,77	36,93	36,83
uniform; $p_{overlap} = 0,1$	23,04	23,38	23,37	23,30	22,96	23,21
uniform; $p_{overlap} = 0,02$	36,63	36,44	36,23	36,50	36,41	36,44

Die verschiedenen Testfälle zeigen deutlich unterschiedliche Porositäten für die beiden ver-

Tabelle 3.2: Anzahl Kugeln in Kugelpackungen der Dimension 200x200x200 mit beta- und gleichverteilten Radien im Intervall $[7; 10]$ mit $p_{\text{overlap}} = 0,1$ bzw. $p_{\text{overlap}} = 0,02$.

	TC01	TC02	TC03	TC04	TC05	Mittelwert
beta; $p_{\text{overlap}} = 0,1$	2720	2703	2742	2732	2737	2726,8
beta; $p_{\text{overlap}} = 0,02$	2055	2067	2076	2090	2068	2071,2
uniform; $p_{\text{overlap}} = 0,1$	2704	2671	2672	2682	2708	2687,4
uniform; $p_{\text{overlap}} = 0,02$	2042	2060	2070	2068	2064	2060,8

schiedenen Überlappkriterien. Bei beta-verteilten Kugelradien ist der Mittelwert der Porositäten für die fünf Testfälle um etwa 13,81% niedriger bei einem höheren erlaubten Überlapp von 10% gegenüber dem niedrigeren Überlapp von 2%. Bei gleichverteilten Kugelradien beträgt dieser Unterschied etwa 13,23%.

Die Art der gewählten Radienverteilung scheint hingegen nur einen geringen Einfluss auf die Porosität einer Kugelpackung zu haben. Für einen maximalen Überlapp von 10% liegt der Mittelwert der Porosität bei beta-verteilten Radien bei 23,02% und bei gleichverteilten Radien bei etwa 23,21%. Beide Werte liegen somit unter den von D. Borah [2] angegebenen Werten für die Porositäten zwischen 26 und 34% einiger PTLs aus gesintertem Titanpulver. Um eine reale Struktur nachzubilden, sollte daher in der Anwendung eine geringere Grenze für p_{overlap} gewählt werden, denn im Postprocessing kann die Porosität einer Kugelpackung durch das Vergrößern der Kugeln nur reduziert werden.

Für $p_{\text{overlap}} = 0,02$ liegen die Mittelwerte der Porosität für beta-verteilte Radien bei ungefähr 36,83% bzw. für gleichverteilten Radien bei 36,44%. Diese Werte liegen leicht höher als die von D. Borah ermittelten Porositäten, könnten aber im Postprocessing auf eine gewünschte Porosität reduziert werden.

Die Erklärung für den Unterschied der Porosität in Abhängigkeit von der Höhe des maximalen relativen Überlapps scheint in der Anzahl der Kugeln in einer Kugelpackung zu liegen. In Tabelle 3.2 ist abzulesen, dass in Kugelpackungen mit einem größeren maximalen Überlapp bei gleicher Dimension und gleicher Radienverteilung deutlich mehr Kugeln platziert sind. Für die Kugelpackungen mit beta-verteilten Radien sind bei einer Überlappgrenze von 2% im Schnitt etwa 650 Kugeln weniger platziert als bei einer Überlappgrenze von 10%. Damit liegt die Anzahl der Kugeln für das Sample mit $p_{\text{overlap}} = 0,02$ bei 75% gegenüber dem Sample mit $p_{\text{overlap}} = 0,1$. Ähnlich sieht es für gleichverteilte Radien aus.

Insgesamt lässt sich daraus ableiten, dass die Wahl des Überlappkriteriums die Struktur einer Kugelpackung beeinflusst, denn je höher der maximale Überlapp, desto mehr Kugeln befinden sich in einer Kugelpackung. Es könnte sein, dass mehr Kugeln der gleichen Größe auf gleichem Raum anders positioniert werden, als bei weniger Kugeln der gleichen Größe auf gleichem Raum. Auch die Porosität der Kugelpackungen verändert sich durch unterschiedliche Überlappgrenzen. Um die Vermutung, dass die Höhe des Überlappkriteriums die Struktur einer Kugelpackung beeinflusst, zu überprüfen, werden im Folgenden die Richtungen zwischen direkt benachbarten Kugeln, wie in der Seminararbeit [5], unter-

sucht. Die Wahl der Kugelverteilung scheint nur einen geringen Einfluss auf die Struktur der Kugelpackung zu haben. Daher wird die Struktur der Kugelpackungen ausschließlich für gleichverteilte Kugelradien untersucht.

Richtungen direkter Nachbarkugeln

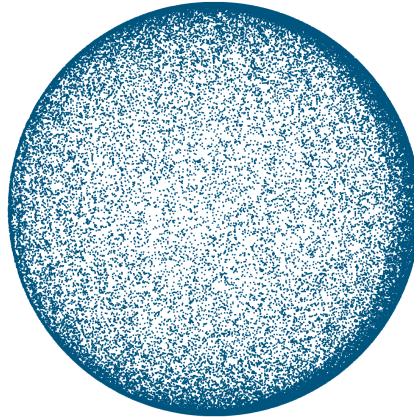


Abbildung 3.4: Richtungen direkter Nachbarkugeln eines Samples der Größe 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ projiziert auf eine Kugeloberfläche.

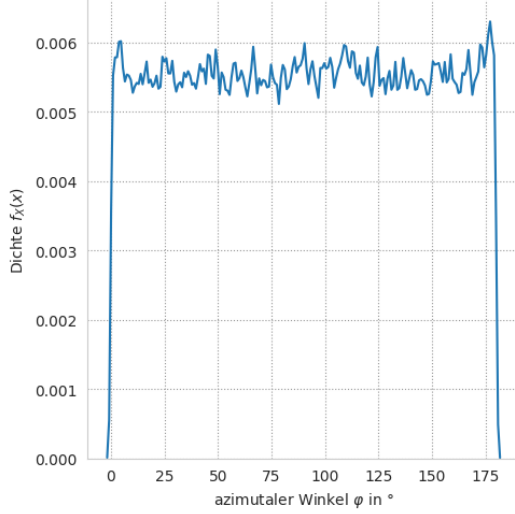
Als nächstes sollen die Ergebnisse der Untersuchung von Richtungen direkter Nachbarkugeln für Kugelpackungen mit Kugeln unterschiedlicher Größe vorgestellt werden. Hierfür wurde ein Sample aus fünf Kugelpackungen der Dimension 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und einer Toleranzgrenze $p_{overlap} = 0,1$ (siehe Kapitel 2.3) für das überlappende Kugelvolumen erstellt. Für einen ersten Eindruck wurden die Richtungen der direkt benachbarten Kugeln aus diesem Sample auf die Oberfläche einer Einheitskugel projiziert (siehe Abbildung 3.4). Die Richtungen wirken dabei wie zufällig auf der Kugeloberfläche verteilt. Es scheint keine Richtungen zu geben, die innerhalb des Samples besonders häufig oder besonders selten auftreten, denn es sind keine Häufungsstellen oder größere Lücken erkennbar.

Um genauere Aussagen treffen zu können, wurde, wie in der Seminararbeit, mithilfe des Kolmogorov-Smirnov-Tests (KS-Test) untersucht, ob die Winkelverteilungen des generierten Samples den Winkelverteilungen für gleichmäßig verteilte Richtungen entsprechen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.3 aufgeführt. Die geschätzten Dichtefunktionen für den azimutalen Winkel φ und den polaren Winkel θ sind in Abbildung 3.5 dargestellt.

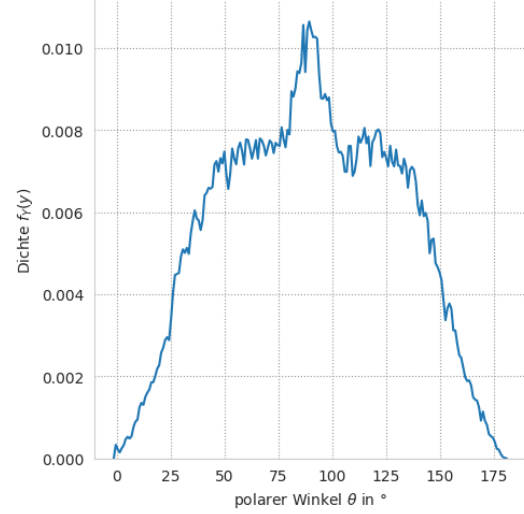
Der azimutale Winkel unterliegt einigen Schwankungen im Intervall $[0^\circ; 180^\circ]$. Der KS-Test liefert für den azimutalen Winkel eine Teststatistik $\hat{D} = 0,0034$, die kleiner ist als der kritische Wert $D = 0,0065$ für die Teststatistik. Somit kann die Nullhypothese, dass die Winkelverteilung von φ einer Gleichverteilung entspricht, nicht verworfen werden. Eine Gleichverteilung wie bei gleichmäßig verteilten Richtungen als Winkelverteilung ist da-

Tabelle 3.3: Ergebnisse KS-Test für den azimutalen Winkel φ und den polaren Winkel θ eines Samples der Dimension 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und $p_{\text{overlap}} = 0,1$.

Winkel	Signifikanzniveau α	Kritische Schranke D	Teststatistik $\hat{D}$	p-Wert
φ	0,01	0,006477	0,003442	0,4418
θ	0,01	0,006477	0,999417	0,0



(a) Azimutaler Winkel φ .



(b) Polarer Winkel θ .

Abbildung 3.5: Kerndichteschätzer (kde) des azimutalen Winkels φ und des polaren Winkels θ für ein Sample der Dimension 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und $p_{\text{overlap}} = 0,1$.

her möglich. Dies entspricht auch den Ergebnissen aus der Seminararbeit. Der azimutale Winkel wird daher nicht weiter betrachtet.

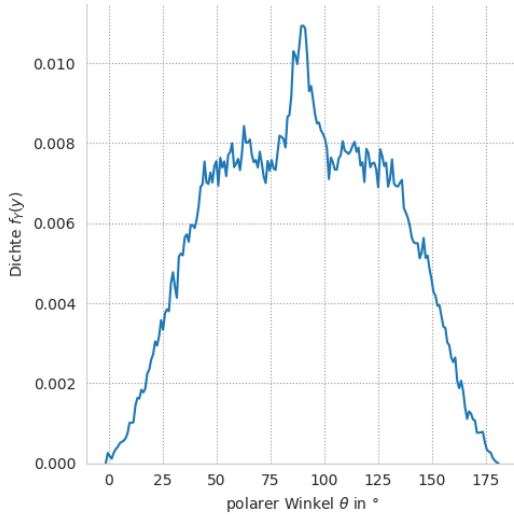
Die Verteilung des polaren Winkels des Samples der Dimension 200x200x200 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und einer Toleranzgrenze von 0,1 für das überlappende Kugelvolumen (siehe Abbildung 3.5b) unterscheidet sich deutlich von der Verteilung des polaren Winkels des im Rahmen der Seminararbeit untersuchten Samples der Dimension 700x600x200 mit sich berührenden Kugeln mit dem Radius 10 (siehe Abbildung 3.3b). Es ist eine unimodale Verteilung zu erkennen mit einem sich abhebenden Maximum bei 90° .

Auch wenn für dieses Sample eine unimodale Verteilung vorliegt, entspricht diese nicht der unimodalen Verteilung aus den gleichmäßigen Richtungen (siehe Abbildung 3.3a). Der KS-Test liefert eine Teststatistik $\hat{D} = 0,9994$ größer als die kritische Schranke $D = 0,0065$ (siehe Tabelle 3.3). Die Nullhypothese, dass die Winkelverteilung des polaren Winkels θ des untersuchten Samples der Verteilung für gleichmäßig verteilte Richtungen entspricht, kann somit zum Signifikanzniveau $\alpha = 0,01$ abgelehnt werden.

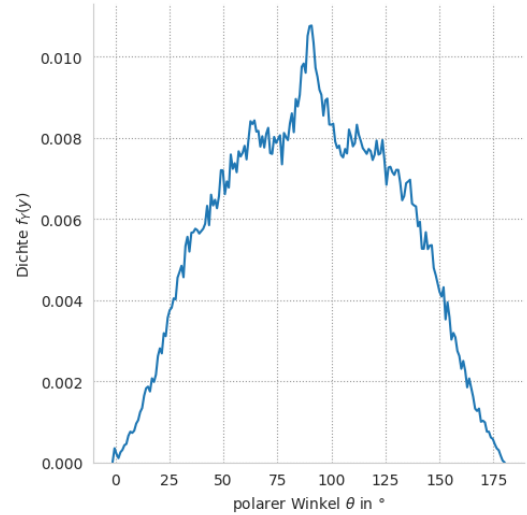
Es bleibt die Frage, wie die Änderung der Winkelverteilung für den polaren Winkel θ zwischen den Kugelpackungen aus gleich großen, sich berührenden Kugeln und den Kugelpackungen aus verschiedenen großen, sich überlappenden Kugeln zustande kommt. Mögliche

Einflüsse auf diese Änderung können die Toleranzgrenze für den relativen Überlapp, die verschiedenen Kugelradien oder die veränderten Initialisierungsebenen sein. Zudem wurde im Rahmen der Seminararbeit ein Einfluss der Initialisierungsebene auf die untersten Kugelschichten in Höhe von zwei Kugeldurchmessern festgestellt. Die Einflüsse der genannten Aspekte auf die Verteilung des polaren Winkels θ werden nun einzeln vorgestellt.

Betrachtet wird zunächst der Einfluss der Initialisierungsebene auf die Winkelverteilungen der untersten Schichten. Im Rahmen der Seminararbeit konnte festgestellt werden, dass die Initialisierungsebene einen Einfluss auf die Winkelverteilungen in den untersten Schichten mit einer Höhe von zwei Kugeldurchmessern hat. Daher wurden in einem weiteren Sample die Höhe der Kugelpackungen um 50% der ursprünglichen Höhe auf eine Dimension von $200 \times 200 \times 300$ vergrößert und die Winkelverteilung in zwei Schichten untersucht, einer unteren Schicht mit Kugeln, deren z-Koordinaten zwischen 0 und 200 liegt, und einer oberen Schicht mit z-Koordinaten zwischen 100 und 300. In der oberen Schicht, die ab der Höhe 100 beginnt, werden bei Kugeldurchmessern im Intervall $[14; 20]$ sogar mehr Kugeln abgeschnitten, als die im Rahmen der Seminararbeit ermittelte Höhe von zwei Kugeldurchmessern. Die Schichten, für die ein Einfluss durch die Initialisierungsebene gezeigt werden konnte, werden somit in der oberen Schicht ausgeschlossen. Alle weiteren Eingabeparameter blieben im Vergleich zum zuvor betrachteten Sample unverändert. Die Verteilungen für den polaren Winkel θ sind in Abbildung 3.6 dargestellt.



(a) Polarer Winkel θ in $0 \leq z < 200$.



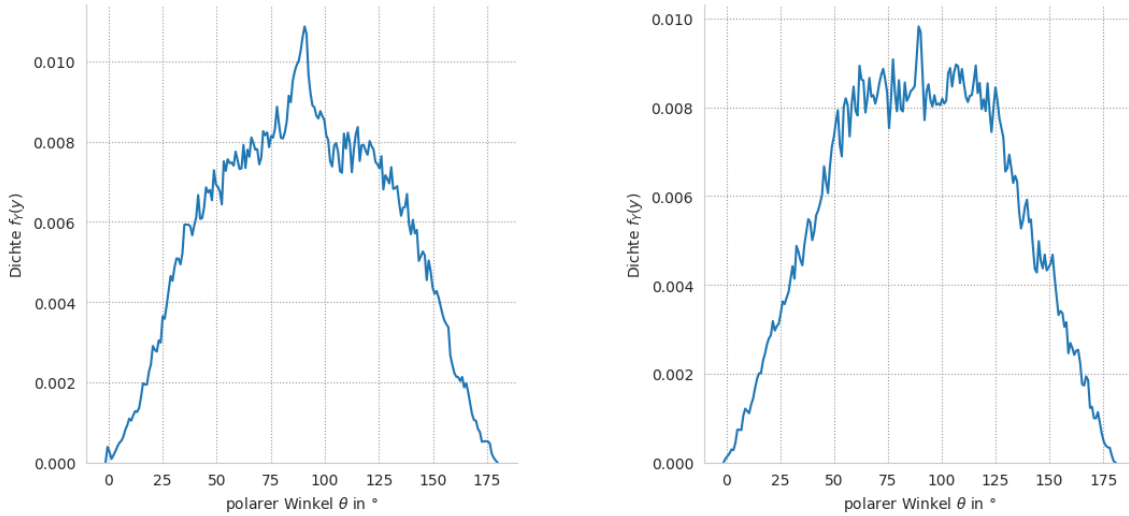
(b) Polarer Winkel θ in $100 \leq z \leq 300$.

Abbildung 3.6: Kerndichteschätzer (kde) des polaren Winkels θ für ein Sample der Dimension $200 \times 200 \times 300$ mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und $p_{\text{overlap}} = 0,1$ in zwei Schichten der Höhe 200.

Beide Verteilungen unterscheiden sich deutlich von der bimodalen Verteilung von θ des Samples aus Kugelpackungen mit gleich großen Kugeln aus der Seminararbeit (siehe Abbildung 3.3b). Im Vergleich miteinander weisen die beiden Verteilungsdichten einen ähnlichen Verlauf auf. Die nahezu symmetrischen Dichtefunktionen steigen im Intervall von etwa $[0^\circ; 50^\circ]$ schnell an und fallen im Intervall $[130^\circ; 180^\circ]$ wieder ab. Zwischen 80° und 100° hebt sich ein Maximum, das jeweils bei 90° liegt, von der restlichen Funktion ab. In

den beiden übrigen Intervallen von etwa $[50^\circ; 80^\circ]$ und $[100^\circ; 130^\circ]$ scheinen sich die beiden Dichten jedoch zu unterscheiden. Für die untere Schicht ($0 \leq z < 200$) entsteht der Eindruck, dass die Dichtefunktion in diesen beiden Intervallen ein Art Plateau erreicht. Die Dichtefunktion der oberen Schicht ($100 \leq z \leq 300$) scheint hingegen gemeinsam mit den beiden Randintervallen $[0^\circ; 50^\circ]$ und $[130^\circ; 180^\circ]$ einem glockenförmigen Funktionsverlauf zu folgen.

Da bereits in der Seminararbeit ein Einfluss der Initialisierungsebene auf untere Kugelschichten gezeigt werden konnte, wurden die Untersuchungen weiterer möglicher Einflussfaktoren auf die Verteilung des polaren Winkels θ anhand oberer Kugelpackungsschichten durchgeführt. Das bedeutet, es wurden Kugelpackungen der Dimension $200 \times 200 \times 300$ erzeugt, von denen alle Kugeln mit z -Koordinaten zwischen 100 und 300 betrachtet werden.



(a) Initialisierungsebene aus gleich großen, sich nicht überlappenden Kugeln.

(b) Überlappende Kugel gleicher Größe mit dem Radius 10.

Abbildung 3.7: Kerndichteschätzer (kde) des polaren Winkels θ für die jeweils oberen Schichten ($100 \leq z \leq 300$) von zwei Samples der Dimension $200 \times 200 \times 300$ mit Kugeln gleicher Größe in der Initialisierungsebene (Kugelradien: $[7; 10]$; in der Initialisierungsebene: 10) bzw. in der gesamten Kugelpackung (Kugelradien: 10) mit $p_{\text{overlap}} = 0,1$.

Bei der Verwendung von Initialisierungsebenen mit gleich großen und sich nicht überlappenden Kugeln, wie sie in den Samples aus der Seminararbeit eingesetzt wurden, ändert sich die Form des Funktionsverlaufs nicht (siehe Abbildung 3.7a). Der Grund für die Änderung der Winkelerteilung von θ liegt somit nicht in der Verwendung einer Initialisierungsebene mit verschiedenen großen, sich überlappenden Kugeln anstelle von sich nicht überlappenden Kugeln gleicher Größe. Für gleich große Kugeln in der gesamten Kugelpackung, die sich überlappen dürfen, ändert sich hingegen die Gestalt der Dichtefunktion von θ (siehe Abbildung 3.7b). Das sich abhebende Maximum bei 90° fällt schwächer aus. Zudem nimmt die Dichte eher einen trapez- als einen glockenförmigen Verlauf an und entspricht somit nicht der erwarteten Verteilung bei gleichmäßigen Richtungen. Dies kann durch einen KS-Test (siehe Tabelle 3.4) bestätigt werden.

Tabelle 3.4: Ergebnis KS-Test für den polaren Winkel θ eines Samples der Dimension $200 \times 200 \times 300$ mit gleich großen Kugeln mit $100 \leq z \leq 300$ und Radius 10 sowie $p_{\text{overlap}} = 0,1$ im Vergleich mit gleichmäßig verteilten Richtungen.

Winkel	Signifikanzniveau α	Kritische Schranke D	Teststatistik $\hat{D}$	p-Wert
θ	0,01	0,007556	0,999417	0,0

Als mögliche Erklärung für die sich von bimodal zu scheinbar unimodal verändernde Verteilung des polaren Winkels θ von Kugelpackungen aus gleich großen, sich berührenden Kugeln gegenüber Kugelpackungen aus verschiedenen großen, sich überlappenden Kugeln, bleibt nun p_{overlap} als Toleranzgrenze für das maximal erlaubte überlappende Volumen zwischen zwei Kugeln. Für unterschiedlich gewählte Überlappsgrenzen p_{overlap} konnten bereits Änderungen in den Porositäten der Kugelpackungen festgestellt werden. Um den Einfluss von p_{overlap} zu bewerten, wurde ein Sample aus fünf Kugelpackungen mit der Grenze $p_{\text{overlap}} = 10^{-6}$ erstellt. p_{overlap} ist somit so gering gewählt, dass sich die Kugeln der Kugelpackung nur berühren und nicht überlappen. Aufgrund der Ungenauigkeiten bezüglich der Floating-Point-Arithmetik eines Rechners sollte p_{overlap} nicht den Wert Null annehmen, sondern wie bei $p_{\text{overlap}} = 10^{-6}$ eine Toleranz für Überlappung zulassen. Alle weiteren Eingabeparameter blieben unverändert. Die Kugelpackungen haben die Dimension $200 \times 200 \times 300$, von denen alle Kugeln mit einer z-Koordinate zwischen 100 und 300 betrachtet werden. Die Kugelradien liegen im Intervall $[7; 10]$. Die geschätzte Dichtefunktion für den polaren Winkel θ ist in Abbildung 3.8 dargestellt.

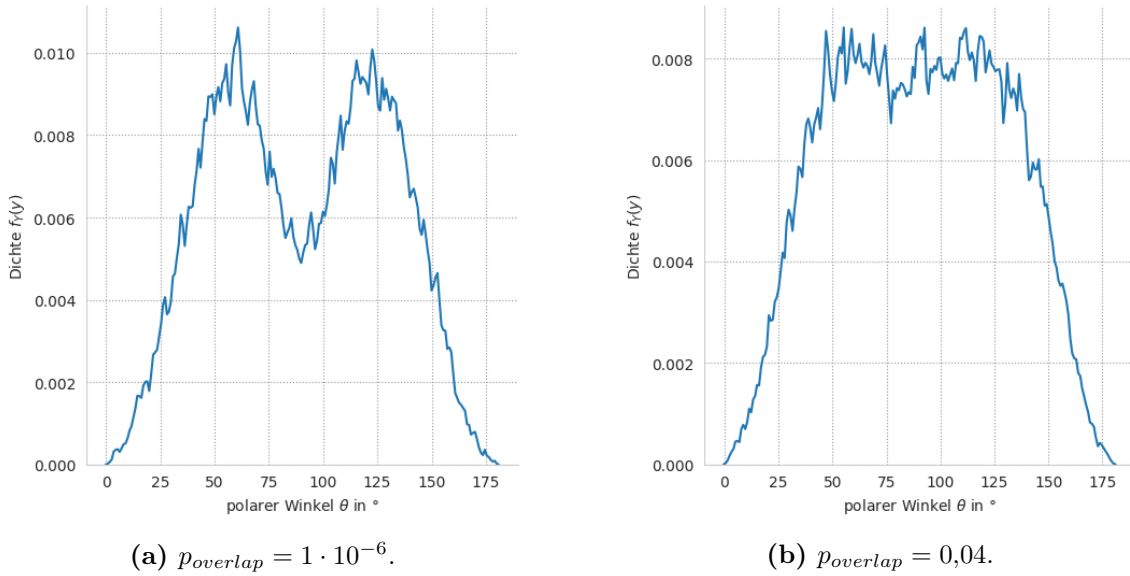


Abbildung 3.8: Kerndichteschätzer (kde) des polaren Winkels θ für die jeweils oberen Schichten ($100 \leq z \leq 300$) von zwei Samples der Dimension $200 \times 200 \times 300$ mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und mit $p_{\text{overlap}} = 10^{-6}$ bzw. $p_{\text{overlap}} = 0,04$.

Die Anpassung des Überlappkriteriums führt zur Veränderung der Winkelverteilung von θ hinzu einer bimodalen Struktur mit Maxima in der Dichtefunktion bei etwa 50° und 130° . Daraus folgt, dass die Wahl des Überlappkriteriums Einfluss auf die Winkelverteilung des

polaren Winkels θ nimmt und somit die Struktur der gesamten Kugelpackung beeinflusst. Diese Beobachtung stimmt mit Ergebnissen zur Auswertung der Porosität in Kapitel 3.2 überein. Dort konnte gezeigt werden, dass die Wahl von p_{overlap} die Anzahl der Kugeln in einer Kugelpackung und die Porosität der Kugelpackung bestimmt. Daraus wurde abgeleitet, dass das Überlappkriterium p_{overlap} die Struktur einer Kugelpackung beeinflusst.

Mit $p_{\text{overlap}} = 0,1$ und $p_{\text{overlap}} = 10^{-6}$ wurden zwei verschiedene Grenzen für das Überlappkriterium getestet, die zu Verteilungen mit unterschiedlichen Merkmalen führen. Daraus lässt sich die Frage ableiten, wo im Intervall $[10^{-6}; 0,1]$ der Übergang von einer bimodalen zu einer unimodalen Verteilung mit einem sich abhebenden Maximum stattfindet.

Um auf diese Frage einzugehen, wurde ein weiteres Sample aus fünf Kugelpackungen mit $p_{\text{overlap}} = 0,04$ erstellt, dessen Verteilungsfunktion für θ in Abbildung 3.8b dargestellt ist. Es liegt eine Verteilung vor, die drei lokale Maxima vermuten lässt, zwei an den Positionen von ungefähr 60° bzw. 120° und eines bei 90° . Eine unimodale Verteilung, wie sie bei gleichmäßig verteilten Richtungen zu erwarten wäre, wird nicht erreicht.

Im Rahmen der Seminararbeit wurde die Vermutung aufgestellt, dass die bimodale Verteilung des Winkels θ durch die Initialisierungsebene zu erklären ist. Ohne die zufällige Verschiebung der Kugelpositionen in der Initialisierungsebene würde eine reguläre Struktur aus sich wiederholenden Richtungen entstehen, deren Winkel sich anhand der Kugelabstände und -radien analytisch berechnen lassen. Die auf diese Weise berechneten möglichen Werte für den Winkel θ entsprachen dabei ungefähr den Maxima der bimodalen Verteilung. Die zufällige Verschiebung in der Initialisierungsebene wäre dann für die beobachtete Variabilität in den Winkelverteilungen der erstellten Samples verantwortlich. Insgesamt wäre eine Kugelpackung schichtweise aufgebaut, wobei eine obere Schicht in Abhängigkeit von den Kugelabständen unterschiedlich tief in die unter ihr liegende Schicht einsinkt.

Für Kugelpackungen mit Kugeln unterschiedlicher Größe und einer höheren Toleranzgrenze für den relativen Überlapp wie zum Beispiel $p_{\text{overlap}} = 0,1$, wie sie für ein Sample der Dimension $200 \times 200 \times 200$ mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ (siehe Abbildung 3.5b) beobachtet werden konnte, scheint eine unimodale Verteilung von θ vorzuliegen. Eine mögliche Ursache kann die Initialisierung der Kugelpackung mit einer unteren Kugelschicht sein, also die Verwendung einer Initialisierungsebene.

Unabhängig vom Einfluss der Initialisierungsebene auf die untersten Kugelschichten mit einer Höhe von zwei Kugeldurchmessern, der im Rahmen der Seminararbeit gezeigt werden konnte, wird vermutet, dass durch die Verwendung einer Initialisierungsebene als unterste Schicht die gesamte Kugelpackung in Schichten strukturiert ist. In den jeweiligen Schichten wären die Kugeln mit Abständen platziert, da die Kugeln in der Initialisierungsebene ebenfalls mit Abständen positioniert sind. Je größer dann der erlaubte Überlapp p_{overlap} von Kugeln in einer Kugelpackung wäre, desto eher könnten die Lücken in den einzelnen Kugelschichten, die durch die Abstände zwischen den Kugeln entstehen und zu klein für die Platzierung von Kugeln ohne Überlappung sind, durch Kugeln gefüllt werden. Direkte Nachbarkugeln würden somit in der gleichen Kugelschicht liegen. Daher läge der polare Winkel θ in den Richtungen zwischen diesen benachbarten Kugeln bei ungefähr 90° .

3.3 Auftreten von Sonderfällen

In Kapitel 2.4 wurden Sonderfälle dargestellt, die bei der Berechnung einer Pocket auftreten können. Dabei wurden verschiedene Fälle beschrieben, bei denen die Berechnung einer Pocket über das geometrische Verfahren (siehe Kapitel 2.2.1) nicht möglich war. Eine neue Kugelposition M_4 soll dabei über drei gegebene Kugeln K_1 , K_2 und K_3 mit den Mittelpunkten M_1 , M_2 und M_3 berechnet werden. In allen Sonderfällen scheiterte das Verfahren an einem negativen Radikanden bei der Berechnung des Volumens der Pyramide, deren Eckpunkte die Kugelmittelpunkte M_1 , M_2 , M_3 und M_4 bilden (siehe Formel 2.24).

Die Untersuchungen der Struktur der Kugelpackung haben gezeigt, dass die Wahl des Überlappkriteriums $p_{overlap}$ (siehe Kapitel 2.3) die Verteilung des polaren Winkels θ zwischen direkten Nachbarkugeln einer Kugelpackung beeinflusst. Ein höherer Wert von $p_{overlap}$, wie beispielsweise 0,1, führt zu einer unimodal wirkenden Verteilung mit einem Maximum bei 90° , während ein niedrigerer Wert, zum Beispiel nahe Null, zu einer bimodalen Verteilung führt.

Um mögliche Erklärungen für diese Beobachtungen zu finden, wurde untersucht, wie oft bei der Pocketberechnung Sonderfälle aufgetreten sind und das geometrische Verfahren zur Pocketberechnung nicht angewendet werden konnte. Dafür wurden verschiedene Arten von Fällen, die bei der Pocketberechnung eintreten können, gezählt. Eine Übersicht über die Kategorien, die für das Zählen genutzt wurden, ist in Tabelle 3.5 abgebildet.

Tabelle 3.5: Beschreibung der gezählten Fälle bei der Pocketberechnung und Zuordnung einer Kurzbezeichnung.

Kurzbezeichnung	Beschreibung
Gesamtfälle	Anzahl Aufrufe Pocketberechnung
Fall 1	Höhe h der Pyramide mit den Eckpunkten K_1 , K_2 und K_3 kann nicht berechnet werden
Fall 1.1	Neuer Radius r_{neu} mit $0 < r_{neu} < r_4$ wird gefunden, sodass $h = 0$ gilt
Fall 1.1.1	Die relative Überlappung der mit r_{neu} berechneten Kugelposition mit K_1 , K_2 oder K_3 ist größer als $p_{overlap}$
Fall 1.1.2	An der mit r_{neu} berechneten Kugelposition wird tatsächlich eine Kugel platziert
Fall 2	Die relative Überlappung einer berechneten möglichen Kugelposition mit irgendeiner benachbarten Kugel ist größer als $p_{overlap}$

Bei der Auswertung der auftretenden Sonderfälle wurden die Fälle gezählt, bei denen sich die Pyramidenhöhe mit den Eckpunkten der Kugelmittelpunkte M_2 , M_3 und M_4 nicht berechnen ließ (Fall 1) und bei denen eine berechnete Kugelposition zu einem vorgegebenen Radius r_4 eine zu große Überlappung mit irgendeiner Nachbarkugel in der Kugelpackung hatte (Fall 1). Diese beiden Fälle schließen sich nicht aus. Es ist möglich, dass sich die Höhe der Pyramide zu einem Radius r_4 nicht berechnen lässt, aber ein Radius $r_{neu} < r_4$ gefunden

wird, zu dem eine Kugelposition berechnet werden kann. An der berechneten Position könnte dann eine Kugel mit dem Radius r_4 platziert werden, deren Überlappung mit irgendeiner benachbarten Kugel jedoch über der maximalen relativen Überlappung $p_{overlap}$ liegt. Außerdem bilden die beiden Fälle nicht die Gesamtzahl aller Pocketberechnungen ab.

Für den Fall 1 wurden weitere Unterfälle gezählt, denn wenn sich die Höhe der Pyramide mit den Eckpunkten M_1 , M_2 , M_3 und M_4 nicht berechnen lässt, wird, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, versucht ein Radius $r_{neu} \in [0; r_4[$ zu finden, mit dem die Berechnung einer Kugelposition möglich ist. Konnte mit Radius r_{neu} eine Position M_4 berechnet werden, so dass eine Kugel mit Radius r_{neu} an Position M_4 K_1 , K_2 und K_3 berühren würde, dann würde eine an M_4 mit Radius $r_4 > r_{neu}$ platzierte Kugel K_1 , K_2 und K_3 überlappen. Die Fälle, bei denen die Überlappung größer ist als die maximale relative Überlappung $p_{overlap}$, wurden ebenfalls gezählt. Zudem wurde gezählt, wie oft an einer auf diese Weise berechneten Position tatsächlich eine Kugel platziert wird, denn in jedem Sedimentationsschritt wird für einen Radius r_4 die gesamte Pocketliste zur Pocketberechnung durchgegangen. Von allen berechneten Positionen wird dann jeweils die niedrigste Position ausgewählt.

Tabelle 3.6: Durchschnittliche Anzahl der bei der Pocketberechnung aufgetretenen Fälle in Samples aus fünf Kugelpackungen der Dimension 200x200x300 mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und verschiedenen Werten für $p_{overlap}$. Die Anzahl der Fälle 1 bis 2 sind in % relativ zur Anzahl der Gesamtfälle angegeben.

$p_{overlap}$	Gesamtfälle	Fall 1	Fall 1.1	Fall 1.1.1	Fall 1.1.2	Fall 2	Anzahl Kugeln
10^{-6}	3257834	14,55%	0,00%	0,00%	0,00%	9,16%	2875
0,02	4590359	14,77%	0,00%	0,00%	0,00%	8,44%	3114
0,04	5027660	13,46%	0,00%	0,00%	0,00%	9,39%	3316
0,1	10526458	12,19%	0,00%	0,00%	0,00%	8,27%	4041

In Tabelle 3.6 sind die Ergebnisse für Samples aus jeweils fünf Kugelpackungen der Dimension 200x200x300 mit Radien im Intervall $[7; 10]$ und verschiedenen Werten für $p_{overlap}$ dargestellt. Die absolut angegebenen Ergebnisse sind auf ganze Zahlen gerundet und die relativ angegebenen Ergebnisse auf zwei Nachkommastellen.

Die Anzahl der Aufrufe der Pocketberechnung, aufgeführt als Gesamtfälle, steigt mit höheren Werten für die maximale relative Überlappung $p_{overlap}$ bei ansonsten gleichen Eingabeparametern mit Kugelradien im Intervall $[7; 10]$ und einer Dimension von 200x200x300. Der Grund ist vermutlich, dass in jedem Sedimentationsschritt Kombinationen aus drei bereits platzierten Kugeln aus der Pocketliste gelöscht werden, wenn die anhand der jeweiligen Kombination berechnete Kugelposition zu einer zu großen Überlappung mit irgendeiner Nachbarkugel führt. Je geringer die Überlappungstoleranz, desto mehr Pockets werden dementsprechend gelöscht.

Insgesamt wurde die Methode zur Pocketberechnung für die verschiedenen Überlappkriterien mehrere Millionen Mal aufgerufen und damit deutlich häufiger als tatsächlich Kugeln

platziert werden. Für eine Kugelpackung der Dimension 200x200x300 mit Kugelradien im Intervall [7; 10] sind beispielsweise keine 3000 Kugeln in einer Kugelpackung, während die Methode zur Pocketberechnung ungefähr 3,25 Millionen Mal aufgerufen wurde. Dies liegt daran, dass für jede Kugel in einer Kugelpackung die gesamte Pocketliste zur Berechnung von möglichen Kugelpositionen durchgegangen wird, aber nur die niedrigste Position genutzt wird, um eine Kugel zu platzieren.

Für alle getesteten Werte von $p_{overlap}$ konnte in ungefähr 12 bis 15% der Aufrufe der Pocketberechnung die Höhe der Pyramide mit den Eckpunkten M_1 , M_2 , M_3 und M_4 nicht berechnet werden (Fall 1.1) und die verschiedenen Sonderfälle, die in Kapitel 2.4 beschrieben wurden, traten auf. Im Programm wurden von all diesen Fällen diejenigen gezählt, bei denen ein neuer Radius $r_{neu} < r_4$ gefunden wurde, mit dem dann eine Kugelposition berechnet werden konnte. Von den insgesamt jeweils mehreren 100.000 Fällen in den einzelnen Kugelpackungen, in denen die Pyramidenhöhe nicht berechnet werden konnte, wurde jedoch nie die Variante zur Berechnung einer überlappenden Kugelposition (siehe Kapitel 2.2.2) angewandt. Dies bedeutet, es konnte unabhängig von der Wahl des Überlappkriteriums $p_{overlap}$ kein Mal ein neuer Radius $r_{neu} < r_4$ gefunden werden, mit dem die Berechnung einer Kugelposition möglich war. Dementsprechend traten auch die Unterfälle 1.1.1 und 1.1.2 (siehe Tabelle 3.5) nicht auf.

Der Grund hierfür wird in den Größenunterschieden der Radien vermutet. In den in Kapitel 2.4 beschriebenen Sonderfällen wurden die verschiedenen Fälle anhand von Beispielen beschrieben. Um die Sonderfälle zu konstruieren, wurden bei diesen Beispielen Kugeln unterschiedlicher Größe verwendet, deren Radien sich beispielsweise um den Faktor 16 unterschieden (Sonderfall B1, siehe Abbildung 2.13a in Kapitel 2.4). In den erzeugten Samples wurden jedoch Kugelradien aus dem Intervall [7; 10] verwendet. Damit ist der maximale Kugelradius ungefähr um den Faktor 1,43 größer als der minimale Kugelradius.

Im Kapitel 2.5 wurde sogar in Formel 2.51 eine Beschränkung der Größenunterschiede in den Kugelradien gefordert. Auf der einen Seite sollte somit das Auftreten zahlreicher Sonderfälle verhindert werden. Auf der anderen Seite liefern die Nano-CT-Aufnahmen von realen PTL-Strukturen keine Hinweise auf Partikel stark unterschiedlicher Größe.

Zuletzt bleibt noch die Zählung der Fälle, in denen eine Kugelposition berechnet wurde, bei der die Überlappung zu irgendeiner benachbarten Kugel größer war als die maximale relative Überlappung $p_{overlap}$ (Fall 2). Die durchschnittliche absolute Anzahl dieser Fälle beim Generieren einer Kugelpackung steigt mit $p_{overlap}$. Auf den ersten Blick erscheint dies nicht wie erwartet, denn je höher die maximale relative Überlappung sein darf, desto weniger Kugelpositionen sollten wegen einer zu hohen Überlappung verworfen werden. Allerdings muss hierzu parallel die Gesamtzahl der Aufrufe einer Pocketberechnung mit berücksichtigt werden. Mit steigendem $p_{overlap}$ nimmt die Gesamtzahl der Pocketberechnungen zu und daher auch die Fälle, in denen die Überlappung einer berechneten Kugelposition zu einer Nachbarkugel zu groß ist. Der Anteil der Fälle bei denen die Überlappung zu irgendeiner benachbarten Kugel zu groß war bleibt ungefähr konstant.

4 Fazit und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Software zum Generieren von Kugelpackungen mit Kugeln unterschiedlicher Größe entwickelt. Die Kugeln in einer Kugelpackung dürfen sich überlappen, solange das maximale überlappende Volumen relativ zum Kugelvolumen kleiner ist als eine über die Eingabeparameter der Software vorgegebene Grenze $p_{overlap}$. Die Struktur der mithilfe der Software erstellten Kugelpackungen wurde in Bezug auf Porosität und Richtungen zwischen benachbarten Kugeln analysiert. Eine Richtung zwischen den Mittelpunkten von zwei Kugeln wird ähnlich zu Kugelkoordinaten durch einen azimutalen und einen polaren Winkel beschrieben.

Bei den Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass die Wahl des Überlappungskriteriums $p_{overlap}$ die Struktur einer Kugelpackung beeinflusst. Je höher $p_{overlap}$ gewählt wird, desto mehr Kugeln passen in eine Kugelpackung. Wenn bei gleicher Dimension und unveränderter Radienverteilung mehr Kugeln in einer Kugelpackung platziert werden, sinkt die Porosität als Verhältnis aus Hohlraumvolumen zum Gesamtvolumen.

Zusätzlich wurde festgestellt, dass sich mit der Wahl des Überlappungskriteriums $p_{overlap}$ die Verteilung des polaren Winkels θ in den Richtungen zwischen Kugeln, die sich berühren oder überlappen, ändert. Für eine Wahl nahe Null ($p_{overlap} = 10^{-6}$) folgt der polare Winkel einer nahezu symmetrischen bimodalen Verteilung mit einem lokalen Minimum bei 90° . Bei höheren Werten für $p_{overlap}$ wie beispielsweise 0,1 folgt θ hingegen einer Verteilung mit nur einem Maximum. Das Maximum liegt bei etwa 90° und somit genau an der Stelle, an der sich das lokale Minimum der bimodalen Verteilung für kleine $p_{overlap}$ befindet. Auch wenn die Richtungen bei der Projektion auf die Oberfläche einer Einheitskugel annähernd gleichmäßig verteilt zu sein scheinen, entspricht die unimodal wirkende Verteilung von θ nicht der Verteilung des polaren Winkels für gleichmäßig verteilte Richtungen.

Mit Blick auf die Anwendung stellt sich die Frage, ob über die generierten Kugelpackungen trotzdem reale PTL-Strukturen nachgebildet werden können. Die Richtungen zwischen benachbarten Partikeln in PTLs aus gesintertem Titanpulver sind nicht bekannt. Die Nano-CT-Aufnahmen der realen Strukturen lassen eine irreguläre Anordnung ohne sich wiederholende Strukturelemente vermuten. Wenn generierte und reale Strukturen in zentralen Kenngrößen übereinstimmen, können die Kugelpackungen als Nachbildung realer Strukturen für Transportsimulationen zur Untersuchung der Transportprozesse bei der Elektrolyse eingesetzt werden.

Eine wichtige Kenngröße ist die in der vorliegenden Arbeit untersuchte Porosität. Diese ist, wie die Untersuchungen gezeigt haben, abhängig von der Wahl von $p_{overlap}$. Zudem ist es

möglich, die Porosität einer Kugelpackung auf eine gewünschte Porosität abzusenken, indem in einem Postprocessing die einzelnen Kugeln zufällig vergrößert werden. Eine weitere wichtige Kenngröße ist die Permeabilität einer Struktur. Sie entspricht der Durchlässigkeit einer PTL und wird zur Beschreibung poröser Materialien verwendet. Die Permeabilität realer Strukturen lässt sich entweder experimentell oder anhand von Schwarz-Weiß-Bildserien in Transportsimulationen bestimmen. Solche Schwarz-Weiß-Bildserien, die die Querschnitte durch eine PTL darstellen, werden auch für die erstellten Kugelpackungen generiert. Die Transportsimulationen, die hohe Ressourcen erfordern, werden üblicherweise auf Hochleistungsrechnern durchgeführt.

Vor diesem Hintergrund kann die entwickelte Software genutzt werden, um Kugelpackungen zu generieren, deren Permeabilitäten an denen von realen Strukturen angepasst werden. Dafür müssen die Eingabeparameter des entwickelten kugelbasierten Geometriemodells wie Radienverteilung und -intervall, Abstand der Kugeln in der Initialisierungsebene sowie das Überlappungskriterium $p_{overlap}$ so gefittet werden, dass die gewünschten Permeabilitäten erzielt werden.

Literatur

- [1] U. Panchenko. “Massentransportphänomene in Schichtsystemen eines Elektrolyseurs”. Dissertation. RWTH Aachen University, 2019. URL: <http://hdl.handle.net/2128/23253>.
- [2] D. Borah. “Two-phase Flow in Porous Transport Layers of Polymer Electrolyte Membrane Electrolysers”. Dissertation. RWTH Aachen University, 2021. URL: <http://hdl.handle.net/2128/28716>.
- [3] K. Havemann, L. Rhein und T. Noppeney. *Erzeugen von irregulären Kugelpackungen*. SWT-Projekt. Fachhochschule Aachen, 2021.
- [4] A. Elsner. “Computergestützte Simulation und Analyse zufälliger dichter Kugelpackungen”. Dissertation. Technische Universität Bergakademie Freiberg, 2009. URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:105-qucosa-61829>.
- [5] K. Havemann. *Statistische Bewertung der Irregularität von Kugelverteilungen zur Anwendung auf poröse Sinterkörper*. Seminararbeit. Fachhochschule Aachen, 2021.
- [6] C. H. Bennett. “Serially Deposited Amorphous Aggregates of Hard Spheres”. In: *Journal of Applied Physics* 43.6 (1972), S. 2727–2734.
- [7] The SciPy community. *scipy.optimize.minimize*. URL: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.minimize.html>.
- [8] L. Sachs und J. Hedderich. *Angewandte Statistik : Methodensammlung mit R*. 14., überarb. und erg. Aufl. Berlin: Springer, 2012.
- [9] N. L. Johnson, S. Kotz und N. Balakrishnan. *Continuous univariate distributions Volume 2*. 2. Aufl. New York: Wiley, 1995.
- [10] E. B. Saff und A. B. J. Kuijlaars. “Distributing Many Points on a Sphere”. In: *The Mathematical Intelligencer* 19.1 (1997), S. 5–11.

A Irregularitätsmaß

Bei der Bewertung von Irregularität sollen die Richtungen direkt benachbarter Kugeln betrachtet werden. Kugeln einer Kugelpackung sind direkte Nachbarn, wenn sie sich berühren oder durchdringen. Die Richtung zwischen zwei direkten Nachbarkugeln lässt sich durch zwei Winkel beschreiben (Abb. A.1). Wie bei Kugelkoordinaten gibt es einen azimutalen Winkel $\varphi \in [0^\circ; 360^\circ[$ und einen polaren Winkel $\theta \in [0^\circ; 180^\circ]$. Im Gegensatz zu Kugelkoordinaten wird kein Radius oder Abstand zwischen den Kugeln betrachtet.

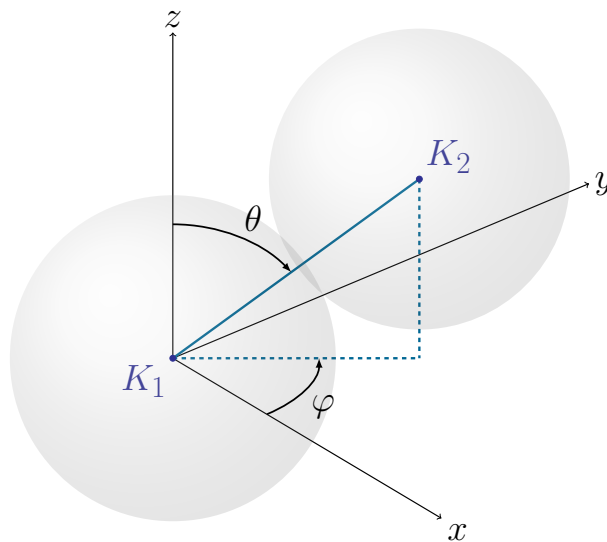


Abbildung A.1: Skizze zur Beschreibung der Richtung anhand des azimutalen Winkels φ und des polaren Winkels θ zweier direkter Nachbarkugeln mit den Mittelpunkten K_1 und K_2 .

Innerhalb einer Kugelpackung sollen alle Richtungen zwischen direkten Nachbarn bestimmt werden. Da eine Richtung immer durch genau zwei Kugeln festgelegt wird, muss ausgewählt werden, von welcher der beiden Kugeln ausgehend die Richtung bestimmt werden soll. Als das entscheidende Kriterium wurde der azimutale Winkel φ festgelegt. Damit Richtungen nicht doppelt erfasst werden, werden nur die Winkel zu den Richtungen bestimmt, bei denen der azimutale Winkel φ im Intervall $[0^\circ; 180^\circ[$ liegt.

Um zu beurteilen, ob Kugeln irregulär oder regulär angeordnet sind, muss ein geeignetes Maß für Irregularität definiert werden. Zunächst ist bekannt, dass bei einer regulären Anordnung feste, sich wiederholende Strukturen mit analytisch berechenbaren Winkeln vorliegen. Bei einer dichtesten Kugelpackung zum Beispiel kann der azimutale Winkel die Werte $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, \dots, 330^\circ$ annehmen und der polare Winkel die Werte $35,26^\circ$ und

144,74°.

In der vorliegenden Arbeit wird angenommen, dass eine irreguläre Anordnung der Kugeln eine gleichmäßige Verteilung der Richtungen bedeutet. Gehen diese gleichmäßigen Richtungen von einem Ursprungspunkt aus und werden von dort auf die Oberfläche einer Kugel projiziert, dann lässt sich die analoge Aufgabenstellung zur gleichmäßigen Verteilung einer bestimmten Anzahl Punkte auf einer Kugeloberfläche betrachten. Die Richtungen sind auch hier über einen azimutalen und einen polaren Winkel eindeutig charakterisiert.

Saff und Kuijlaars [10] beschreiben einen Algorithmus zum gleichmäßigen Verteilen von Punkten auf einer Kugeloberfläche, der für $n \leq 12.000$ Punkten hinreichend genau sei. Der Algorithmus wurde genutzt, um 12.000 Punkte auf der Oberfläche einer Einheitskugel zu verteilen und daraus Modellverteilungen für den azimutalen und den polaren Winkel zu generieren. Da im entwickelten Kugelmodell jedoch nur Richtungen mit einem azimutalen Winkel φ im Intervall $[0^\circ; 180^\circ[$ betrachtet werden, wurde der Algorithmus angepasst und alle Punkte mit φ größer als 180° am Kugelmittelpunkt gespiegelt. Das Ergebnis ist in Abbildung A.2 dargestellt.

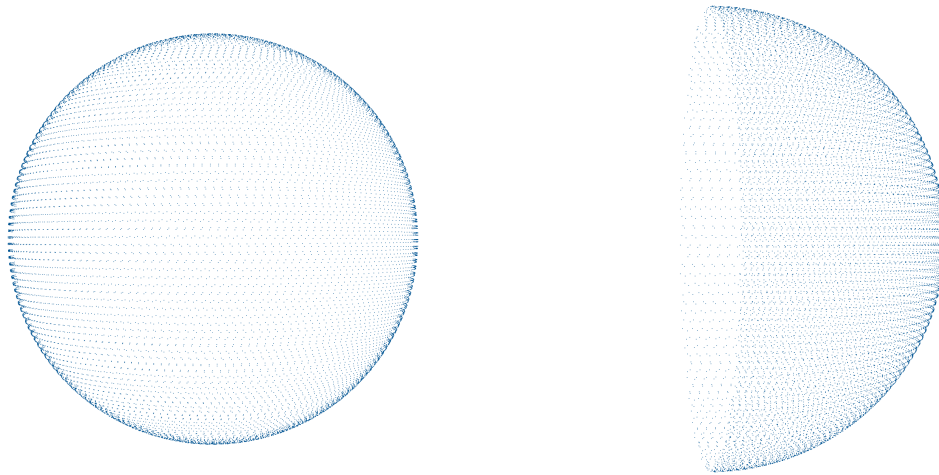


Abbildung A.2: 12.000 Punkte, die gleichmäßig auf der Hälfte der Oberfläche einer Einheitskugel verteilt sind aus zwei Perspektiven visualisiert in Paraview. Alle Punkte mit einem azimutalen Winkel $\varphi \geq 180^\circ$ wurden am Kugelmittelpunkt gespiegelt.

Aus den durch den Algorithmus erhaltenen Richtungen lassen sich Modellverteilung für die beiden Winkel φ und θ ableiten. In Abbildung A.3 sind die geschätzten Dichten für den azimutalen und den polaren Winkel dargestellt. Der azimutale Winkel φ folgt im Intervall $[0; 180^\circ]$ einer Gleichverteilung (Abb. A.3a).

Die Dichte des polaren Winkels θ ist eine unimodale Abbildung mit dem einzigen Maximum bei 90° (Abb. A.3b). 90° entspricht dem Äquator der Kugel. Die Pole liegen bei 0° und 180° . Um gleichmäßig verteilte Punkte zu erhalten, müssen am Äquator mehr Punkte platziert werden als an den Polen. Motiviert durch den von Saff und Kuijlaars [10] beschriebenen Algorithmus und anhand des Verlaufs der Dichtefunktion des polaren Winkels liegt die Vermutung nahe, dass es sich um eine trigonometrische Verteilung handeln könnte. Ein

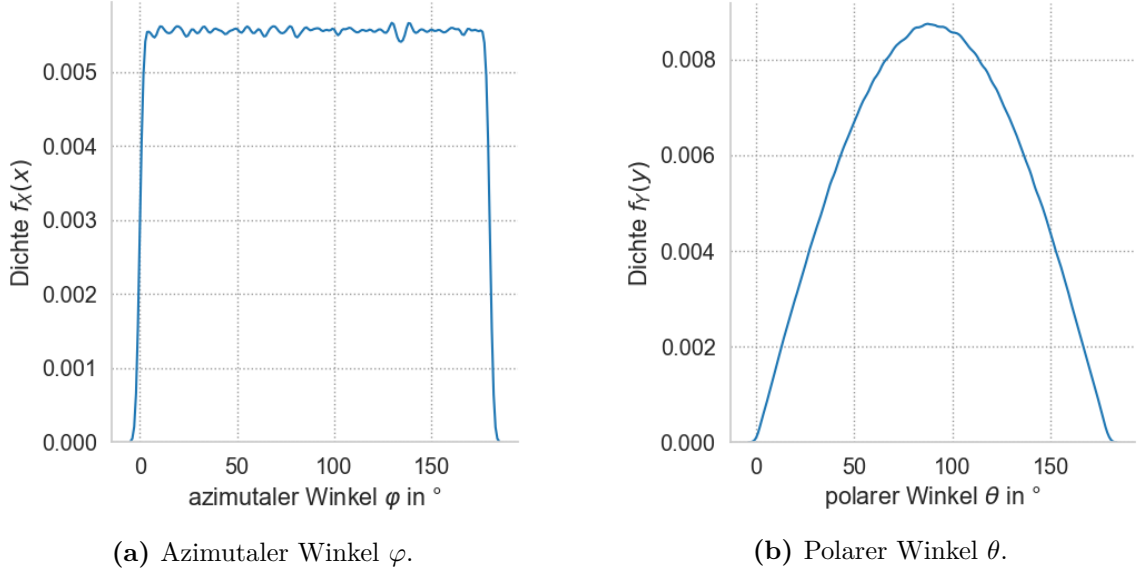


Abbildung A.3: Visualisierung der Verteilungsdichte der Winkel φ und θ bei gleichmäßigen Richtungen über den Kerndichteschätzer (kde).

Übereinanderlegen der Dichtefunktion von θ transformiert auf das Intervall $[-\pi; \pi]$ (Formel A.1) und der Funktion `cosine` aus dem Python Paket `scipy.stats` konnte diese Vermutung jedoch nicht bestätigen (Abb. A.4). Die statistische Hypothese einer Übereinstimmung wurde zudem durch den Kolmogorov-Smirnov-Test abgelehnt.

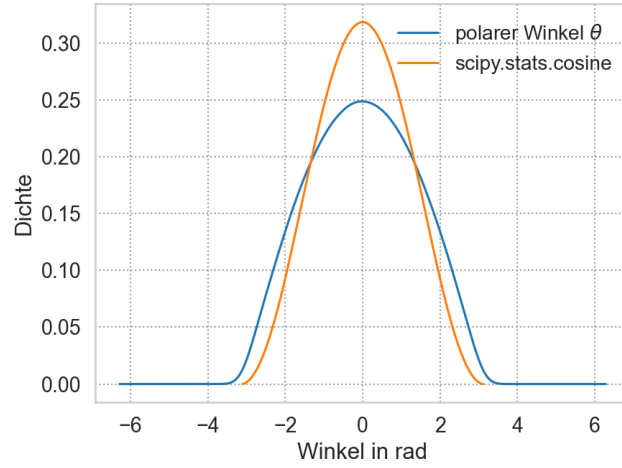
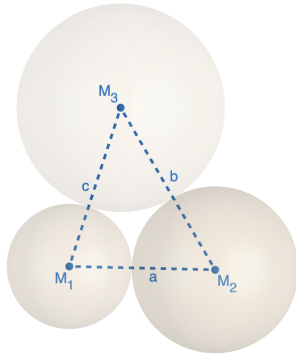


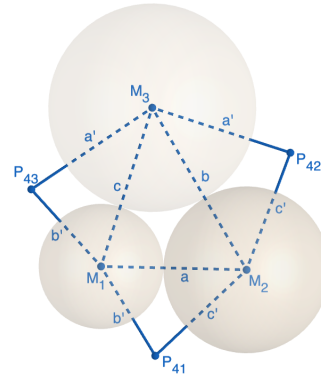
Abbildung A.4: Verteilungsdichten der Funktion `scipy.stats.cosine` und des transformierten polaren Winkels θ bei gleichmäßig verteilten Richtungen.

$$\theta' = \frac{\theta - 90}{180} \cdot 2\pi \quad (\text{A.1})$$

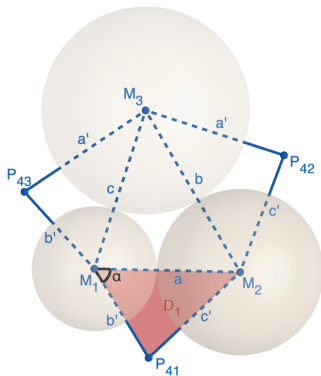
B Visualisierung des geometrischen Verfahrens zur Pocketberechnung



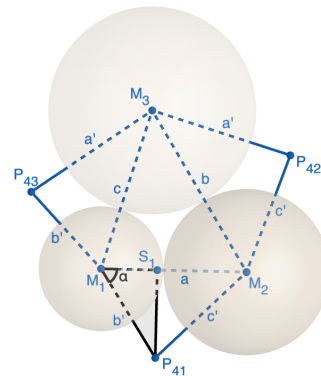
(a) M_1 , M_2 und M_3 spannen die Grundfläche der Pyramide auf.



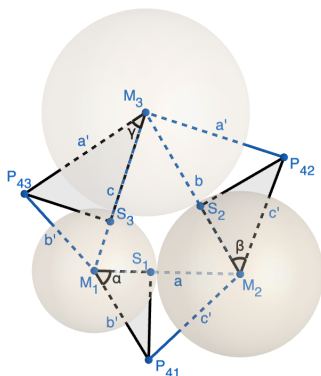
(b) Grundfläche und drei aufgeklappte Seitenflächen der Pyramide.



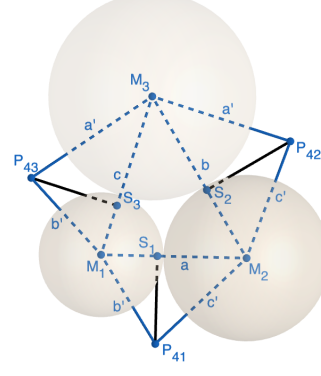
(c) Winkel α im Dreieck D_1 über Kosinussatz zu bestimmen.



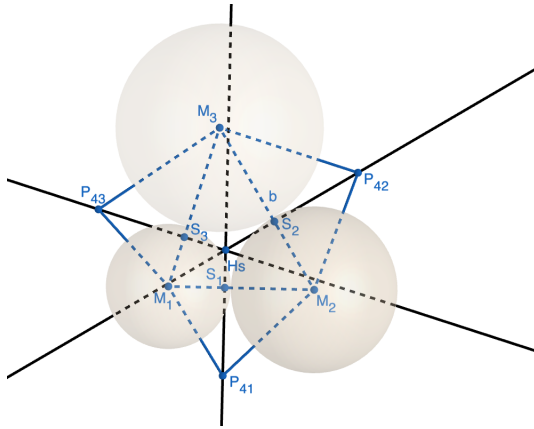
(d) S_1 als Schnittpunkt zwischen Höhe und Grundlinie von D_1 .



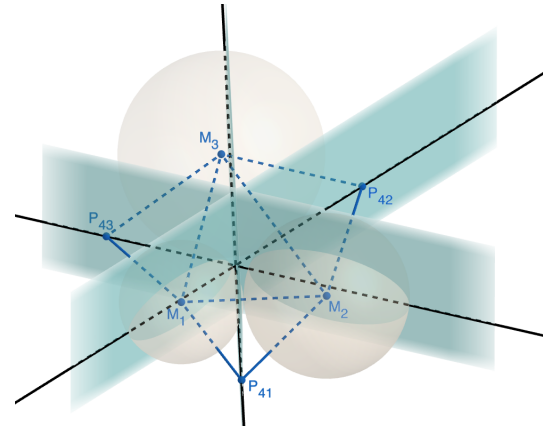
(e) Bestimmung von S_2 und S_3 analog zu S_1 .



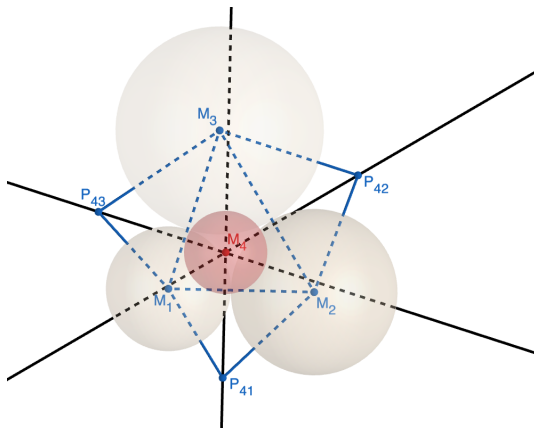
(f) S_1 , S_2 und S_3 als Schnittpunkte zwischen Höhen und Grundlinien.



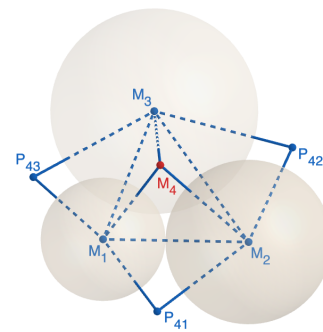
(g) H_s als Schnittpunkt der Höhengeraden der drei Seitenflächen.



(h) Drei Ebenen senkrecht zu E , in denen jeweils M_4 liegen muss.



(i) M_4 als Mittelpunkt der neuen Kugel senkrecht über H_s .



(j) Pyramide mit den Eckpunkten M_1 , M_2 , M_3 und M_4 .

Abbildung B.1: Visualisierung der Rechenschritte im geometrischen Verfahren zur Berechnung einer Pocket.