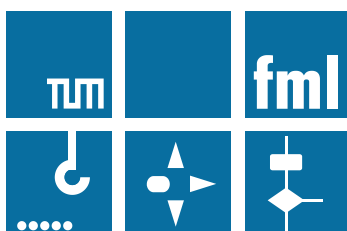


21. Fachtagung Schüttgutfördertechnik 2016

Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern

Michael Rackl, Willibald A. Günthner



Michael Rackl, M.Sc.

fml -Lehrstuhl für
Fördertechnik Materialfluss Logistik
Technische Universität München
Boltzmannstraße 15
85748 Garching

Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern

Die Parametrierung von Materialmodellen der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) für die Simulation in der Fördertechnik ist aufwändig. Mikromechanische Eigenschaften und vor allem empirische Parameter, wie z.B. die Rollreibung, können meist nicht direkt gemessen werden und machen einen iterativen Kalibrierungsprozess nötig. Dieser wird oft mittels eines ineffizienten Versuch-und-Irrtum-Schemas durchgeführt, dessen Ergebnisqualität maßgeblich von der Erfahrung des durchführenden DEM-Anwenders abhängt. Die hier vorgestellte Arbeit zeigt einen Prozessablauf, bei dem der Kalibrierungsvorgang methodisch aufbereitet und automatisiert wurde. Basierend auf Methoden der Metamodellbildung werden die eingesetzten Diskrete-Elemente-Modelle zunächst analysiert, um basierend auf diesen Daten ein Metamodell zu parametrisieren. In einem zweiten Schritt erfolgt die numerische Optimierung der Kalibrierungsparameter mittels des Metamodells, hier gezeigt am Beispiel der Rollreibung und Partikeldichte. Zu den Kalibrierungszielen gehört, neben Messdaten des Schüttwinkels und der Schüttdichte, auch der Rayleigh-Zeitschritt. Der letzte Schritt des Prozesses umfasst die abschließende Kalibrierung der DEM-Materialmodellparameter auf Basis der Diskrete-Elemente-Modelle. In einer Studie konnte das Kalibrierungsverfahren erfolgreich verifiziert werden. Die Simulationsergebnisse von Schüttwinkel und -dichte für Glasperlen lagen innerhalb von wenigen Prozent Abweichung von Messergebnissen aus der Literatur. Es waren durchschnittlich 30 DEM-Berechnungsläufe nötig, um einem optimierten Parametersatz für Rollreibung und Partikeldichte zu bestimmen. Das Kalibrierungsverfahren erwies sich als robust und erzeugte auch unter ungünstigen Randbedingungen gültige DEM-Parametersätze.

1 Einführung

Die Diskrete-Elemente-Methode (DEM) hat in der Schüttgutfördertechnik in den letzten 15 Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen. Sie wird zur Modellierung und Simulation von Schüttgütern eingesetzt und ermöglicht zum Beispiel die Berechnung von mechanischen Belastungen auf Fördermittel oder die Untersuchung des Fließverhaltens an Übergabestellen.

Trotz der breiten Akzeptanz dieser numerischen Berechnungsmethode wird sie noch nicht in der Breite eingesetzt. Ein Grund hierfür ist, dass sich die Bestimmung von Material- und Kontaktparametern schwierig gestaltet. Nicht alle der Simulationsparameter können mittels physikalischer Messung bestimmt werden oder deren Messung erfordert einen sehr großen Aufwand. Beispiele sind Stoßzahlen oder Rollreibungskoeffizienten. Ein weiterer Fall sind so genannte *coarse-grained models*, also Partikel-Modelle, bei denen die Partikelabmessungen zur Rechenzeiteinsparung vergrößert werden und ein Element mehrere Originalpartikel repräsentiert. Aufgrund der Partikelgrößenskalierung sind viele Eigenschaften messtechnisch nicht bestimmbar.

Da Material- und Kontaktparameter für DEM-Modelle (im Folgenden als Materialmodellparameter bezeichnet) nicht direkt vorliegen, müssen diese anderweitig ermittelt werden. Ein weit verbreitetes Vorgehen ist die Durchführung von einfachen Materialtests mit dem zu

modellierendem Schüttgut, z.B. Scherzelle, Schüttdichte, Schüttwinkel. Diese Materialtests werden anschließend mittels DEM modelliert, um die Simulationsergebnisse mit den Messungen vergleichen. Um die DEM-Materialmodellparameter zu ermitteln, werden diese so lange verändert, bis sich in der Simulation die gleichen Ergebnisse wie im Versuch einstellen. Dieser Vorgang wird als Kalibrierung bezeichnet.

2 Vorgehen bei der Kalibrierung

Die Güte der Übereinstimmung zwischen Experiment und DEM-Simulation der Materialtests entscheidet maßgeblich über die Aussagekraft des DEM-Modells eines Schüttguts. Da DEM-Simulationen im Allgemeinen sehr rechenzeitaufwändig sind, ist man bestrebt, die Anzahl der zum Kalibrieren nötigen Berechnungsläufe so gering wie möglich zu halten.

Bereits ein einfaches DEM-Modell, bestehend aus einem Schüttgut und einem Wandmaterial, beinhaltet mindestens zehn veränderbare materialbezogene Parameter. Die wichtigsten sind die Partikelgrößenverteilung, die Partikeldichte, der Elastizitätsmodul und die Reibungskoeffizienten zwischen Schüttgutpartikeln sowie Schüttgutpartikeln und Wandmaterial, für Coulomb- und Rollreibung. Zudem existieren Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Parametern, welche die Kalibrierung von mehreren Zielgrößen (Messwerten) weiter verkomplizieren. Eine zusätzliche Schwierigkeit ist, dass manche Materialparameter die maximale Berechnungszeitschritt-Größe beeinflussen und deshalb auch die numerische Effizienz des kalibrierten Materialmodells mit bestimmen.

2.1 Typisches Vorgehen beim Kalibrieren

Die Kalibrierung von DEM-Materialmodellparametern wird im Allgemeinen von einem DEM-Anwender – also einem Menschen – durchgeführt. Dabei hängt die Anzahl der benötigten DEM-Berechnungsläufe und die schlussendlich erzielte Genauigkeit der Kalibrierungsergebnisse entscheidend von dessen Erfahrung ab. Der hohe Anspruch des Kalibrierungsvorgangs an den Anwender ergibt sich aus der Anzahl der zu Grunde liegenden Zielgrößen und vor allem des Wissens um den Einfluss und das Zusammenspiel der einzelnen DEM-Materialparameter auf die jeweiligen Simulationsergebnisse.

Zumeist tastet sich ein Anwender über Parameterstudien an die Effekte der einzelnen Parameter heran. Wechselwirkungen, welche sich aus der gleichzeitigen Veränderung von mehreren Parametern ergeben, bleiben dabei oft unberücksichtigt, da sie ohne rechentechische Unterstützung nur schwer quantifizierbar sind. Zudem muss der Anwender bei mehreren Zielgrößen den Einfluss der Parameter in mehreren Materialtest-Simulationen gleichzeitig beurteilen und dabei den Überblick behalten. Dies führt meist dazu, dass die Kalibrierung von DEM-Materialmodellparametern nach dem Versuch-und-Irrtum-Schema abläuft und sehr viele DEM-Berechnungsläufe dazu nötig sind. Um die Anzahl der DEM-Berechnungsläufe nicht noch weiter zu erhöhen, gibt sich der Anwender häufig mit dem ersten gefundenen Parametersatz zufrieden, ohne explizit auf die numerische Effizienz des Parametersatzes zu achten.

2.2 Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodellparametern

Da die Kalibrierung von DEM-Materialmodellparametern stark vom Anwender abhängt, besteht der von Rackl et al. [Rac-16a] beschriebene Lösungsansatz darin, den Kalibrierungsvorgang soweit wie möglich vom Anwender unabhängig zu machen. Dazu wurden drei Hauptziele definiert. Erstens müssen die Prozesse der Modellparametrierung und der Datenverwaltung automatisiert werden. Die Auswertung wird dadurch nachvollziehbar und ihre Wiederholgenauigkeit steigt. Zweitens wird die Bestimmung der maßgebenden Effekte und Wechselwirkungen durch Metamodellbildung verwirklicht. Bei mehreren Ein- und Ausgangsgrößen ist es für einen Menschen extrem schwierig, sich einen Überblick über die relevanten Größen zu verschaffen und die entsprechenden Zusammenhänge wiederzugeben. Ein flexibles Metamodell bildet die Zusammenhänge deutlich präziser ab. Drittens wird der *Rayleigh*-Zeitschritt aktiv mit in die Kalibrierung einbezogen. Durch diesen, bislang in keinem anderen Kalibrierungsansatz beschriebenen, Zusatz wird sichergestellt, dass der kalibrierte DEM-Materialmodellparametersatz nicht nur die Bedingungen der Messdaten erfüllt, sondern auch möglichst große Berechnungszeitschritte ermöglicht.

Zur Umsetzung des effizienten Kalibrierungsverfahrens sind drei Schritte nötig [Rac-16a]. Zunächst legt der Anwender für jeden zu berücksichtigten Parameter ein Wertintervall fest, in dem er den „richtigen“ Wert vermutet. Als Anhaltspunkte für die Intervallgrenzen können zum Beispiel Literaturwerte oder Daten von ähnlichen, mittels DEM kalibrierten Schüttgütern dienen. Kombiniert man alle Intervalle, ergibt sich im mathematischen Sinn ein Hyperraum, aus dem mittels *Latin hypercube sampling* (LHS) [McK-79] Parametersätze als Probenpunkte gezogen werden. LHS hat die Eigenschaft, dass die Probenpunkte zufällig, jedoch gleichmäßig im Hyperraum verteilt werden und jeder Parameterwert einzigartig ist. Durch die so erzeugten Parametersätze werden mit jedem Probenpunkt alle Parameter variiert und somit die Wechselwirkungen auswertbar. Die zu kalibrierenden DEM-Modelle werden mit den Werten jedes Probenpunkts parametrisiert und berechnet. Nach der Auswertung der Simulationsdaten liegen für die Metamodellbildung die Probenpunkte als Eingangsgrößen und die jeweiligen Simulationsergebnisse als Ausgangsgrößen vor.

Im zweiten Schritt wird *Kriging* [Mat-63] zur Metamodellbildung eingesetzt. Bei *Kriging* handelt es sich um ein statistisches Regressionsverfahren, welches auf einer Kovarianzmatrix basiert. Die Parametrisierung erfolgt über Ein- und Ausgangsdaten der zu beschreibenden Prozesse, wobei die *Kriging*-Parameter im Rahmen dieser Arbeit durch die *restricted maximum likelihood*-Methode (ReML) berechnet werden. Zusätzlich zur Bestimmung der Erwartungswerte kann an jedem Punkt im *Kriging*-Hyperraum die Varianz des Erwartungswertes geschätzt werden. Auf Basis der rechentechnisch sehr günstigen *Kriging*-Modelle wird ein multivariates Optimierungsproblem formuliert und mittels des Levenberg-Marquardt-Algorithmus [Lev-44, Mar-63] gelöst. Dabei sind die Messdaten sowie der, im Rahmen der vorgegebenen Materialparameterintervalle möglichst große, *Rayleigh*-Zeitschritt die Zielgrößen und die DEM-Materialmodellparameter die Veränderlichen. Als Ergebnis des zweiten Schritts steht ein anhand der Metamodelle kalibrierter DEM-Materialmodellparametersatz, \mathbf{C}_{opt} .

Der dritte Schritt bezieht wieder die zu kalibrierenden DEM-Modelle ein. \mathbf{C}_{opt} gibt zwar die ungefähre Lage eines Optimums an, basiert jedoch nur auf der Präzision der Metamodelle. Deshalb wird der Optimierungsprozess auf Basis der DEM-Modelle wiederholt. Mit \mathbf{C}_{opt} als Startwert benötigt die Kalibrierung anhand der DEM-Modelle nur sehr wenige DEM-Berechnungsläufe.

3. Verifizierung der Robustheit des Kalibrierungsverfahrens

Das beschriebene Kalibrierungsverfahren wurde in Rackl et al. [Rac-16b] für einen einfachen Materialtest verifiziert.

3.1 DEM-Modell und Schüttgut

Der in DEM modellierte Materialtest besteht aus einem nach oben und unten offenen Stahlzylinder, welcher auf einer Stahlunterlage ruht. Er wird mit Glaskugeln bis zu einer festgelegten Höhe befüllt und so die Schüttdichte der Glaskugelschüttung bestimmt. Als nächstes wird der Zylinder mit einer konstanten Geschwindigkeit vertikal nach oben bewegt, sodass sich unter dem Einfluss der Schwerkraft ein Schüttkegel aus Glaskugeln bildet. Nachdem sich die kinetische Energie in dem System abgebaut hat, wird der Schüttwinkel durch Bildverarbeitung gemessen. Für Schüttwinkel und Schüttdichte von Glasperlen wurden Literaturwerte recherchiert und als Zielwerte für die Kalibrierung gesetzt.

Zur Kalibrierung des Schüttwinkels und der Schüttdichte der Glasperlen wurden die Partikeldichte und der Rollreibungskoeffizient zwischen den Glaskugeln verwendet. Alle anderen DEM-Materialmodellparameter wurden konstant gehalten und die Glaskugeln als Kugeln modelliert.

Um die Leistungsfähigkeit des Kalibrierungsverfahrens zu bewerten, wurden mit dem DEM-Modell die Schüttdichten und Schüttwinkel für insgesamt 400 Kombinationen von Partikeldichte und Rollreibung (Glas-Glas) berechnet. Diese Daten bildeten das Referenzergebnis mit dem nun bekannten und vom Kalibrierungsverfahren zu ermittelnden DEM-Materialmodellparametersatz, der zu dem gesuchten Schüttwinkel und Schüttdichte führt.

3.2 Randbedingungen für die Kalibrierung

Zum Testen der Robustheit des Kalibrierungsverfahrens wurden verschiedene Randbedingungen definiert. Insgesamt wurden vier Faktoren untersucht. Diese waren der stochastische Einfluss der Kugelpackung (zwei Stufen), die Lage der Materialparameterintervalle relativ zum gesuchten Parametersatz (zwei Stufen), die Anzahl der Probenpunkte zur Parametrisierung der Metamodelle (10, 18, 26) sowie die relative Breite der Materialparameterintervalle (10%, 33%, 66%). Insgesamt wurde ein Versuchsplan mit 108 (3 mal 36) Kombinationen aus Randbedingungen abgearbeitet, für jede Kombination ein kompletter Kalibrierungszyklus durchlaufen und ein DEM-Materialmodellparametersatz bestimmt.

Die Lage der Materialparameterintervalle relativ zum gesuchten Parametersatz wurde auf zwei Stufen untersucht. Hierbei lag der gesuchte Parametersatz im Fall *zentriert* genau in der Mitte der Materialparameterintervalle und im Fall *rand* am Rand. Der erste Fall ist somit der Idealfall, bei dem die Materialparameterintervalle symmetrisch um den gesuchten Parametersatz liegen, wohingegen der zweite Fall als extrem ungünstig einzustufen ist. Liegt der gesuchte Parametersatz am Rand des Materialparameterintervalls, so ist zu erwarten, dass der Optimierungsalgorithmus sehr ineffizient arbeitet.

3.3 Ergebnisse der Verifizierung

Abbildung 1a und b zeigen die Referenzergebnisse für den Schüttwinkel (a) und die Schüttdichte (b). Die gepunkteten Bereiche kennzeichnen die Parametersätze, die mit einer Genauigkeit von $\pm 5\%$ den gesuchten Schüttwinkel bzw. die gesuchte Schüttdichte ergeben. Da der gesuchte DEM-Materialmodellparametersatz für beide Zielwerte gültig sein soll, wurde in Abbildung 1c die Schnittmenge aus Abbildung 1a und b dargestellt. Beide Zielwerte werden mit einer Partikeldichte von ca. 2100 kg/m^3 und Rollreibungskoeffizienten von 0,5 oder von 0,7 bis 1 erfüllt. Dies sind die gesuchten DEM-Materialmodellparametersätze, welche im Zuge dieser Studie vorab bestimmt wurden.

Von den 108 DEM-Materialmodellparametersätzen des Versuchsplans lagen ca. 86% bei den gesuchten Werten. Dies zeigt, dass das Kalibrierungsverfahren für den größten Teil der getesteten Randbedingungen zum erwarteten Ergebnis führte. Im Durchschnitt waren 30 DEM-Berechnungsläufe zur Berechnung der Werte für die Probenpunkte und die anschließende Kalibrierung nötig. Die Zielwerte für den Schüttwinkel und die Schüttdichte wurden mit einer durchschnittlichen Genauigkeit von 1.7% bzw. 5% getroffen. Diese Abweichungen liegen deutlich unter der von Messungen zu erwartenden Streuung.

Ein kleiner Teil der kalibrierten DEM-Materialmodellparametersätze lag deutlich abseits des gesuchten Bereichs. Diese Abweichungen lassen sich durch äußerst ungünstige Randbedingungen erklären; zum Beispiel die Kombination von sehr engen Materialparameterintervallen mit nur wenigen Probenpunkten und der Randlage der Materialparameterintervalle relativ zum gesuchten Parametersatz [Rac-16b].

Die Ergebnisse der Verifizierung zeigen zudem, dass der stochastische Einfluss der Kugelpackung zu keinen systematischen Abweichungen führt. Dies wurde erwartet und zeigt, dass das Verfahren nicht vom zufälligen Einfluss der anfänglichen Partikelposition beeinflusst wird.

4. Zusammenfassung

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, dass der von Rackl et al. [Rac-16a] beschriebene Kalibrierungsprozess in der Lage ist DEM-Materialmodellparametersätze für den Schüttwinkel und die Schüttdichte unter verschiedensten Randbedingungen zu kalibrieren. Durch die Einbeziehung des *Rayleigh*-Zeitschritts wurde zudem ein wichtiger Grundstein für die automatisierte Identifizierung von effizienten DEM-Materialmodellparametersätzen gelegt.

Zukünftige Arbeiten sind nötig, um die Zuverlässigkeit dieses Kalibrierungsverfahrens weiter abzusichern. Insbesondere sollten mehr DEM-Materialparameter zur Kalibrierung herangezogen werden sowie zusätzliche DEM-Modelle implementiert werden.

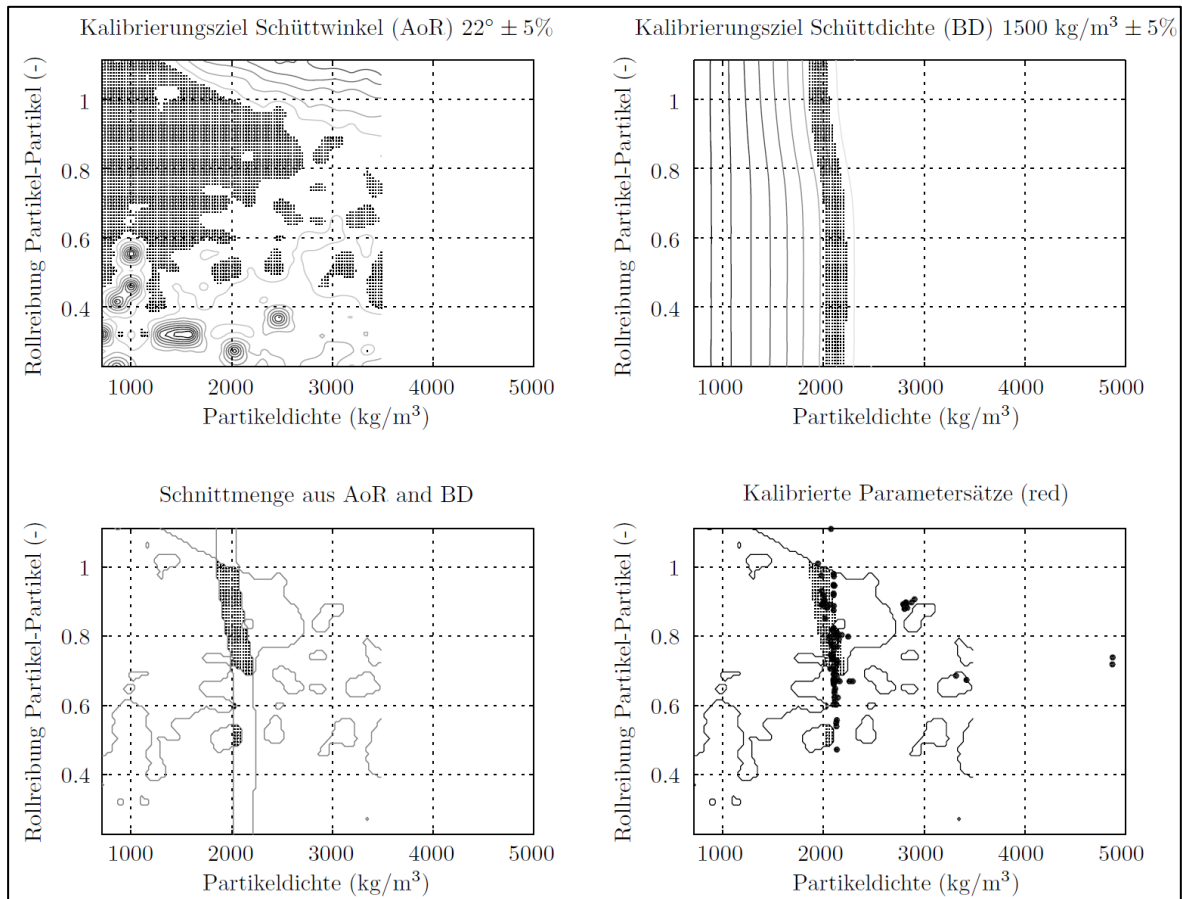


Abbildung 1: Gesuchte DEM-Materialmodellparametersätze (kleine Punkte) und Ergebnisse mittels des Kalibrierungsverfahrens (große Punkte).

5 Förderhinweis

Diese Arbeit entstand im Rahmen des IGF-Vorhabens 18371 N/1 wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Literaturverzeichnis

- [Lev-44] Levenberg, Kenneth: A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics* 2 (2), S. 164–168, 1944.
- [Mar-63] Marquardt, Donald W.: An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 11 (2), 1963.
- [Mat-63] Matheron, G.: Principles of geostatistics. In: *Economic Geology* 58 (8), S. 1246–1266, 1963.
- [McK-79] McKay, M. D.; Beckman, R. J.; Conover, W. J.: A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. *Technometrics* 21 (2), S. 239–245, 1979
- [Rac-16a] Rackl, Michael; Görnig, Carolin D.; Hanley, Kevin J.; Günthner, Willibald A.: Efficient Calibration of Discrete Element Material Model Parameters Using Latin Hypercube Sampling and Kriging; In: M. Papadrakakis, V. Papadopoulos, G. Stefanou und V. Plevris (Hg.): *Proceedings of the VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2016)*. Kreta, Griechenland, 5-10. Juni 2016
- [Rac-16b] Rackl, Michael; Hanley, Kevin J.; Günthner, W. A.: Verification of an automated work flow for discrete element material parameter calibration. In: Xikui Li, Yuntian Feng und Graham Mustoe (Hg.): *Proceedings of the 7th International Conference on Discrete Element Methods*. Springer Proceedings in Physics 188. Erste Auflage. Singapur: Springer Singapore. Im Druck befindlich, 2016.