

DEM-Schüttgutdatenbank –

Generierung einer Datenbank zur Kalibrierung von Schüttgütern für die DEM-Simulation von Förderanlagen

W. A. Günthner · J. Fottner · S. Kessler · H. Otto · M. Rackl

Schlussbericht

zu dem IGF-Vorhaben

**DEM-Schüttgutdatenbank - Generierung einer Datenbank zur Kalibrierung von
Schüttgütern für die DEM-Simulation von Förderanlagen**

der Forschungsstelle(n)

Lehrstuhl für Fördertechnik Materialfluss Logistik
Technische Universität München

Das IGF-Vorhaben 18371 N1 der Forschungsvereinigung Bundesvereinigung Logistik e.V. - BVL
wurde über die



im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie

aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Garching, 31.01.2017

Ort, Datum

Michael Rackl

Name und Unterschrift des/der Projektleiter(s)
an der/den Forschungsstelle(n)

DEM-Schüttgutdatenbank

Vorhaben Nr. 18371 N1

Generierung einer Datenbank zur Kalibrierung von Schüttgütern für die DEM-Simulation von Förderanlagen

Abschlussbericht

Kurzfassung:

Das Ziel des Projekts DEM-Schüttgutdatenbank war die Entwicklung eines einheitlichen Vorgehens zur Kalibrierung von Materialparametern für die Berechnung mittels der Diskrete-Elemente-Methode (DEM). Insgesamt wurden 11 industrierelevante Schüttgüter aus verschiedenen Branchen der Messung von charakteristischen Schüttguteigenschaften unterzogen. Zur Messung kamen unter anderem eine Translationsscherzelle und ein im Rahmen des Projekts entwickelter Versuchsstand zur Messung von Schüttdichte und Schüttwinkel zum Einsatz. Die gemessenen Daten des Schüttwinkels sowie der Schüttdichte dienten als Grundlagen für den Praxistest eines eigens entwickelten automatisch ablaufenden Verfahrens zur Kalibrierung von DEM-Material- und Kontaktmodellparametern, welches erfolgreich getestet, verifiziert und zur Kalibrierung der untersuchten Schüttgüter angewandt wurde. Zusätzlich konnte demonstriert werden, dass die Einbindung des Rayleigh-Zeitschritts in den Optimierungsvorgang systematisch zu größeren Simulationszeitschritten führt und ein geeignetes Mittel ist, um der Lösungsvielfalt bei der Kalibrierung von DEM-Schüttgutmodellen zu begegnen. Der zur Kalibrierung entwickelte Programmcode wird mit Ende des Projektes als quelloffene Software öffentlich zugänglich gemacht, um interessierten Kreisen uneingeschränkter Zugang zum entwickelten Verfahren zu erlauben und die Weiterentwicklung des Kalibrierungsverfahrens zu ermöglichen.

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist erreicht worden.

Berichtsumfang:	76 S., 36 Abb., 20 Tab., 68 Lit.
Beginn der Arbeiten:	01.12.2014
Ende der Arbeiten:	30.11.2016
Zuschussgeber:	BMW i / IGF-Nr. 18371 N1
Forschungsstelle:	Lehrstuhl für Fördertechnik Materialfluss Logistik, Technische Universität München Leiter: Prof. Dr.-Ing. Dipl.-Wi.-Ing. Willibald A. Günthner
Bearbeiter und Verfasser:	Michael Rackl, Hendrik Otto

Inhaltsverzeichnis

1	Management Report	1
2	Einleitung	3
2.1	Problemstellung	3
2.2	Forschungsziel	4
3	Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern	5
3.1	Diskrete-Elemente-Methode	5
3.2	Ansätze zur Kalibrierung	6
3.2.1	Hintergrund zur Notwendigkeit der Kalibrierung	6
3.2.2	Ansätze zur Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern	8
3.2.3	Gegenüberstellung der Kalibrierungsansätze	9
3.3	Anforderungen an ein methodisches Kalibrierungsverfahren	10
4	Entwicklung und Umsetzung eines methodischen Kalibrierungsverfahrens für DEM-Materialmodell-Parameter	13
4.1	Ansatz	13
4.2	Implementierung des Kalibrierungsverfahrens	16
4.3	Verifizierung	17
4.4	Effizienz während der Verifizierung des Kalibrierungsverfahrens	23
4.5	Fazit	24
4.6	Verfügbarkeit des Quellcodes	24
5	Messung von Schüttguteigenschaften	25
5.1	Untersuchte Schüttgüter	25
5.2	Experimentelle Untersuchung der Schüttgüter	28
5.2.1	Feuchtigkeitsgehalt	28
5.2.2	Partikelgrößenverteilung	29
5.2.3	Schüttwinkel	29
5.2.3.1	Versuchsstand (fml)	29
5.2.3.2	Versuchsstand OvGU	30
5.2.4	Schüttdichte	31
5.2.4.1	Zylindrischer Behälter (fml)	31
5.2.4.2	OvGU	31
5.2.5	Scherzellenversuch für Wandreibwerte sowie Haftreibungskoeffizienten	31
5.3	Ergebnisse	32
5.3.1	Feuchtigkeitsgehalt	32
5.3.2	Partikelgrößenverteilung	33
5.3.3	Schüttwinkel	37
5.3.4	Schüttdichte	39
5.3.5	Wandreibwerte und Haftreibungskoeffizienten	39
6	Kalibrierung von verschiedenen Schüttgütern	41
6.1	Allgemeines	41

6.2	Kalibrierungsrandbedingungen nach Materialien	45
6.3	Ergebnisse	48
6.3.1	Kalibrierte Materialparameter und Kalibrierungsqualität	48
6.3.2	Effizienz des Kalibrierungsverfahrens	51
7	Zusammenfassung der Forschungsergebnisse und Ausblick	53
7.1	Zusammenfassung	53
7.2	Nutzen und industrielle Anwendungsmöglichkeiten	53
7.3	Ausblick	55
7.4	Verwendung der zugewiesenen Mittel	55
7.4.1	Wissenschaftlich-technisches Personal (Einzelansatz A.1 des Finanzierungsplans)	57
7.4.2	Geräte (Einzelansatz B des Finanzierungsplans)	58
7.4.3	Leistungen Dritter (Einzelansatz C des Finanzierungsplans)	58
7.5	Ergebnistransfer in die Wirtschaft	58
A	Anhang	63
	Abbildungsverzeichnis	68
	Tabellenverzeichnis	70
	Literaturverzeichnis	71

1 Management Report

The aim of the project *DEM-Schüttgutdatenbank* was to develop a standardised approach for the calibration of discrete element material parameters. A total of 11 bulk solids of industrial interest from various branches were subject to experimental characterisation. The experimental setups included a translational shear cell and a measurement apparatus to measure bulk solid and angle of repose, which was developed and manufactured specifically for the project. The bulk solids' measurement data of the angle of repose and bulk density were used as a basis for testing the unique calibration procedure, which was developed during the course of this project. The calibration procedure was successfully tested, verified and applied to calibrate DEM material parameters for the investigated bulk solids. Furthermore, it could be demonstrated that implementation of the Rayleigh time step into the calibration process systematically increases the value of the achievable simulation time steps and hence is an appropriate and sensible means of solving the problem of having to choose between various valid DEM parameter sets. The code developed to implement the automatic calibration procedure will be released as open-source code after the project is finished, in order to grant interested parties access to the the technique and foster further development of the methodology.

2 Einleitung

Die Funktionsweise neuer Schüttgutförderanlagen wird in vielen Fällen noch durch aufwändige und teure Versuchsanlagen untersucht und verifiziert. Als numerisches Hilfsmittel wurde in den letzten Jahren die DEM-Simulation (DEM: Diskrete-Elemente-Methode) vielfach in der Forschung und Produktentwicklung eingesetzt. Die wissenschaftlich-technische Problemstellung ist, dass bisher keine einheitlichen und durchgängigen Verfahren existieren, die die Kalibrierung der Materialmodellparameter für die DEM nach einem genau vorgegebenen Schema ermöglichen. Daher muss jeder Anwender vor den eigentlichen Simulationen die Materialparameterwerte neu kalibrieren.

2.1 Problemstellung

Trotz des stetigen Anstiegs der verfügbaren Berechnungsleistung ist es bis heute nicht möglich jedes Schüttgut mittels der DEM mit realen Partikelgrößen zu simulieren. Bei der DEM-Simulation von großskaligen Prozessen mit sehr großen Schüttgutvolumina müssen deshalb Abstriche bei der Diskretisierung der realen Partikel gemacht werden. Würden beispielsweise Förderanlagen mit hunderten Kilogramm oder mehreren Tonnen Material mit einer realen Partikelgrößenverteilung simuliert werden, so müsste aufgrund des Feinanteils des Schüttguts die Bewegung und Interaktion von Milliarden von Körpern berechnet werden. Trotz der effizienten Kontaktfindungsalgorithmen und Parallelisierung von modernen DEM-Codes würde eine solch große Partikelanzahl selbst mit der Parallelisierung auf Berechnungsclustern zu Berechnungszeiten in der Größenordnung von Wochen oder Monaten führen. Um die Partikelanzahl innerhalb von DEM-Modellen zu reduzieren, werden Schüttgüter deshalb nicht mit der gemessenen Partikelgrößenverteilung modelliert, sondern die geometrischen Abmessungen der Partikel hochskaliert. In der Literatur werden solche DEM-Partikelmodelle als *coarse-grained* (dt. *grobkörnig*) bezeichnet [Sak-2014; Nas-2015]. Durch die teils massive Einsparung von Berechnungszeit ist der *coarse-graining*-Ansatz in der industriellen Anwendung der DEM weit verbreitet [Sak-2016].

Ein Nachteil der Skalierung der Korngrößenverteilung ist, dass die physikalische Bedeutung der Material- und Kontaktparameter des DEM-Modells nicht mehr exakt zuordenbar ist. Beispielsweise verliert die Partikeldichte ihre Bedeutung, wenn mehrere verschiedenförmige Partikel als ein einziges Objekt diskretisiert werden. Aus diesem Grund lassen sich physikalisch gemessene (mikro-)mechanische Daten nicht direkt zur Parametrisierung von *coarse-grained*-DEM-Modellen heranziehen und zur Bestimmung der Material- und Kontaktmodellparameter bei veränderter Partikelgrößenverteilung wird eine inverse Parameteridentifikation nötig. Dieser Vorgang wird im Rahmen der DEM als *Kalibrierung* bezeichnet. Ausgehend von Messdaten aus Experimenten werden die entsprechenden Messvorrichtungen mittels DEM modelliert und der Versuchsvorgang simuliert. Die Material-

2.2 Forschungsziel

und Kontaktparameter des DEM-Modells werden so lange verändert, bis das Simulationsergebnis mit den experimentellen Messdaten überein stimmt.

Das Vorgehen bei der Kalibrierung und die Ergebnisse des Kalibrierungsvorgangs hängen dabei stark vom jeweiligen DEM-Anwender ab. Oft werden die Parameter in den zu kalibrierenden DEM-Modellen im Versuch-und-Irrtum-Verfahren verändert, wodurch die Kalibrierung ständig die Aufmerksamkeit des Anwenders erfordert und sehr ineffizient abläuft. Zudem verlieren selbst erfahrene Anwender schnell den Überblick, wenn mehrere DEM-Modelle gleichzeitig für ein bestimmtes Schüttgut kalibriert werden sollen. Das Fehlen von systematischen Kalibrierungsverfahren wird als eine der größten Hürden für den industriellen Einsatz der DEM angesehen [Mar-2015].

2.2 Forschungsziel

Da für die Kalibrierung keine methodische Vorgehensweise existierte, sollte im Rahmen dieses Projekts ein Kalibrierungsverfahren entwickelt werden, um damit DEM-Materialparameter für eine Datenbank zu generieren. Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag in der Durchführung von einfachen Schüttgut-Materialtests, um eine Datenbasis für die Kalibrierung zu erstellen, sowie die Konzeption, Ausarbeitung und Verifizierung eines möglichst allgemeinen Kalibrierungsverfahrens für DEM-Materialmodell-Parameter.

3 Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern

Dieses Kapitel enthält einen kurzen Abriss zur Theorie der DEM und dem Stand der Wissenschaft und Technik beim Kalibrieren von DEM-Schüttgutmodellen. Im letzten Abschnitt werden Anforderungen an ein systematisches Kalibrierungsverfahren definiert.

3.1 Diskrete-Elemente-Methode

Bei der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) handelt es sich um eine numerische Berechnungsmethode. Mit ihrer Hilfe lassen sich Systeme aus granularer Materie modellieren und simulieren. Sie wurde 1979 von Cundall und Strack zur Simulation auf dem Gebiet der Fels- bzw. Bodenmechanik entwickelt [Cun-1979]. Mittels der DEM lässt sich die Bewegung von Partikeln sowie deren gegenseitige Interaktion explizit simulieren.

Die Methode kommt vor allem dort zum Einsatz, wo die Kontinuumsmechanik zur Beschreibung von dichten Partikelsystemen aufgrund von un stetigen oder nur schwer beschreibbaren Randbedingungen an ihre Grenzen stößt. Beispiele aus dem Bereich der Schüttgutförderung sind der Transport von Schüttgut an Übergabestellen zwischen Fördergeräten, in Schneckenförderern und die Abbildung von Sieb- oder Mahlprozessen.

Viele der gängigen DEM-Codes setzen auf Kugeln als Grundkörper, da sich so die Kontaktfindung zwischen zwei Partikeln numerisch sehr einfach umsetzen lässt und nur wenig Berechnungsleistung beansprucht wird. Zur geometrischen Modellierung von nicht-sphärischen Partikeln werden mehrere Kugeln zu einem Starrkörper verbunden. Auf diese Weise lassen sich beliebige geometrische Partikelformen abbilden. Das entsprechende Vorgehen wird im Allgemeinen als *multi-sphere*-Modellierung bezeichnet und die dabei entstandenen Starrkörper *clumps* genannt.

Die Bewegung eines jeden einzelnen Partikels mit Masse m_i und Geschwindigkeit v_i mit der Zeit, t , wird durch das zweite Newton'sche Gesetz beschrieben. Dabei besteht die insgesamt auf einen Partikel, i , wirkende Kraft im einfachsten Fall aus der Summe der Schwerkraft, F_{Gi} , und der Kontaktkraft F_{Ci} (vgl. Gleichung 3-1). Je nach Art der Simulation können auch noch weitere Kräfte, z. B. Kräfte aus Flüssigkeitsreibung, elektromagnetische Kräfte oder Kräfte aus Kohäsion, hinzukommen. Die Rotationsbewegung bzw. Winkelgeschwindigkeit, ω_i , der Partikel ergibt sich analog zu Gleichung 3-1 aus dem Trägheitsmoment, I_i , sowie der Summe der extern angreifenden Drehmomente, T_i , nach Gleichung 3-2. [Guo-2010, S. 38 ff.] Wegen der großen Anzahl an Kollisionen zwischen Partikeln werden die Bewegungsgleichungen

3.2 Ansätze zur Kalibrierung

zumeist mit numerisch expliziten Verfahren integriert.

$$m_i \cdot \frac{dv_i}{dt} = F_{Ci} + F_{Gi} \quad (3-1)$$

$$I_i \cdot \frac{d\omega_i}{dt} = T_i \quad (3-2)$$

Das Herz von Diskrete-Elemente-Modellen ist die Formulierung und Implementierung des Kontaktmodells. Am häufigsten wird das sogenannte *Hertz-Mindlin*-Kontaktmodell [Her-1882; Min-1953] eingesetzt. Das Hertz-Mindlin-Kontaktmodell ist nichtlinear und besteht aus je einer tangentialen und normalen Steifigkeits- und Dämpfungskomponente zwischen zwei Partikeln, wie in Abbildung 3-1 dargestellt. Die Kontaktkräfte ergeben sich aus der normalen

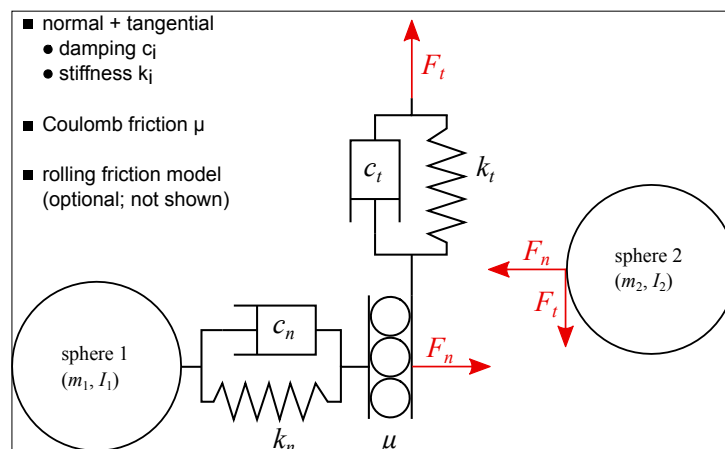


Abbildung 3-1: Schematische Darstellung des Hertz-Mindlin-Kontaktmodells (aus [Rac-2016f]).

bzw. tangentialen Kraftkomponente, F_n bzw. F_t , von zwei sich berührenden Partikeln. Zur Berechnung der tangentialen Kraftkomponente wird der Coulomb'sche Reibungskoeffizient herangezogen. Zusätzlich kann das Kontaktmodell je nach eingesetztem DEM-Code noch um Rollreibungs- oder Kohäsionsmodelle erweitert werden.

3.2 Ansätze zur Kalibrierung

Das Vorgehen beim Kalibrieren von DEM-Schüttgutmodellen ist bislang nur wenig erforscht. Obwohl vielen Forschern und Ingenieuren das Kernproblem bekannt ist, befasst sich nur ein relativ kleiner Teil der existierenden Veröffentlichungen explizit mit dem Kalibrierungsprozess [Coe-2017]. Die diesbezügliche Forschungsarbeit wird von Marigo und Stitt als „unattraktiv und doch von entscheidender Bedeutung“ beschrieben¹ [Mar-2015].

3.2.1 Hintergrund zur Notwendigkeit der Kalibrierung

Obwohl moderne DEM-Codes parallelisiert sind und über effiziente Algorithmen zur Kontaktfindung verfügen [Ber-2015], gibt es zwei große Einschränkungen bei der Simulation von

¹ „... to encourage further work in this unattractive but yet absolutely vital area.“

Schüttgütern mit DEM-Modellen. Bei der ersten Einschränkung handelt es sich um die maximale Anzahl an Partikeln, die gleichzeitig simuliert werden können. Während DEM-Modelle von Vorrichtungen im Labormaßstab unter Umständen noch mit einer realen Partikelgrößenverteilung modelliert werden können, ist dies für Anlagen im Industriemaßstab nicht möglich. Unter Berücksichtigung der realen Partikelgrößenverteilung müssten zur DEM-Modellierung von einigen hundert Gramm Pulver bereits mehrere Millionen Partikel eingesetzt werden, wobei für jeden einzelnen Partikel die Bewegungsgleichungen gelöst und Kontaktkräfte aus dem Zusammenspiel mit anderen Partikeln berechnet werden müssen. Trotz der stetigen Zunahme von verfügbarer Berechnungsleistung würde ein solches Modell zu sehr langen Berechnungszeiten führen. Diese Beschränkung bezieht sich somit auf die geometrische Größenskala von DEM-Modellen.

Die zweite Einschränkung betrifft die Zeitskala von DEM-Modellen. Bei allen gängigen DEM-Codes erfolgt die Lösung der Bewegungsgleichungen durch ein numerisch explizites Integrationsschema. Um numerische Stabilität zu gewährleisten, darf die Simulationszeitschrittgröße nicht zu groß gewählt werden. Um die maximale Simulationszeitschrittgröße zu bestimmen wird üblicherweise der sogenannte *Rayleigh*-Zeitschritt, dt , herangezogen. Er ist gleich der Zeit, die eine Stoßwelle benötigt, um eine Kugel zu durchdringen, und wird nach Gleichung 3-3 berechnet. Darin ist r der Radius des kleinsten Partikels in der Simulation, ρ_P die Partikeldichte, G der Schubmodul und ν die Querkontraktionszahl.

$$dt = \pi \cdot r \cdot \frac{\sqrt{\frac{\rho_P}{G}}}{0.1631 \cdot \nu + 0.8766} \quad (3-3)$$

Da der *Rayleigh*-Zeitschritt eine theoretische Größe ist, wird der Simulationszeitschritt als Anteil des *Rayleigh*-Zeitschritts angegeben. Übliche Werte für Simulationszeitschritte sind $0.2 \dots 0.4 \cdot dt$. Je länger die Dauer des mittels DEM abzubildenden Prozesses ist, desto mehr Zeitschritte sind zu berechnen. Zwar geht eine Veränderung der zu simulierenden Prozessdauer nur linear in die Anzahl der zu berechnenden Zeitschritte ein, jedoch liegen übliche Simulationszeitschritte im Bereich von Nano- bis Millisekunden, sodass für praktische Anwendungen mindestens mehrere zehn- bis hunderttausend Zeitschritte berechnet werden müssen, wobei zu jedem Zeitschritt die Bewegungsgleichungen von allen im Modell befindlichen Partikeln gelöst werden müssen. Bei der Festlegung des Simulationszeitschritts ist zudem zu beachten, dass der *Rayleigh*-Zeitschritt sowohl von einer geometrischen Größe (kleinster Partikelradius) als auch von drei Materialparametern abhängt. Wird eine der in Gleichung 3-3 enthaltenen Größen verändert, so ändert sich auch der Wert des *Rayleigh*-Zeitschritts.

Berücksichtigt man die beiden oben genannten Einschränkungen, so würden sich für die Simulation von industrienahen Prozessen selbst auf leistungsfähigen Computern oder Berechnungsclustern Berechnungszeiten von mehreren Wochen oder Monaten ergeben. Da solch lange Berechnungszeiten keinen praktischen Maßstäben entsprechen, wurden verschiedene Ansätze entwickelt, um Berechnungszeit einzusparen. Vornehmlich lassen sich diese auf zwei Grundideen zurückführen: Erstens die Reduzierung der Partikelanzahl und zweitens die Vergrößerung des *Rayleigh*-Zeitschritts. So kann für bestimmte Anwendungen beispielsweise der Schubmodul künstlich verringert werden (vgl. Gleichung 3-3) [Bie-2009; Lom-2014]. Eine zweite Strategie, welche beide Ziele anspricht, ist es die Partikelgrößenverteilung hochzuskalieren oder zumindest den Feinanteil des Schüttguts durch größere Partikel zu ersetzen [Cur-2009]. Bei dieser, in der Literatur unter anderem als *coarse-graining*

3.2 Ansätze zur Kalibrierung

[Sak-2014; Nas-2015] bekannten, Strategie werden viele kleine Einzelpartikel durch wenige große Partikel ersetzt. Eine weitere Vorgehensweise umfasst die Modellierung von komplexen Partikelformen (z. B. quaderförmig) durch einfachere Geometrien, wie zum Beispiel Kugeln. Bei diesem Ansatz wird die unrunde Partikelform durch künstliche Anhebung der Rollreibung modelliert [Wen-2012]. Die Berechnungszeit verringert sich durch die einfachere Kontaktfindung zwischen Kugeln.

Der gemeinsame Nachteil aller genannten Ansätze ist, dass physikalische und geometrische Parameter zugunsten kürzerer Berechnungszeiten verändert werden und somit die physikalische Bedeutung der Parameter im DEM-Modell verfälscht wird. Um trotz dieser Verfälschung quantitativ aussagekräftige Simulationsergebnisse zu erhalten, müssen die Material- und Kontaktparameter regressiv bestimmt werden. Beispielsweise werden einfache (Schüttgut-) Materialtests mittels der DEM modelliert, berechnet und deren Ergebnisse mit denen aus physikalischen Messungen verglichen, die in diesem Fall als Zielgrößen anzusehen sind [Gri-2010; Mar-2015]. Die DEM-Material- und Kontaktmodell-Parameter werden sodann so lange variiert, bis die Simulationsergebnisse mit den Messdaten übereinstimmen. Dieser Vorgang wird im Bereich der DEM-Simulation als *Kalibrierung* bezeichnet. Der Vorgang ist nicht auf einfache Materialtests beschränkt, sondern wird auch für Prozesssimulationen angewandt, um ausgehend von diesem Fixpunkt die Einflüsse von Prozessparametern oder konstruktiven Änderungen an der jeweiligen Anlage zu untersuchen. Der Zeitbedarf bis zum Abschluss der Kalibrierung wird maßgeblich von der Anzahl der dafür benötigten DEM-Berechnungsläufe bestimmt.

Beim Einsatz von *coarse-grained*-DEM-Modellen und dem gleichzeitigen Versuch die Simulationszeitschrittgröße anzuheben ist davon auszugehen, dass mindestens fünf DEM-Materialmodell-Parameter kalibriert werden müssen. Bei diesen Parametern handelt es sich um die Partikeldichte, die Coulomb'schen Reibungskoeffizienten zwischen Schüttgut und Schüttgut sowie Schüttgut und Wand, als auch die Rollreibungskoeffizienten zwischen Schüttgut/Schüttgut und Schüttgut/Wand [Bha-2010]. Die Anzahl der zu kalibrierenden Parameter steigt an, wenn weitere mechanische Aspekte, wie z. B. das Zerbrechen von Partikeln oder Kohäsion/Adhäsion modelliert werden sollen. Je nach Kalibrierungsaufgabe werden als Zielgrößen mindestens zwei bis drei Schüttgutcharakteristika vorgegeben. Gängige Charakteristika sind die Schüttdichte, der Böschungs- bzw. Schüttwinkel oder Daten aus Scherversuchen. Die Anzahl der Zielgrößen unterliegt dabei keiner theoretischen Grenze, ist praktisch jedoch durch die Anzahl der vorhandenen Messdaten sowie die Fähigkeit des DEM-Anwenders, den Überblick zu behalten, beschränkt. Bei der Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern müssen somit stets mehrere Modellparameter so eingestellt werden, dass die Abweichung zwischen mehreren gemessenen und simulierten Charakteristika (Zielgrößen) maximal gleich der Streuung der Messwerte ist.

3.2.2 Ansätze zur Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern

Beim Kalibrieren von DEM-Material- bzw. Kontaktmodell-Parametern lassen sich drei verschiedene Herangehensweisen identifizieren. Diese sind das unstrukturierte, strukturierte und das methodische Vorgehen.

Bei der unstrukturierten Kalibrierung versucht der Anwender *ad hoc* einen Parametersatz zu finden, mit dem sich die Messdaten in der DEM-Simulation reproduzieren lassen. Je

nach Erfahrung des Anwenders sind dafür mehr oder weniger Berechnungsläufe nötig. In jedem Fall aber obliegt es ausschließlich dem Anwender, den Überblick über bereits getestete, erfolglose und erfolgversprechende Parametersätze zu behalten. Zudem muss er die Zusammenhänge zwischen Parameteränderungen und deren Effekten auf die Zielgrößen verstehen und dabei auch auf Wechselwirkungen zwischen Parametern achten. Die unstrukturierte Vorgehensweise ist somit für Kalibrierungsprobleme mit mehreren DEM-Modellen bzw. Zielgrößen sehr ineffizient, da es selbst für erfahrene DEM-Anwender schwierig ist, den Einfluss von mehreren Parametern auf mehrere Zielgrößen richtig zu quantifizieren. Nichtsdestotrotz ist diese Art der Kalibrierung das wohl am weitesten verbreitete Vorgehen [Coe-2009; Gri-2009a; Wan-2010; Gri-2011; Gon-2011; Gon-2012; Suh-2016].

Beim strukturierten Vorgehen werden die Effekte von verschiedenen Material- und Kontaktparametern vor der eigentlichen Kalibrierung durch Parameterstudien untersucht (z. B. [Fak-2007; Fra-2013]). Für jeden zu untersuchenden Parameter wird ein Parameterbereich definiert und mehrere Zwischenwerte (Stufen) festgelegt. Die DEM-Modelle werden für jeden Stufenwert berechnet und der Wert der Zielgröße notiert. Durch dieses systematische Vorgehen lassen sich die Verläufe der Zielgrößen über den jeweiligen Parametern zum Beispiel grafisch darstellen. Der Anwender erhält einen Überblick über die Auswirkungen einzelner Parameter und kann gezielt vielversprechende Parameterkombinationen für die Kalibrierung auswählen. Dieser vielversprechende Startwert für die Kalibrierung wird jedoch mit einer hohen Anzahl an DEM-Berechnungsläufen erkauft. Sollen beispielsweise 3 Parameter auf jeweils 5 Stufen untersucht werden, so sind dazu unter Vernachlässigung von Parameter-Wechselwirkungen 3·5 (= 15) DEM-Berechnungsläufe nötig. Die Auswahl eines Startpunkts für die Kalibrierung wird dabei jedoch verfälscht, da die entsprechenden Parameter unabhängig voneinander untersucht wurden. Sollen zusätzlich alle Wechselwirkungen erfasst werden, um die Güte des Startpunkts für die Kalibrierung im Rahmen dieses Ansatzes zu maximieren, steigt die Anzahl der benötigten Berechnungen auf 5^3 (= 125).

Da der Übergang vom strukturierten zum methodischen Vorgehen als fließend anzusehen ist, wird im Folgenden der explizite Einsatz von Methoden der statistischen Versuchsplanung als Voraussetzung für methodisches Vorgehen definiert. Zum methodischen Vorgehen existieren zum Stand November 2016 nur sehr wenige Vorarbeiten. In der Literatur werden teilfaktorielle bzw. Screening-Versuchspläne [Cur-2009; Joh-2010; Fav-2010], orthogonale Felder bzw. Taguchi-Pläne [Han-2011] oder Plackett-Burman-Pläne [Yoo-2007] eingesetzt. In einigen der Studien werden die so erzeugten Daten zur Parametrierung von Regressionsmodellen [Yoo-2007; Fav-2010; Joh-2010] verwendet, um die gesuchten DEM-Parameter im Anschluss mittels Optimierung iterativ zu bestimmen. Allen diesen Vorarbeiten ist gemein, dass sie zwar grobe Schemata zur Kalibrierung aufzeigen, diese jedoch sehr spezifisch auf ein konkretes Problem zugeschnitten sind oder die Kalibrierung nur als Nebenaspekt betrachten.

3.2.3 Gegenüberstellung der Kalibrierungsansätze

Zwei Hauptaspekte zur Anwendung der in Unterabschnitt 3.2.2 genannten Vorgehensweisen verhalten sich gegenläufig. So ist das unstrukturierte bzw. strukturierte Vorgehen sehr einfach bis einfach anwendbar, setzt jedoch die höchsten Ansprüche an die Kalibrierungsfähigkeiten des DEM-Anwenders voraus. Im Gegensatz dazu werden beim methodischen Vorgehen tiefgehende Kenntnisse in den Bereichen der statistischen Versuchsplanung,

3.3 Anforderungen an ein methodisches Kalibrierungsverfahren

Regressionsmodell-Bildung sowie Optimierung benötigt. Eben diese Methoden können den DEM-Anwender aber beim Kalibrieren merklich entlasten und, basierend auf einem überschaubaren DEM-Berechnungsaufwand, vielversprechende und sinnvolle Parameterkombinationen aufzeigen, ohne dass der Anwender jeden einzelnen Effekt einer Parameteränderung beobachten muss. Wegen der hohen Anforderungen der methodischen Vorgehensweise und der nur sporadisch verfügbaren, sehr speziellen, darauf aufbauenden Kalibrierungsansätze haben sich diese bislang nicht durchgesetzt und werden weder in der industriellen noch in der wissenschaftlichen Anwendung verwendet. Die beiden einfacheren Vorgehensweisen werden von DEM-Anwendern aufgrund von fehlenden Kenntnissen in den o. g. Bereichen oder des geringeren Vorbereitungsaufwands bevorzugt [Suh-2016].

Neben Erfahrung wird vom DEM-Anwender bei der unstrukturierten Vorgehensweise vor allem Übersicht verlangt. Falls Wechselwirkungen auftreten, kann es vorkommen, dass die Änderung eines Parameters mehrere Zielgrößen beeinflusst. Dadurch kann der Kalibrierungsvorgang im Allgemeinen nicht seriell (eine Zielgröße nach der anderen) durchgeführt werden, sondern muss parallel (mehrere Zielgrößen gleichzeitig) erfolgen [Coe-2010]. Des Weiteren ist der Anwender stets bestrebt die Anzahl der zu kalibrierenden Parameter so gering wie möglich zu halten, was sich in der Praxis durch physikalisch fragwürdige Annahmen für die Korrelationen zwischen DEM-Parametern, beispielsweise dem Gleichsetzen von Reibungskoeffizienten, zeigen kann [Rac-2017b].

Ein neuer Ansatz zur Kalibrierung wurde 2016 von Benevenuti et al. [Ben-2016] präsentiert. Die Autoren verwenden ein künstliches neuronales Netzwerk zur Parameteridentifizierung. Dieser Ansatz war erfolgreich, benötigte jedoch über 600 DEM-Berechnungsläufe, da neuronale Netzwerke trainiert werden müssen. Ähnliche Probleme sind bei Kalibrierungsansätzen zu erwarten, die auf die direkte Optimierung der DEM-Modellparameter abzielen. Bis zur Bestimmung eines passenden DEM-Materialmodell-Parametersatzes müssen die zu kalibrierenden DEM-Modelle mehrere hundert mal mit verschiedenen Parametersets berechnet werden [Asa-2007].

3.3 Anforderungen an ein methodisches Kalibrierungsverfahren

Im Rahmen dieses Projekts wurden drei grundlegende Anforderungen an ein Kalibrierungsverfahren gestellt. Die erste Anforderung beinhaltet, dass das Verfahren in der Lage sein muss, mit jeweils mehreren DEM-Parametern und DEM-Simulationsergebnissen umzugehen. Die DEM-Simulationsergebnisse können dabei von verschiedenen DEM-Modellen stammen und sind nicht auf ein Ergebnis pro DEM-Modell beschränkt.

Die zweite Anforderung betrifft die Erweiterbarkeit und Skalierbarkeit des Verfahrens. Im Bereich der Schüttgutförderertechnik existieren kaum Normen oder Richtlinien dafür, welche Schüttgutcharakteristika als Standardwerte gemessen werden sollen. Schüttdichte und Schüttwinkel werden zum Beispiel bei der Auslegung von Silos oder Gurtförderern benötigt und in der Praxis stets angegeben, jedoch ist dies vor allem auf den geringen Konstruktionsaufwand für entsprechende Messvorrichtungen und den geringen Aufwand für die Messungen selbst zurück zu führen. Des Weiteren werden die Messungen von bestimmten Schüttguttests nicht immer mit den selben Randbedingungen durchgeführt. Die Messung des inneren Reibungskoeffizienten mittels eines Schertests kann z. B. mit einer

einfachen Scherzelle oder einer Ringscherzelle durchgeführt werden und erfolgt unter wechselnden Normalspannungen. Für das Kalibrierungsverfahren wurde deshalb gefordert, dass es modular erweiterbar sein muss, um große Flexibilität bezüglich der implementierbaren DEM-Modelle zu gewährleisten.

Als Drittes wurde die Forderung nach der praktischen Anwendbarkeit gestellt. Wie in Unterabschnitt 3.2.3 beschrieben, wird die breite Anwendung von methodischen Kalibrierungsverfahren nicht nur durch ihre fehlende Reife, sondern auch durch ihre Komplexität auf einen sehr kleinen Anwenderkreis beschränkt. Um einem breiten Benutzerkreis die Vorteile eines methodischen Verfahrens zugänglich zu machen, ist es notwendig, möglichst alle der Vorgänge, d. h. die Versuchsplanung, die Regressionsmodell-Auswahl, und die numerische Optimierung, universell zu gestalten und zu automatisieren. Besonders die Regressionsmodell-Auswahl ist ein kritischer Punkt, da mittels dieser beliebige unbekannte Funktionsverläufe angenähert werden müssen, welche aus der jeweiligen Auswahl an implementierten DEM-Modellen resultieren.

3.3 Anforderungen an ein methodisches Kalibrierungsverfahren

4 Entwicklung und Umsetzung eines methodischen Kalibrierungsverfahrens für DEM-Materialmodell-Parameter

Das in diesem Kapitel beschriebene Kalibrierungsverfahren wurde im Rahmen von mehreren wissenschaftliche Veröffentlichungen beschrieben und verifiziert. Der Ansatz des Verfahrens stützt sich auf Methoden aus der statistischen Versuchsplanung, Regressionsmodell-Techniken sowie der numerischen Optimierung. Die Terminologie dieses Kapitels folgt den in der statistischen Versuchsplanung üblichen Konventionen [Dea-2015]. Die in diesem Kapitel beschriebenen Studien sowie deren Ergebnisse und Erkenntnisse wurden zum Großteil vorherveröffentlicht [Rac-2016d; Rac-2016e; Rac-2017c; Rac-2017b]).

4.1 Ansatz

Das Vorgehen bei der Kalibrierung unterteilt sich in die drei folgenden Teilaufgaben, von denen bereits jede für sich allein anspruchsvolle Anforderungen an den Anwender stellt. Abbildung 4-1 stellt den Ablauf des im folgenden beschriebenen Verfahrens schematisch dar.

- 1. Berechnen der Systemantwort für jedes DEM-Modell** durch Ziehen von Parameterkombinationen aus einem durch den Anwender definierten Faktorraum von DEM-Parametern. Dabei entspricht ein Faktor einem quantitativen, zu kalibrierenden (Material-)Parameter aus der DEM.
- 2. Parametrierung eines Regressionsmodells für jede Zielgröße**, um auf deren Basis einen optimierten Parametersatz bestimmen zu können, für den die Zielgrößen der DEM-Simulationen mit den jeweiligen Messdaten überein stimmen (1. Optimierungsdurchgang).
- 3. Optimierungsvorgang auf Basis der DEM-Modelle**, und mit dem Parametersatz aus Schritt 2 als Startwert, um die Lösung aus Schritt 2 zu validieren sowie ggf. Unterschiede zwischen Regressions- und DEM-Modell auszugleichen (2. Optimierungsdurchgang).

Vor dem Beginn des Kalibrierungsvorgangs müssen verschiedene Aspekte der Aufgabe durch einen DEM-Anwender festgelegt werden. Abgesehen von experimentellen Daten betrifft dies auch die zur Kalibrierung einzusetzenden DEM-Parameter, welche als quantitative Faktoren definiert werden müssen. Je nach Art der Messdaten ist der Einfluss von bestimmten DEM-Parametern besser oder schlechter absehbar. Beispielsweise ist der Effekt der Partikeldichte auf die Schüttdichte sehr einfach abzuschätzen, wohingegen der Effekt der Wechselwirkung von Rollreibung und Kohäsionsenergiedichte auf die Güte eines Mischvorgangs ohne Parameterstudie kaum quantifiziert werden kann.

4.1 Ansatz

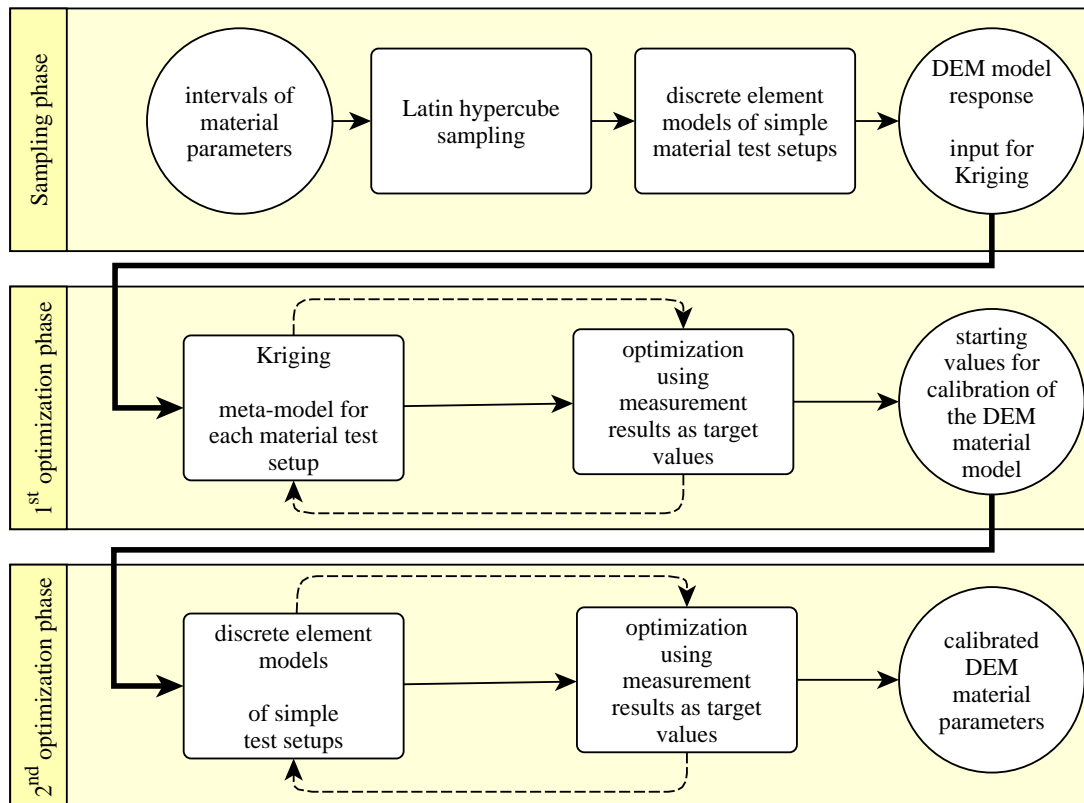


Abbildung 4-1: Ablaufschema des Kalibrierungsverfahrens (Abbildung aus [Rac-2017b]).

Die Auswahl der Faktoren und physikalisch sinnvoller Ober- und Untergrenzen obliegt dem Anwender. Ist sich dieser bei der Auswahl nicht sicher, ob ein bestimmter DEM-Modellparameter signifikante Effekte auf die Zielgrößen hat, kann dieser ohne zusätzlichen Aufwand für den Benutzer in die Formulierung des Kalibrierungsproblems aufgenommen werden. Ähnliches gilt für die Ober- und Untergrenzen der Faktoren. Größere Unsicherheit bei einer Grenze kann durch die Verbreiterung des Faktorintervalls in die entsprechende Richtung berücksichtigt werden. Durch das Einbeziehen von zusätzlichen Einflussgrößen steigt die Komplexität des Kalibrierungsproblems, jedoch kann dies abhängig von der Anzahl und vor allem der Art der angestrebten Zielgrößen erforderlich sein. Die Einbeziehung von mehr Parametern kann dazu dienen, um die quantitative Differenz zwischen Messdaten und Zielgrößen verringern oder weitere physikalische Effekte, wie z. B. Kohäsion, abzubilden und mit Messdaten abzugleichen. Die beim (un-)strukturierten Vorgehen vorliegende Begrenzung auf nur wenige Faktoren und Zielgrößen wird damit vollständig aufgehoben.

Da klassische Parameterstudien nach dem Schema „ein Faktor nach dem anderen“, d. h. vollfaktorielle Versuchspläne, eine gewaltige Anzahl an Versuchsdurchgängen benötigen (vgl. Unterabschnitt 3.2.2) und deshalb sehr ineffizient sind, werden die durchzuführenden Versuchsläufe im Rahmen des Vorgehens mittels dieses Kalibrierungsverfahrens durch eine andere Methode gezielt bestimmt. Da die für die Faktoren gewählten Ober- und Untergrenzen stets ein Intervall von reellen Zahlen begrenzen, kann zur effizienten Beprobung des Faktorintervallraums auf Versuchspläne zurückgegriffen werden, die nicht an feste Faktorstufen gebunden sind. Um für die Parametrierung von Regressionsmodellen mittels einer geringen Anzahl an DEM-Berechnungsdurchgängen eine maximale Informationsmen-

ge zu gewinnen kann somit auf verschiedene Konstruktionsvorschriften für gleichverteilte Versuchspläne zurückgegriffen werden. Für das hier beschriebene Kalibrierungsverfahren wurde *Latin hypercube sampling* (LHS) in Kombination mit MAXIMIN-Kriterium [San-2003, S. 138 ff.] ausgewählt. Nachdem die zu beprobenden Punkte durch LHS bestimmt wurden, werden die entsprechenden Parameterkombinationen in die DEM-Modelle übertragen und die Berechnungen gestartet. Nach dem Ende der DEM-Berechnungen werden die Simulationsergebnisse analog zum Vorgehen aus dem jeweiligen Experiment ausgewertet. Zusammen mit den erzeugenden Parameterkombinationen bilden diese Ergebnisse im nächsten Schritt die Datenbasis zur Parametrierung von Regressionsmodellen.

Wegen der Vielfalt an möglichen DEM-Modellen und mess- bzw. auswertbaren Zielgrößen kommen starre Grundgleichungen, wie z. B. bei generalisierten linearen Modellen, nicht in Frage. Die grundlegenden funktionalen Zusammenhänge zwischen den Einflussparametern und den Zielgrößen müssen als unbekannt vorausgesetzt werden, um der allgemeinen Anwendbarkeit dieses Kalibrierungsverfahrens gerecht zu werden. Zur Metamodellierung der DEM-Modelle wurde in dieser Arbeit *Kriging* eingesetzt.

Kriging wurde von Krige [Kri-1951] eingeführt, später von Matheron [Mat-1963] verallgemeinert und kann auf verschiedene Arten umgesetzt werden [Web-2007, S. 154]. Die für das hier beschriebene Verfahren eingesetzte Kriging-Methode wird als *universelles Kriging* oder *Kriging mit Trend* bezeichnet. Wie jedes Regressionsverfahren zielt auch Kriging darauf ab, den Wert einer Zielgröße, basierend auf den Daten von Probenpunkten, an unbeprobten Punkten möglichst genau zu schätzen. Beim universellen Kriging wird dabei angenommen, dass sich der Wert einer Zielgröße, $Z(x_s)$, aus einem systematischen Anteil, $S(x_s)$, und einem stochastischen Anteil, $R(x_s)$, zusammensetzt (vgl. Gleichung 4-1) [Web-2007, S. 195 ff.]. Als Trendfunktionen, f_i , werden beim universellen Kriging lineare Ansätze mit einer bestimmten Anzahl, K , an Koeffizienten gewählt, sodass Gleichung 4-1 in Gleichung 4-2 umgeschrieben werden kann. Die Parameter β_i sowie die Ausprägung des statistischen Anteils, $R(x_s)$, werden je nach Implementierung der Kriging-Methode mittels unterschiedlicher, statistisch motivierter Verfahren bestimmt.

$$Z(x_s) = S(x_s) + R(x_s) \quad (4-1)$$

$$Z(x_s) = \sum_{i=1}^K \beta_i f_i(x_s) + R(x_s) \quad (4-2)$$

Mittels der Metamodellierung kann die Kalibrierung in ein numerisches Optimierungsproblem überführt werden. Der Vorteil der Metamodelle ist hierbei, dass Werte für die Zielgrößen sehr viel schneller berechnet werden können als mit den DEM-Modellen. Die Berechnungszeit zum Finden eines Optimums beträgt nur wenige Sekunden und ist somit deutlich schneller als der mehrmalige Aufruf von DEM-Modellen, deren Berechnungsdauer im Bereich von 15 Minuten bis hin zu einer zweistelligen Anzahl an Stunden liegen kann. Nach der Optimierung auf Basis der Metamodelle wird der optimale Parametersatz als Startwert für einen zweiten Optimierungsdurchgang gesetzt. Im zweiten Durchgang werden die Werte für die Zielgrößen jedoch mittels der DEM-Modelle berechnet. Dieser zusätzliche Schritt ist nötig, um den in den Metamodellen gefundenen Parametersatz zu verifizieren und gegebenenfalls noch kleine Abweichungen zwischen den Metamodell- und DEM-Modellergebnissen zu korrigieren. Der Startwert aus dem ersten Optimierungsdurchgang liegt erwartungsgemäß sehr nahe am Optimum der DEM-Modelle, sodass diese nur wenige Male ausgeführt werden müssen.

4.2 Implementierung des Kalibrierungsverfahrens

Die Implementierung des Kalibrierungsverfahrens erfolgte ausschließlich auf Basis von frei verfügbarer Software. Dieser Ansatz wurde gewählt, um der in Abschnitt 3.3 genannten Anforderung bezüglich der praktischen Anwendbarkeit nachzukommen. Da DEM-Berechnungsprogramme in der Industrie noch nicht weit verbreitet sind, bietet freie Software einen kostengünstigen Einstieg, da für sie keine Lizenzkosten anfallen.

Als DEM-Software wurde LIGGGHTS [Klo-2012] ausgewählt. LIGGGHTS ist einer der am meisten eingesetzten freien DEM-Codes und wird aktiv weiterentwickelt. Die zuletzt im Rahmen dieses Projekts eingesetzte Programmversion war 3.4.1. Da es sich bei LIGGGHTS um ein UNIX-Programm handelt, wurde beim Betriebssystem auf LINUX Ubuntu gesetzt. Für die Ablaufsteuerung und Datenauswertung des Kalibrierungsverfahrens kamen alle gängigen Programmiersprachen in Frage. Da sich das Verfahren jedoch vornehmlich an einen Personenkreis aus dem Ingenieurwesen richtet, wurde mit GNU Octave [Eat-2015] auf eine frei verfügbare Software mit starker Ähnlichkeit zu MATLAB [MAT-2016] gesetzt. Zudem sind alle der drei hier genannten Codes *open-source*, d. h. der Quellcode der Programme steht jedermann zur Ansicht und gegebenenfalls Veränderung frei zur Verfügung.

Für die Umsetzung von LHS und Kriging wurde das GNU Octave-Paket *stk* [Bec-2014] eingesetzt. Dort ist Kriging basierend auf einem Kovarianz-Ansatz implementiert. Die Schätzung der Regressionsparameter und Gewichte erfolgt in *stk*-Paket mittels der *restricted likelihood*-Methode [Ste-1999, S. 170], basierend auf einer Matérn-Kovarianzmatrix [Ste-1999, S. 12-14] für den stochastischen Anteil in Gleichung 4-2. Zusätzlich erlaubt das Paket die Schätzung von (numerischer) Streuung. Diese Option wurde genutzt, um die Genauigkeit der Schätzwerte zu verbessern. Daraus folgend verändert sich die Eigenschaft des Kriging-Verfahrens von interpolierend zu approximierend [Kle-2008, S. 156].

Aufgrund dessen, dass die Größe des Simulationszeitschritts direkt proportional zum Rayleigh-Zeitschritt ist, führt jede Veränderung der kleinsten Partikelgröße, der Querkontraktionszahl, der Partikeldichte sowie des Schubmoduls zu einer Veränderung dieser kritischen Zeitschrittgröße (vgl. Unterabschnitt 3.2.1). Im Gegensatz zu allen bisher vorgeschlagenen Vorgehensweisen zum Kalibrieren wird beim hier beschriebenen Verfahren explizit auf die Identifikation eines effizienten Parametersatzes geachtet. Es ist bekannt, dass die Zielgröße im Allgemeinen durch verschiedene Parameterkombinationen eingestellt werden können [Gri-2009b; Rac-2017c]. Unter Einbeziehung der Messstreuung ließen sich theoretisch unendlich viele Parametersätze finden, die als akzeptabel angesehen werden können. Es stellt sich also zwangsläufig die Frage, welcher dieser Parametersätze gewählt werden soll. Bei allen bestehenden Kalibrierungsansätzen für DEM-Materialmodellparameter zeigt sich die Situation, dass die Parameter zwar so eingestellt werden, dass sie physikalische oder prozesstechnische Zielgrößen abbilden, jedoch kaum darauf geachtet wird, dass es womöglich numerisch effizientere Parametersätze gäbe. Im hier implementierten Verfahren wird als zusätzliches Kriterium deshalb der Wert des *Rayleigh*-Zeitschritts herangezogen. Die entsprechende Zielgröße, t_i , für den *Rayleigh* ist in Gleichung 4-3, worin dt_r der erreichte *Rayleigh*-Zeitschritt und r_{max} bzw. r_{min} der größt- bzw. kleinstmögliche *Rayleigh*-Zeitschritt sind. Alle Zeitschrittgrößen werden mittels Gleichung 3-3 berechnet, wobei der maximal und minimal erreichbare Wert von den Parameterintervallgrenzen abhängt. Die Kostenfunktion nimmt zwischen diesen Extrema linear zu bzw. ab und kann jeden Wert von 0 bis 1

annehmen.

$$t_i = \frac{r_{max} - dt_r}{r_{max} - r_{min}} \quad (4-3)$$

4.3 Verifizierung

Die Verifizierung des neuartigen Kalibrierungsverfahrens erfolgte in mehreren Zwischenschritten. Im ersten Schritt wurden einzelne Aspekte des Verfahrens auf ihre Umsetzbarkeit hin untersucht. Dies umfasste einfache Code- und Funktionstests sowie das Experimentieren mit verschiedenen Kriging-Ansätzen. Daraufhin folgte ein erster umfangreicher Funktionstest, bei dem das Verfahren selbstständig ablief und die Hauptfunktionalität, d. h. das Kalibrieren von DEM-Materialparametern, erfolgreich verifiziert werden konnte [Rac-2016d]. Zwei weitere Studien betrachteten die Robustheit des Verfahrens unter schwierigen Randbedingungen sowie – unter anderem – den Einfluss des Rayleigh-Zeitschritts auf die Kalibrierungsergebnisse [Rac-2017c; Rac-2017b].

Als zu kalibrierendes DEM-Modell wurde ein einfacher Materialtest zur Messung der Schüttdichte und des Schüttwinkels gewählt. Abbildung 4-2 zeigt schematisch den Aufbau, bestehend aus einem harten Untergrund und zylindrischem Behälter. Der nach oben und unten offene Behälter wird bis zu einer vorgegebenen Höhe mit Schüttgut befüllt, die Schüttdichte durch Verwiegung bestimmt und anschließend senkrecht nach oben gezogen. Durch den Verlust der seitlichen Abstützung fängt das Schüttgut an zu rutschen und formt unter dem Einfluss der Schwerkraft ein Haufwerk, aus dem der Schüttwinkel bestimmt wird. Als Schüttgut wurden Glasperlen ausgewählt, da deren Eigenschaften in der Literatur gut beschrieben sind und sich ihre Partikelform in erster Näherung sehr gut mittels Kugeln beschreiben lässt. Im Rahmen der automatischen Auswertung der DEM-Simulationsergebnisse wurde der Schüttwinkel mittels Bildverarbeitung gemessen (vgl. Abschnitt 6.1).

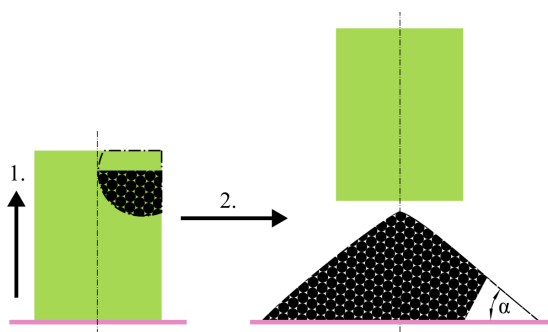


Abbildung 4-2: Schematischer Ablauf des Materialtests zur Messung von Schüttdichte und Schüttwinkel, α , (Abb. verändert aus [Rac-2017a]).

Um die Tauglichkeit des erdachten Kalibrierungsverfahrens zu testen, wurde zunächst überprüft, welchen Einfluss die anfänglichen Positionen der einzelnen Partikel (Zufallsgröße) und die Breite der Faktorintervalle auf das Verfahren haben. Die Faktorintervallbreite wurde ausgehend von einem Mittelwert bei $\pm 10\%$, $\pm 33\%$ und $\pm 66\%$ variiert, die anfängliche Partikelkonfiguration auf zwei qualitativen Stufen untersucht. Wie in Abbildung 4-3 und Abbildung 4-4 zu sehen, haben weder die Faktorintervallbreite, noch die zufällige initiale Partikelkonfiguration einen systematischen Einfluss auf die absoluten Differenzen zwischen angestrebter und kalibrierter Schüttdichte bzw. Schüttwinkel. In Abbildung 4-5 lässt sich

4.3 Verifizierung

erkennen, dass mit steigender Faktorintervallbreite die Anzahl der zur Kalibrierung benötigten DEM-Berechnungsläufe ansteigt. Dieses Verhalten lässt sich sehr gut dadurch erklären, dass bei einer konstanten Anzahl an Proben mit Vergrößerung des zu untersuchenden Raums die Beprobungsdichte abnimmt. Für die Metamodellierung bedeutet dies, dass sich der mittlere Abstand zwischen den Stützpunkten vergrößert und der Bereich zwischen den Stützpunkten mit einer größeren Varianz behaftet ist. Dem entsprechend unterliegen die aus den Metamodellen geschätzten Optima einer höheren Unsicherheit, was sich wiederum im Anstieg des Berechnungsaufwands für die Optimierung zeigt. Die Ergebnisse legen weiterhin offen, dass der hier beschriebene Kalibrierungsansatz Erfolg versprechend ist und die erzielten Abweichungen zwischen Messungen und Simulation innerhalb von akzeptablen Toleranzen lagen.

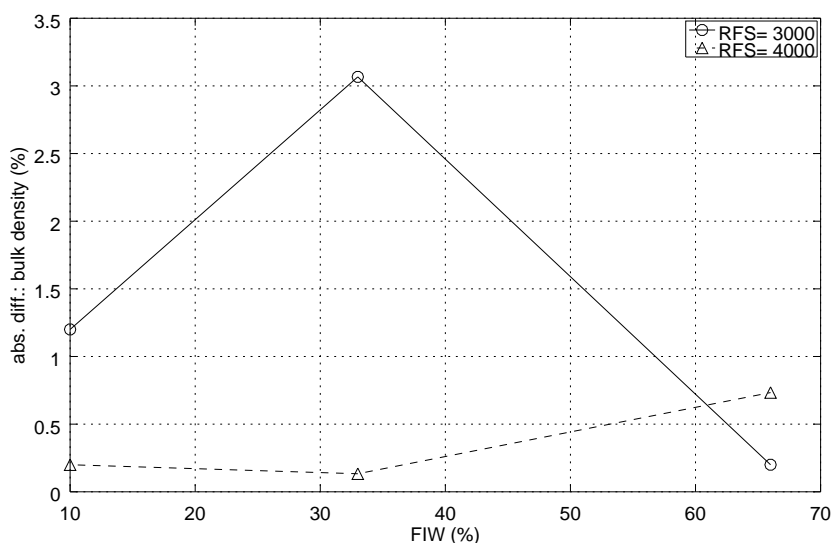


Abbildung 4-3: Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf den absoluten Fehler zwischen angestrebter und kalibrierter Schüttdichte (Abb. aus [Rac-2016a]).

Die Robustheit des Kalibrierungsansatzes wurde überprüft, indem verschiedene Szenarien bezüglich der Anzahl von LHS-Probenpunkten und Lage sowie Breite der Faktorintervalle zur Kalibrierung verwendet wurden. Zur Kalibrierung wurden die Partikeldichte und die interpartikuläre Rollreibung herangezogen. Zielgrößen waren Schüttdichte und Schüttwinkel. Um die Lage der kalibrierten Parametersätze abschätzen zu können, wurden die Schüttdichte und der Schüttwinkel für insgesamt 400 gleichmäßig über der Partikeldichte und Rollreibung verteilten regelmäßigen Gitter berechnet. Die so entstandenen Daten stellten die Referenzergebnisse dar, mittels denen der Erfolg oder Misserfolg eines einzelnen Kalibrierungslaufs bewertet werden konnte. Eine detailliertere Beschreibung dieser Studie ist in [Rac-2017c].

Die Referenzergebnisse für den Schüttwinkel und die Schüttdichte über Rollreibung und Partikeldichte sind in Abbildung 4-6a und Abbildung 4-6b grafisch dargestellt. Die gepunkteten Bereiche kennzeichnen Parametersets, für die die Zielwerte für Schüttwinkel und Schüttdichte mit einer Toleranz von $\pm 5\%$ getroffen wurden. Ziel der Kalibrierung ist es ein Parameterset zu finden, das beide Zielwerte möglichst genau aus der DEM-Berechnung zurückgibt. Im mathematischen Sinn entspricht dies der Schnittmenge aus den Parameter-

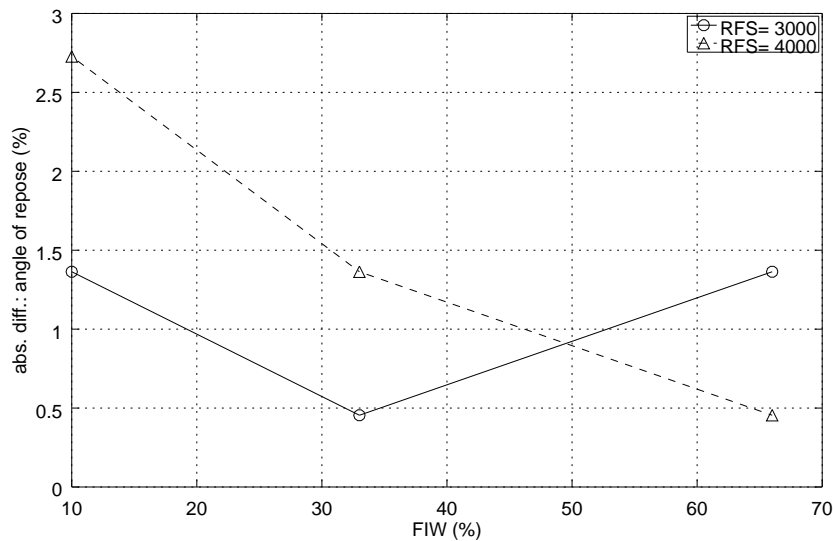


Abbildung 4-4: Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf den absoluten Fehler zwischen angestrebtem und kalibriertem Schüttwinkel (Abb. aus [Rac-2016a]).

setmengen aus Abbildung 4-6a und Abbildung 4-6b. Die entsprechende Schnittmenge ist in Abbildung 4-6c gekennzeichnet und stellt die im Rahmen der Robustheitsstudie gesuchten Parameterkombinationen dar, für die die Kalibrierung als erfolgreich gewertet werden kann.

Die Breite der Faktorintervalle wurde auf drei, die Lage des gesuchten Parametersets innerhalb der Faktorintervalle auf zwei Stufen untersucht, wovon eine als schlechtester und die andere als bester Fall angesehen werden kann. Die Faktorintervallbreite wurde zwischen 10, 33 und 66% variiert. Der Versuchsplan umfasste zudem noch zwei weitere Faktoren – den DEM *factory seed* sowie die Anzahl der LHS-Probepunkte – und bestand aus insgesamt 36 Durchgängen, von denen jeder dreimal wiederholt wurde. [Rac-2017c]

Von den insgesamt 108 gestarteten Kalibrierungsläufen führte die absolute Mehrzahl (85%) zu den erwarteten Parametersets. Ihre Lage ist durch die roten Punkten in Abbildung 4-6d gekennzeichnet. Bei den übrigen Parametersets konnten drei Untergruppen identifiziert werden. In Tabelle 4-1 ist eine Übersicht über diese Gruppen und ihre jeweiligen mittleren Kalibrierungsergebnisse und kalibrierte Werte für die Partikeldichte und den Rollreibungskoeffizient dargestellt. Die nähere Betrachtung der Parametersets, die nicht im erwarteten Bereich lagen, zeigte eine Gemeinsamkeit auf. Alle dieser Parametersets resultierten aus Kalibrierungsrandbedingungen, bei denen das Optimum am Rand der Parameterintervalle lag; genauer gesagt: an der jeweils unteren Intervallgrenze. Aus Tabelle 4-2 kann abgelesen werden, dass diese Sets tatsächlich eine – im Sinne der Optimierung – bessere Lösung darstellen. Dieses Verhalten ergibt sich aufgrund der Abhängigkeit des *Rayleigh*-Kriteriums von den oberen und unteren Parametergrenzen einiger Parameter (vgl. Gleichung 4-3 und Gleichung 3-3). Im hier vorliegenden Fall wurde der Kalibrierungsschwerpunkt durch die große Differenz zwischen oberem und unterem Grenzwert für die Partikeldichte unbewusst auf die Partikeldichte verschoben. Dass ein Kalibrierungslauf unbewusst mit ungeeigneten Randbedingungen gestartet wird lässt sich *a priori* nicht ausschließen, jedoch würden große Differenzen zwischen Simulationsergebnissen und Zielgrößen sofort nach Abschluss des

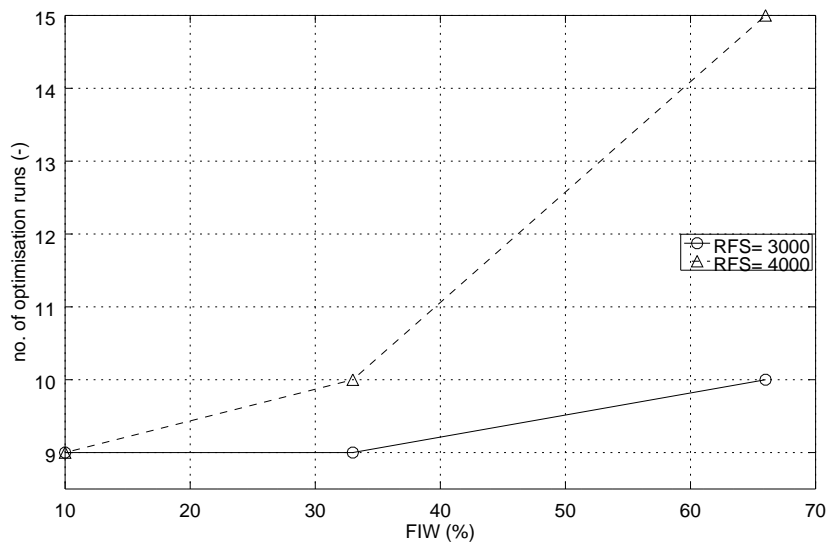


Abbildung 4-5: Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf die Anzahl der zur Kalibrierung benötigten DEM-Berechnungsläufe (Abb. aus [Rac-2016a]).

automatischen Kalibrierungsläufen auffallen, da das Endergebnis im Allgemeinen von einem Menschen geprüft wird. Um den Einfluss des *Rayleigh*-Zeitschritts zu dämpfen, wird empfohlen die entsprechende Kostenfunktion der Optimierung mit einem Vorfaktor von 0,5 zu gewichten.

Zusammenfassend konnte festgestellt werden, dass das Kalibrierungsverfahren robust gegenüber schlecht gewählten Randbedingungen ist, die abschließende Überprüfung des gefundenen Parametersets aber stets durch einen DEM-Anwender erfolgen sollte.

Tabelle 4-1: Mittelwerte für die vier Ergebnisgruppen der Kalibrierung. sw: Schüttwinkel; sd: Schüttdichte; ρ_O : optimierte Partikeldichte; $\mu_{r,O}$: optimierter Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; [Rac-2016c].

Gruppe	Anz. Parametersets	sw (°)	sd (kg/m ³)	ρ_O (kg/m ³)	$\mu_{r,O}$ (-)
Hauptgruppe	93	21,7	1521	2096	0,76
Insel	11	21,9	1868	2824	0,89
Insel_r	2	21,9	1867	4871	0,73
Insel_m	2	21,9	1868	3368	0,68

Der Einfluss des *Rayleigh*-Zeitschritts auf die Kalibrierungsergebnisse wurde an einem leicht abgewandelten DEM-Modell untersucht, bei dem die Bildung des Haufwerks durch einen niedrigen Ring unterstützt wurde [Rac-2017b]. Das Kalibrierungsverfahren wurde mit 72 unterschiedlichen Kombinationen für die Anzahl der LHS-Probepunkte und Gewichtungsfaktoren für den *Rayleigh*-Anteil an der Kostenfunktion der Optimierung untersucht. Zusätzlich wurden verschiedene Zusammensetzungen der für die Kalibrierung eingesetzten DEM-Parameter betrachtet. Die betrachteten Parameter waren die Partikeldichte, zwei Rei-

4 Entwicklung und Umsetzung eines methodischen Kalibrierungsverfahrens für DEM-Materialmodell-Parameter

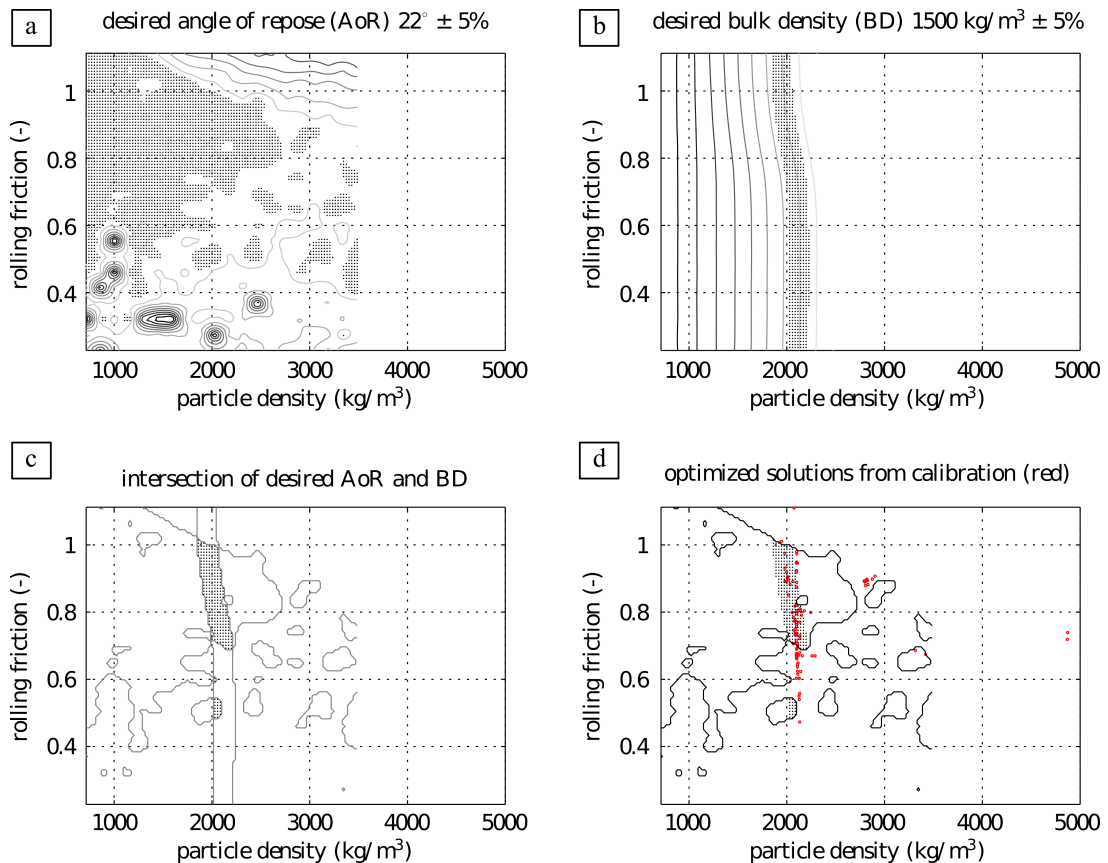


Abbildung 4-6: Abbildung der Verifizierungsergebnisse (Abb. aus [Rac-2017c]).

bungskoeffizienten (Partikel-Partikel/Partikel-Wand), zwei Rollreibungskoeffizienten (analog zu Reibungskoeffizienten) und der Elastizitätsmodul.

Abbildung 4-7 zeigt den Betrag der prozentualen Abweichung zwischen den angestrebten Werten für Schüttdichte (BD) und -winkel (AoR). Diese lag für den Schüttwinkel für mindestens 75% der Versuchsläufe bei weniger als 15%. Der Zielwert der Schüttdichte wurde mit einer maximalen Differenz von 7% noch besser eingestellt. Es lässt sich also sagen, dass das Kalibrierungsverfahren Ergebnisse erzeugt, die im Rahmen der experimentell zu erwartenden Streuung liegen.

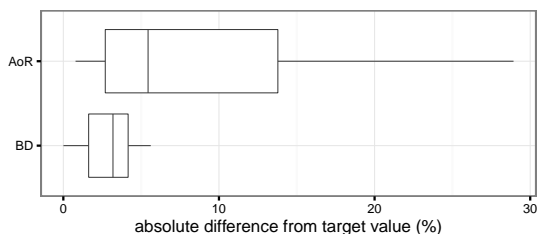


Abbildung 4-7: Betrag des absoluten Unterschieds zwischen den betrachteten Zielgrößen und den DEM-Modellen (Abb. aus [Rac-2017b]).

Abbildung 4-8 kann entnommen werden, dass mehrere verschiedene Parametersets zu den gemessenen Zielgrößen führen. Dies lässt sich aus der großen Streuung von einzelnen kalibrierten Parametern ableiten. Der Elastizitätsmodul, welcher den größten Einfluss auf den Wert der *Rayleigh*-Zeit hatte, liegt in Abbildung 4-8 konsistent bei niedrigen Werten. Dies zeigt, dass die Kostenfunktion für den *Rayleigh*-Zeitschritt berücksichtigt wurde. Der

Tabelle 4-2: Residuen (10^{-2}) und Summe der Residuen (in Klammern) des Optimierungsalgorithmus. Die Summen wurden als Summen der absoluten Terme der Schüttdichte (sd), Schüttdichte (sd) und des jeweiligen Anteils des *Rayleigh*-Zeitschritts (RLTS) berechnet; es gelten die Mittelwerte der Gruppen. Zudem wird hier darauf verwiesen, dass der verwendete Algorithmus auf multivariater Optimierung beruht [Rac-2016c].

Residuum für	Hauptgruppe	Insel	Insel_r	Insel_m
sw	-1,4	-0,86	-0,68	-0,68
sd	1,4	24,5	24,5	24,5
RLTS, 10%	100 (103)	-	-	-
RLTS, 33%	100 (103)	44,6 (70)	-	7,6 (32,8)
RLTS, 66%	100 (103)	69,5 (94,9)	0,03 (25,2)	49,1 (74,3)

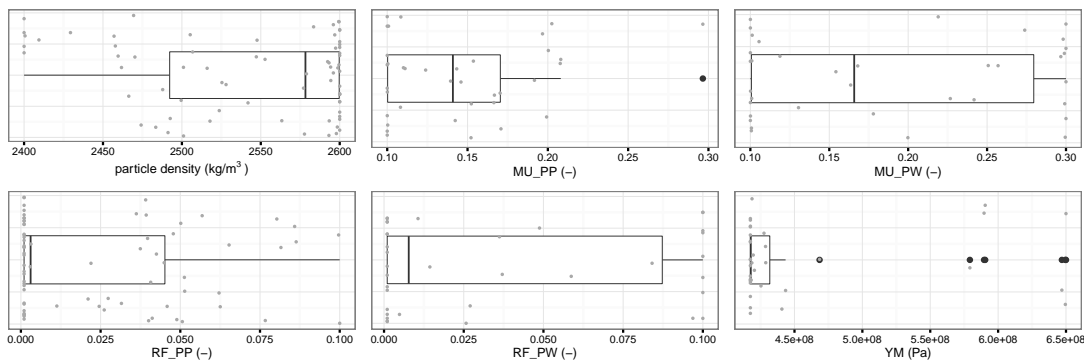


Abbildung 4-8: Boxplots der kalibrierten Parametersets (Abb. aus [Rac-2017b]).

entsprechende Effekt zeigt sich durch einen signifikant größeren Zeitschritt bei den Gewichtungsfaktoren 0,5 und 1 ($WRL=0,5$; $WRL=1$) gegenüber der Vernachlässigung dieses Optimierungsziels ($WRL=0$), wie in Abbildung 4-9 dargestellt. Zusätzlich zeigt Abbildung 4-9, dass die Auswirkungen auf die Kalibrierungszielgrößen nur wenige Prozent ausmachen. Bedingt durch die Wahl der zu kalibrierenden DEM-Modelle, hatte von den beiden den *Rayleigh*-Zeitschritt beeinflussenden Größen (Partikeldichte, Elastizitätsmodul) nur die Partikeldichte einen entscheidenden Einfluss auf die Zielgrößen. Der Elastizitätsmodul hatte keinen Effekt auf Schüttdichte oder Schüttwinkel. Es ist zu erwarten, dass sich mit Einbeziehung des *Rayleigh*-Zeitschritts bei DEM-Modellen, die steifigkeitsabhängige Zielgrößen enthalten, ein weitaus größerer Unterschied zwischen $WRL=0$ und $WLR=1$ einstellt. Die aktive Berücksichtigung des *Rayleigh*-Zeitschritts während des Kalibrierungsvorgangs stellt eine sinnvolle Maßnahme dar, um die Lösungsvielfalt der DEM-Parametersets auf die numerisch effizienteren einzugrenzen.

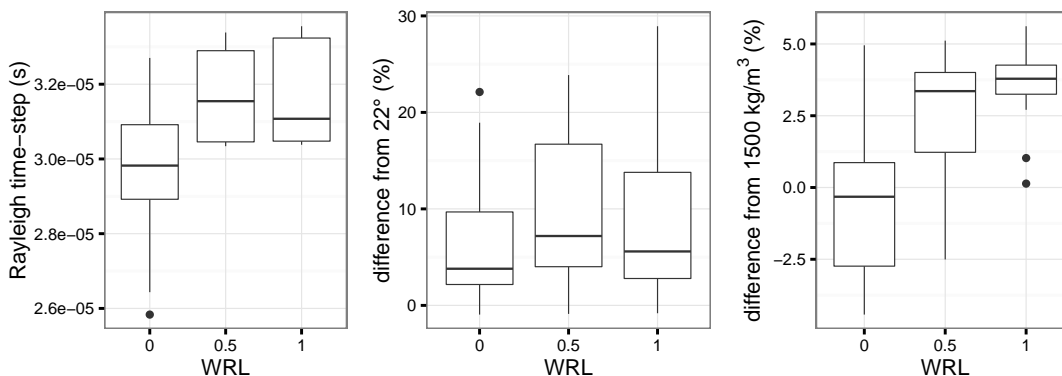


Abbildung 4-9: Boxplots, die den Effekt der Berücksichtigung des *Rayleigh*-Zeitschritts auf den Zeitschritt und die Zielgrößen zeigen (Abb. aus [Rac-2017b]).

4.4 Effizienz während der Verifizierung des Kalibrierungsverfahrens

Die Effizienz des Kalibrierungsverfahrens wurde anhand der Anzahl der zur Kalibrierung benötigten DEM-Berechnungsläufe gemessen. Die Anzahl der Berechnungsläufe setzt sich dabei aus zwei Anteilen zusammen. Der erste Teil stammt aus den DEM-Berechnungen um Daten für die Metamodellbildung zu generieren. Dieser Teil wird durch den Anwender festgelegt und die entsprechende Anzahl der DEM-Berechnungsläufe ist *a priori* bekannt. Der zweite Teil der Summe ergibt sich erst zur Laufzeit des Kalibrierungsverfahrens, während der zweiten Optimierungsphase. Der hier eingesetzte Optimierungsalgorithmus (Levenberg-Marquardt) berechnet für die zu optimierende Funktion deren Funktionswerte sowie verschiedene Gradienten und versuchte so Minima für die Residuen zu finden. Im Gegensatz zum Anteil aus der Beprobungsphase ist die dafür benötigte Anzahl an DEM-Berechnungsläufe nicht vorhersehbar. Auf Basis von theoretischen Betrachtungen kann angenommen werden, dass die Anzahl der DEM-Berechnungsläufe zunimmt, wenn (I) mehr Parameter zur Optimierung bzw. Kalibrierung herangezogen werden, da die Gradientenberechnung aufwändiger wird; (II) wenn der auf Basis der Metamodelle ermittelte Startwert für die zweite Optimierungsphase weit vom tatsächlichen Optimum entfernt ist.

Ausgehend von diesen theoretischen Aspekten wurde der Einfluss der Probenanzahl auf die Anzahl der benötigten DEM-Berechnungsläufe betrachtet. Abbildung 4-10 zeigt auf der linken Seite, dass die auf die Anzahl der zur Kalibrierung verwendeten DEM-Parameter normierte Probenanzahl (SPP) keinen systematischen Effekt auf die Anzahl der DEM-Berechnungsläufe in der zweiten Optimierungsphase hatte. Zudem ist ersichtlich, dass die Anzahl der Optimierungsläufe zwischen ca. 10 und 55 Läufen stark schwankte. Ein Einfluss des *Rayleigh*-Zeitschritts bzw. des Gewichtungsfaktors seines Residuums (WRL) war nicht nachweisbar. Im rechten Teil von Abbildung 4-10 ist die Gesamtzahl der zur Kalibrierung benötigten DEM-Berechnungsläufe über SPP aufgetragen. Da die Anzahl der Optimierungsläufe, wie soeben beschrieben, keinen systematischen Einfluss zeigt, steigt die Gesamtzahl quasi linear mit der Anzahl der Proben pro Parameter an. Es bleibt unklar, wie sich beide Teilabbildungen verhalten würden, wenn eine größere Datenbasis herangezogen würde. Theoretisch sollte sich die Anzahl der Optimierungsläufe mit Zunahme der Probenpunkte verringern, da die Qualität des Startwerts für den zweiten Optimierungsschritt statistisch

4.6 Verfügbarkeit des Quellcodes

gesehen zunimmt. Auf Basis der hier erhobenen Werte wird die Beprobung mit drei Proben pro DEM-Parameter empfohlen.

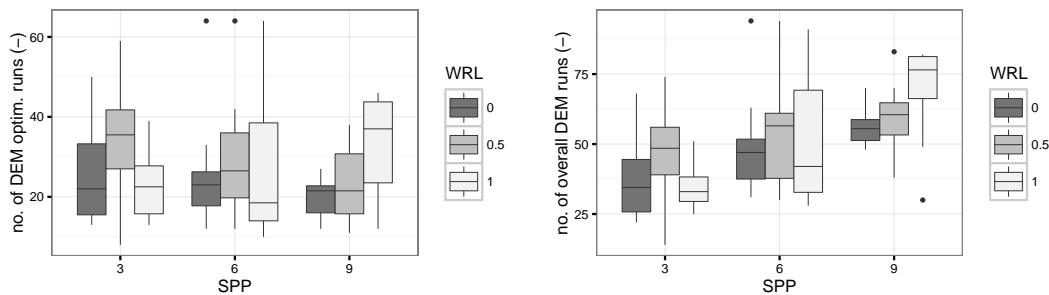


Abbildung 4-10: Anzahl der im zweiten Optimierungsschritt benötigten DEM-Berechnungsläufe (links) und Gesamtzahl der DEM-Berechnungsläufe (rechts) aufgetragen über der normierten Anzahl an Probepunkten pro DEM-Parameter (Abb. aus [Rac-2017b]).

4.5 Fazit

Das in diesem Projekt entwickelte Kalibrierungsverfahren wurde erfolgreich auf seine Funktion hin verifiziert. Dessen Robustheit unter ungünstigen Kalibrierungsrandbedingungen und der neue Ansatz zur Berücksichtigung des *Rayleigh*-Zeitschritts sind wichtige Grundlagen für den praktischen Nutzen und die gute Erweiterbarkeit um zusätzliche DEM-Modelle und Zielgrößen. Durch die Automatisierung der Kalibrierung wird der DEM-Anwender nicht nur zeitlich entlastet und Fehler vermieden, sondern er hat nun auch die Möglichkeit, deutlich komplexere Anforderungen für die Kalibrierung zu formulieren und umzusetzen.

4.6 Verfügbarkeit des Quellcodes

Der GNU Octave-Quellcode des Kalibrierungsverfahrens wird zu Beginn des Jahres 2017 auf der Internet-Plattform GitHub unter der GPLv3-Lizenz [Fre-2016] (*open-source* mit *copyleft*) veröffentlicht. Der Code wird mit der Veröffentlichung dieses Berichtes unter <https://github.com/DECALIOC> bereit gestellt.

5 Messung von Schüttguteigenschaften

Im Rahmen des Projekts DEM-Schüttgutdatenbank wurden insgesamt elf ausgesuchte Industrie-Schüttgüter betrachtet. Das Spektrum reichte von Materialien aus dem Bergbau bis hin zu Biomasse und Lebensmitteln. Zur Messung von Schüttwinkel und Schüttdichte wurde ein eigens hierfür entworfener Versuchsstand aufgebaut.

5.1 Untersuchte Schüttgüter

Die untersuchten Schüttgüter lassen sich den Bereichen Bergbau, Bau, erneuerbare Energien und Lebensmittel zuordnen, deren Auswahl im Vorfeld und während des ersten Projekttreffens mit dem Projektbegleitenden Ausschuss abgesprochen wurde. In Tabelle 5-1 sind alle berücksichtigten Materialien aufgelistet. Es wurde darauf geachtet, dass die Auswahl möglichst breit ist, unterschiedliche Partikelgrößenverteilungen vorkommen und industrierelevante Schüttgüter beinhaltet.

Tabelle 5-1: Untersuchte Materialien in alphabetischer Reihenfolge.

Nr.	Schüttgut	Anmerkung
1	Braunkohle	
2	Eisenerz	Messdaten lt. Projektpartner
3	Holzhackschnitzel	
4	Kalkstein	
5	Koks	
6	Kupfererz	Messdaten lt. Projektpartner
7	Mainsand	
8	Maiskörner (frisch)	
9	Maiskörner (getrocknet)	
10	Milchpulver	
11	Steinkohle	

Die untersuchte Braunkohle wurde aus Beständen des Instituts für Logistik und Materialflusstechnik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg übernommen und stammt aus dem Tagebau Hambach, welcher von der RWE Power AG betrieben wird. Abbildung 5-1 zeigt eine kleine Probenmenge mit Maßstab.

5.1 Untersuchte Schüttgüter



Abbildung 5-1: Foto der untersuchten Braunkohle.

Die Daten für Eisenerz wurden im Rahmen des Projekts nicht selbst gemessen. Ein Unternehmen aus dem Projektbegleitenden Ausschuss (TAKRAF GmbH, Leipzig) stellte einen internen Bericht [Hic-2008] mit Messdaten für Eisenerz aus der Region Newman (Australien) zur Verfügung, aus dem Partikelgrößenverteilung, Schüttdichte und Schüttwinkel entnommen wurde. Dem Bericht wurden die Daten für das als „fine“ bezeichnete Eisenerz entnommen.

Bei den Holzhackschnitzeln handelt es sich um lokal bezogene Biomasse, welche laut Herstellerangaben der Zuordnung P45-S und der Qualitätsklasse A-1 nach DIN EN ISO 17 255-4 [Deu-2014] entsprechen. Das enthaltene Holz ist überwiegend Fichte, mit kleinen Mengen von Buche und Kiefer [KäB-2015]. Abbildung 5-2 zeigt eine kleine Menge der Holzhackschnitzel mit Maßstab.



Abbildung 5-2: Foto der untersuchten Holzhackschnitzel.

Ebenfalls lokal bezogen wurde klassierter Jura-Kalkstein mit einer Nenngröße zwischen 20 und 30 mm [Mär-2016]. Abbildung 5-3 zeigt eine Probe des Materials.



Abbildung 5-3: Foto des untersuchten Kalksteins.

Von der Firma thyssenkrupp Industrial Solutions AG (Essen) wurde Koks von der Kokerei KBS (Duisburg) zur Verfügung gestellt (Abbildung 5-4). Die Partikelgrößen des klassierten Materials wurden von der Kokerei mit 20-40 mm angegeben.



Abbildung 5-4: Foto des untersuchten Koks.

Wie beim Eisenerz wurden die Daten für Kupfererz aus einem von der Firma TAKRAF GmbH bereitgestellten Bericht [Cab-2011] bezogen. Das im Bericht beschriebene Kupfererz stammt aus der Region Sierra Gorda in Chile.

Mainsand mit einer Nennkörnung von 0-2 mm wurde von der Firma Andreas Schorr GmbH & Co. KG (Baunach) bereit gestellt. Abbildung 5-5 zeigt ein Foto des Mainsands.

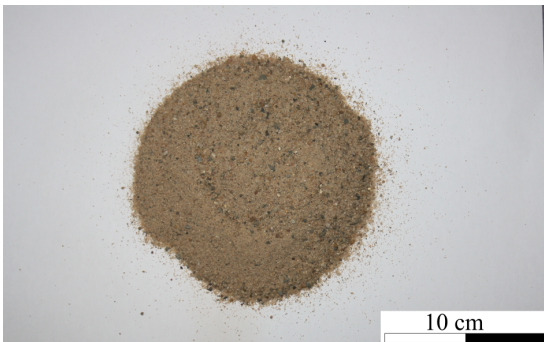


Abbildung 5-5: Foto des untersuchten Mainsands.

Maiskörner wurden in zwei Zuständen untersucht. Zum einen als gereinigtes und getrocknetes Produkt (Futtermais, [Bay-2014]) und zum anderen als erntefrisches Produkt [Bay-2016] mit einem entsprechend höheren Feuchtigkeitsgehalt und Ernterückständen. Beide Arten von Maiskörnern wurden über den Agrargroßhandel bezogen und sind in Abbildung 5-6 bzw. Abbildung 5-7 dargestellt. In Abbildung 5-7 sind die Ernterückstände deutlich zu erkennen.



Abbildung 5-6: Foto der getrockneten Maiskörner (Futtermais).

Von der Firma Vollenda-Werk GmbH (Kaltenberg) wurde Milchpulver aus französischer Produktion bereit gestellt [eur-2013]. Das untersuchte Magermilchpulver ist für den menschlichen Verzehr geeignet und kommt vor allem in der Lebensmittelindustrie zum Einsatz. Abbildung 5-8 zeigt ein Foto des Produkts.

5.2 Experimentelle Untersuchung der Schüttgüter



Abbildung 5-7: Foto der im Projekt untersuchten erntefrischen Maiskörner.



Abbildung 5-8: Foto des untersuchten Magermilchpulvers.

Die untersuchte Steinkohle wurde über die ENGIE Kraftwerk Zolling GmbH & Co. KG (Zolling) bezogen. Sie ist in Abbildung 5-9 abgebildet, stammt ursprünglich aus Russland und wurde gewaschen [Kni-2016]. Die Nennpartikelgrößen wurden von 0-50 mm ausgewiesen.

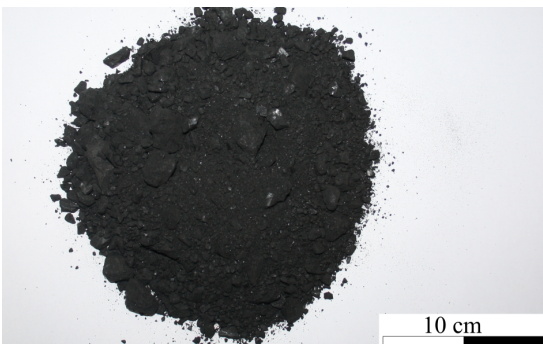


Abbildung 5-9: Foto der untersuchten Steinkohle.

5.2 Experimentelle Untersuchung der Schüttgüter

Jedes der erwähnten Schüttgüter – mit Ausnahme von Kupfer- und Eisenerz – wurde den gleichen Messprozeduren unterzogen. Einige der Schüttgüter waren im Anlieferzustand zu grob für die Untersuchung in der Translationsscherzelle und wurden für diese Messung gebrochen.

5.2.1 Feuchtigkeitsgehalt

Die Bestimmung des Feuchtigkeitsgehalts erfolgte durch Verdunsten des am und im Schüttgut befindlichen Wassers. Jeweils drei Proben (N=3) zu je 10 g wurden von Raumtemperatur

auf 120 °C erhitzt und diese Temperatur so lange gehalten, bis sich die mittels einer Analysewaage erfasste Masse der Proben nicht mehr veränderte.

5.2.2 Partikelgrößenverteilung

Die Partikelgrößenverteilung wurde mit Analysesieben mit verschiedenen Maschenbreiten ermittelt. Dabei wurde darauf geachtet, dass auf allen eingesetzten Sieben Material liegen blieb, um eine sinnvolle Korngrößenverteilung zu messen.

5.2.3 Schüttwinkel

Beim Schüttwinkel handelt es sich um einen der am häufigsten zur Schüttgutcharakterisierung herangezogenen Kennwert. Er wird unter anderem zur Auslegung von Silos und Halden sowie zur groben Beschreibung der Fließfähigkeit verwendet. Der Schüttwinkel wird neben der Schüttdichte für fast jedes Schüttgut mit angegeben. Dies lässt sich auf dessen einfache Messverfahren zurückführen, für die im Allgemeinen nur rudimentäre Messtechnik und -aufbauten benötigt werden [Eur-1991].

Die Schüttwinkelmessung kann durch unterschiedliche Verfahren erfolgen, welche untereinander nur unzureichend vergleichbar sind. In der vorliegenden Arbeit wurde der Hochziehversuch gewählt. Die Messungen erfolgten auf drei Versuchsständen, von denen sich einer am Lehrstuhl für Fördertechnik Materialfluss Logistik (fml) an der Technischen Universität München und zwei am Institut für Logistik und Materialflusstechnik (ILM) an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg (OvGU) befinden.

5.2.3.1 Versuchsstand (fml)

Zur Messung des Schüttwinkels für Braunkohle, Holzhackschnitzel, Kalkstein, Koks, beide Arten von Maiskörnern, Milchpulver und Steinkohle wurde am Lehrstuhl für Fördertechnik Materialfluss Logistik eigens für das Projekt ein Versuchsstand konstruiert und gefertigt. Dieser Versuchsstand wurde neben der Messung des Schüttwinkels auch zur Bestimmung der Schüttdichte eingesetzt (vgl. Unterabschnitt 5.2.4.1). Abbildung 5-10 zeigt den schematischen Aufbau und ein Foto des Versuchsstands. Er besteht aus einer kreisförmigen, drehbar gelagerten Grundplatte aus Stahl-Walzblech sowie einem elektrisch angetriebenen Hubwerk. Zum Versuchsstand gehören außerdem drei an den Stirnseiten offene zylindrische Stahlbehälter (Walzblech) mit drei verschiedenen Innendurchmessern und Zylinderhöhen. Die Behältergrößen und -höhen können Tabelle 5-2 entnommen werden.

Tabelle 5-2: Behälterabmessungen und Füllhöhen.

Behälterbezeichnung	Innendurchmesser (mm)	Höhe (mm)	Füllhöhe (mm)
klein	250	350	325
mittel	425	600	545
groß	600	800	780

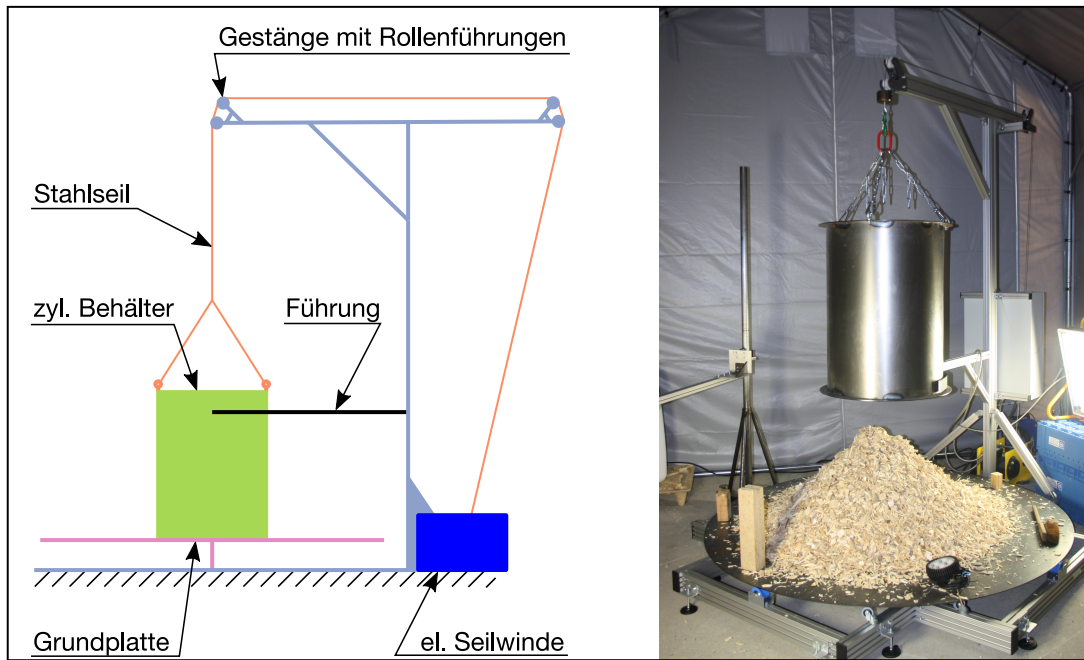


Abbildung 5-10: Schematischer Aufbau des Versuchsstands (links) und Foto (rechts) des Versuchsstands nach der Schüttwinkelmessung bei Holzhackschnitzeln. Der Durchmesser der Grundplatte beträgt ca. zwei Meter.

Um den Schüttwinkel messen zu können wird ein zylindrischer Behälter auf der Grundplatte abgestellt und bis zur in Tabelle 5-2 angegebenen Füllhöhe mit dem zu untersuchenden Schüttgut befüllt. Die dabei eingefüllte Masse kann zur Berechnung der Schüttdichte herangezogen werden (vgl. Unterunterabschnitt 5.2.4.1). Der gefüllte Stahlzylinder wird sodann durch das Hubwerk mit einer konstanten Geschwindigkeit senkrecht nach oben gehoben. Für die Messung der Schüttdichte wurde mit Hubgeschwindigkeiten von 33 (langsam) bzw. 142 mm s^{-1} (schnell) gearbeitet. Eine vertikale Führung stellt dabei sicher, dass der Behälter nicht seitlich zu schwingen beginnt. Durch den Verlust der seitlichen Abstützung beim Anheben des Behälters bricht die Schüttgutsäule im Zylinder in sich zusammen und bildet ein Haufwerk aus. Der Schüttwinkel wurde nach der FEM-Richtlinie 2.582 [Eur-1991] vermessen und jede Messung insgesamt viermal wiederholt ($N=4$).

5.2.3.2 Versuchsstand OvGU

Zusätzlich zu den Messungen am Lehrstuhl fml wurde der Schüttwinkel auch am ILM der Otto-von-Guericke-Universität gemessen. Der dortige Versuchsaufbau entspricht weitestgehend dem Aufbau am Lehrstuhl fml. Die am ILM eingesetzten Behälterdurchmesser waren 100 und 250 mm ; die zwei bei den Messungen verwendeten Hubgeschwindigkeiten 8 mm/s und *ruckartig*. Um die Hubgeschwindigkeit *ruckartig* umzusetzen, wurde der zylindrische Behälter mittels eines über eine Seilrolle umgelenkten Seils nach oben gerissen.

5.2.4 Schüttdichte

Die Schüttdichte ist einer der grundlegendsten Materialwerte für Schüttgüter. Bei der Auslegung von fördertechnischen Anlagen wird sie z. B. zur Berechnung von Massenströmen und Massenkräften benötigt. In der vorliegenden Arbeit wurde sie unter anderem mit dem in Unterabschnitt 5.2.3.1 beschriebenen Versuchsstand gemessen, sowie am ILM bestimmt.

5.2.4.1 Zylindrischer Behälter (fml)

Die Messung der Schüttdichte erfolgte auf dem am Lehrstuhl für Fördertechnik Materialfluss Logistik für das Projekt konstruierten und gefertigten Versuchsstand (vgl. Unterabschnitt 5.2.3.1). Die Schüttdichte wurde für Braunkohle, Holzhackschnitzel, Kalkstein, Koks, beide Arten von Maiskörnern, Milchpulver und Steinkohle für drei unterschiedliche Volumina gemessen. Diese Volumina beziehen sich auf die zylindrischen Stahlbehälter mit drei verschiedenen Durchmessern.

Die Behälter wurden bis zur in Tabelle 5-2 erwähnten Füllhöhe mit dem jeweiligen Schüttgut gefüllt, woraus sich die in Tabelle 5-3 aufgelisteten Volumina ergeben. Die Schüttdichte wurde durch Division der Masse des eingefüllten Schüttguts durch die angeführten Volumina berechnet und jede Messung viermal wiederholt (N=4).

Tabelle 5-3: Behälterdurchmesser und Füllvolumen zur Schüttdichtemessung.

Behälterdurchmesser (mm)	Füllvolumen (10^{-3} m^3)
250	16,0
425	77,3
600	221

5.2.4.2 OvGU

Die Messung der Schüttdichte erfolge am ILM mittels eines Messzylinders mit einem Volumen von $1,43 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$, der vorsichtig bis zum Rand mit Schüttgut gefüllt wurde, um eine Vorverdichtung des Materials zu vermeiden. Nach dem Abstreichen von überschüssigem Schüttgut wurde der Zylinderinhalt gewogen und die Messung insgesamt dreimal wiederholt (N=3).

5.2.5 Scherzellenversuch für Wandreibwerte sowie Haftreibungskoeffizienten

Der Wandreibwert, μ_W , wurde mit einer Translationsscherzelle gemessen. Dabei wird eine mit einer definierten Normalspannung beaufschlagte Schüttgutprobe angeschert, sodann relativ zum betreffenden Wandmaterial bewegt und die dazu benötigte Scherspannung ermittelt (vgl. Abbildung 5-11). In der vorliegenden Arbeit wurden Wandreibwerte der Schüttgüter auf unlegiertem Baustahl mit Walzhaut (S235) gemessen. Um den Wandfließort zu erhalten wird

5.3 Ergebnisse

die Normalkraft schrittweise reduziert und die Messung erneut durchgeführt. Die verwendete Scherzelle hat einen Zylinderdurchmesser von 100 mm; Schüttgüter mit sehr großen Partikelgrößen wurden vor der Versuchsdurchführung gebrochen. Der gesamte Messdurchgang wurde insgesamt dreimal wiederholt ($N=3$) und die Ermittlung des Wandreiwerts erfolgte mittels linearer Regression.

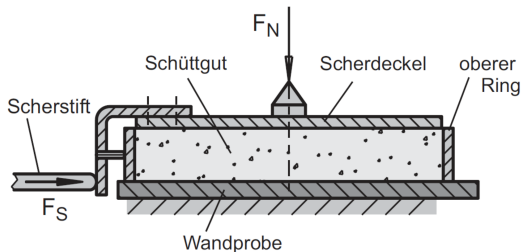


Abbildung 5-11: Scherzellenversuch zur Messung des Wandreiwerts (Abb. aus [Sch-2014, S. 109]).

Zur Messung des Haftreibungswinkels wurde eine unlegierte Baustahlplatte mit Walzhaut auf einer kippbaren Unterlage befestigt. Auf diese Platte wurde das jeweilige Schüttgut aufgebracht und von einem Aluminiumring zusammengehalten. Es wurde dabei darauf geachtet, dass der Aluminiumring vollständig vom Schüttgut getragen wird und keinen direkten Kontakt mit der Stahlplatte hatte. Die Stahlplatte wurde sodann aus der Horizontalen gekippt, bis sich der Aluminiumring samt Schüttgut in Bewegung setzte. Der entsprechende Kippwinkel, γ_H , markiert den Grenzzustand zwischen Haften und Gleiten und wurde mittels der Gleichung $\mu_H = \tan \gamma_H$ in den Haftreibungskoeffizienten, μ_H , umgerechnet.

5.3 Ergebnisse

Es folgen die Ergebnisse für die im Projekt untersuchten Schüttgüter.

5.3.1 Feuchtigkeitsgehalt

Die gemittelten Feuchtigkeitsgehalte und die jeweilige Standardabweichung in Massenprozent sind in Tabelle 5-4 aufgelistet. Braunkohle und frische Maiskörner enthielten den mit Abstand größten Massenanteil an Wasser. Trotz dessen erschienen beide Schüttgüter bei der Handhabung als trocken, was darauf schließen lässt, dass die Feuchtigkeit bei beiden Materialien vorrangig innerhalb der Partikel gespeichert war.

Tabelle 5-4: Feuchtigkeitsgehalte und Standardabweichungen in Massenprozent (N=3).

Schüttgut	Feuchtigkeitsgehalt (m-%)
Braunkohle	25,7 ± 1,2
Holzhackschnitzel	6,2 ± 0,1
Kalkstein	1,2 ± 0,5
Koks	6,1 ± 0,2
Mainsand	0,3 ± 0,1
Maiskörner (frisch)	23,1 ± 0,8
Maiskörner (trocken)	11,5 ± 0,5
Milchpulver	2,3 ± 0,5
Steinkohle	6,0 ± 0,3
Eisenerz	2... 15 (lt. Bericht)
Kupfererz	0,4... 0,6 (lt. Bericht)

5.3.2 Partikelgrößenverteilung

Die Partikelgrößenverteilungen der untersuchten Schüttgüter sind in Abbildung 5-12 bis Abbildung 5-22 dargestellt. In Tabelle 5-5 sind die Medianwerte, d_{50} , der Schüttgüter aufgelistet. Sie wurden rechnerisch aus den Partikelgrößenverteilungen ermittelt und decken einen breiten Bereich zwischen Zehntelmillimetern und mehreren Zentimetern ab.

Das feinste untersuchte Schüttgut im Bezug auf den Mediandurchmesser war Milchpulver ($62 \cdot 10^{-3}$ mm), das größte war Kalkstein (25,7 mm). Braunkohle, Eisenerz, Kupfererz, Mainsand und Steinkohle wiesen einen ausgeprägten Feinanteil auf, der mit der eingesetzten Messtechnik nicht voll aufgelöst werden konnte. Dahingehen zeigt sich die für Partikelgrößenverteilungen typische S-Form bei Holzhackschnitzeln, Kalkstein, und beiden Maissorten sehr gut. Frischer und getrockneter Mais unterschieden sich im Zentralwert um etwas mehr als einen Millimeter. Diese Differenz lässt sich durch den Volumenverlust beim Trocknen begründen. Die anderen Schüttgüter lagen mit ihre Feuchtigkeitsgehalten zwischen 0,42 (staubtrocken) und ca. 10%.

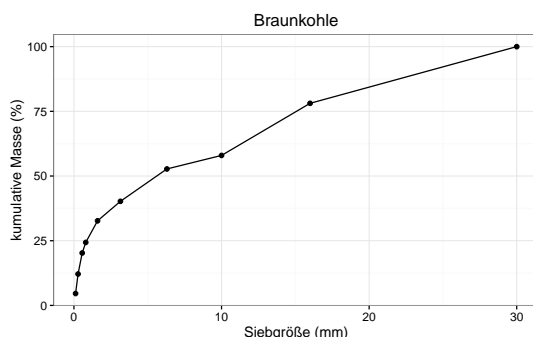


Abbildung 5-12: Partikelgrößenverteilung der Braunkohle.

5.3 Ergebnisse

Tabelle 5-5: Medianwerte der Partikelgrößenverteilungen.

Schüttgut	d ₅₀ (mm)
Braunkohle	5,6
Holzhackschnitzel	11,6
Kalkstein	25,7
Koks	19,7
Mainsand	0,43
Maiskörner (frisch)	7,1
Maiskörner (trocken)	5,7
Milchpulver	62 · 10 ⁻³
Steinkohle	3,1
Eisenerz	6,8
Kupfererz	0,59

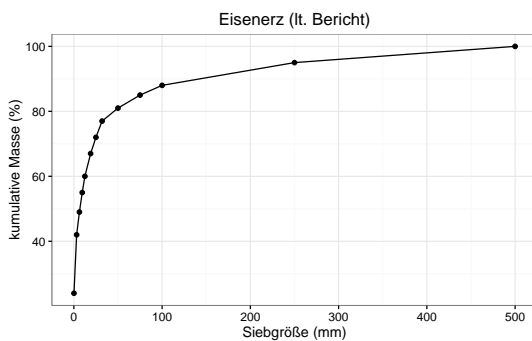


Abbildung 5-13: Partikelgrößenverteilung des Eisenerzes (Daten aus [Hic-2008]).

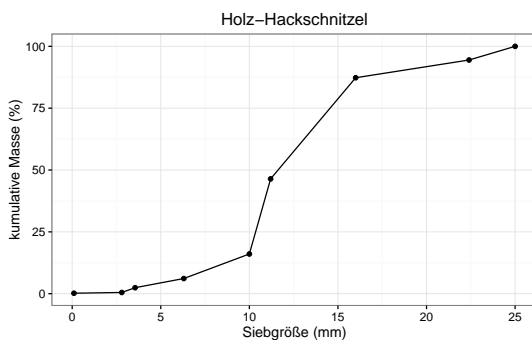


Abbildung 5-14: Partikelgrößenverteilung der Holz hackschnitzel.

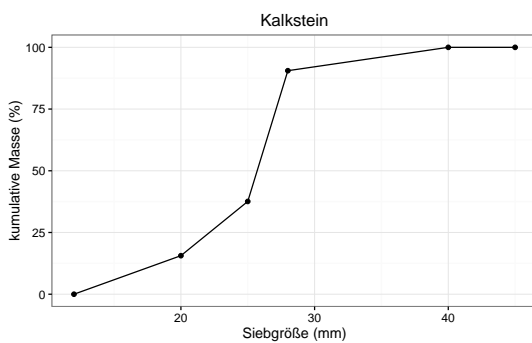


Abbildung 5-15: Partikelgrößenverteilung des Kalksteins.

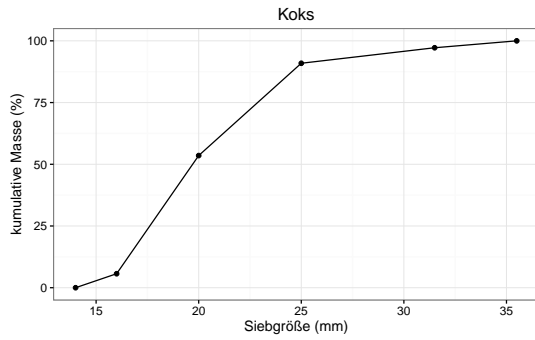


Abbildung 5-16: Partikelgrößenverteilung des Koks.

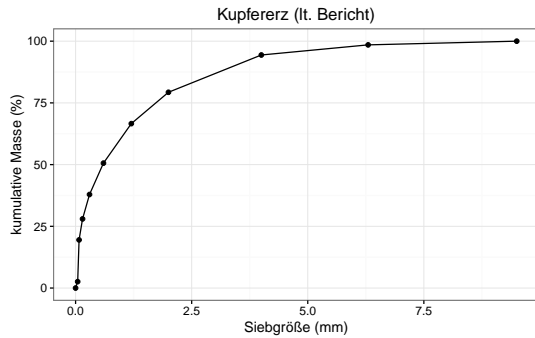


Abbildung 5-17: Partikelgrößenverteilung des Kupfererzes (Daten aus [Cab-2011]).

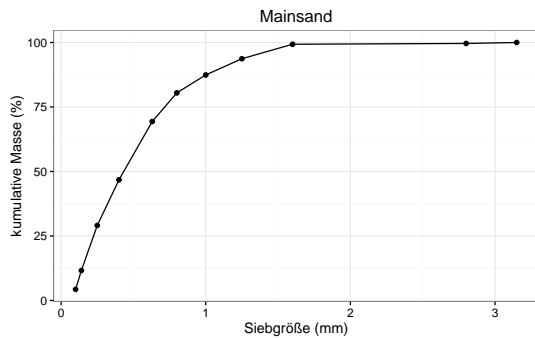


Abbildung 5-18: Partikelgrößenverteilung des Mainsands.

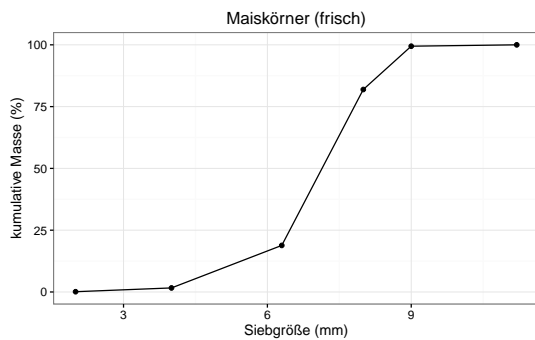


Abbildung 5-19: Partikelgrößenverteilung der Maiskörner (frisch).

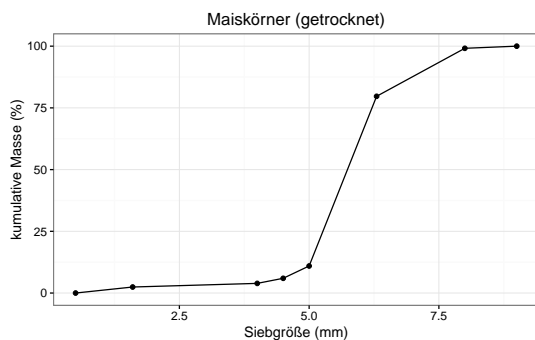


Abbildung 5-20: Partikelgrößenverteilung der Maiskörner (getrocknet).

5.3 Ergebnisse

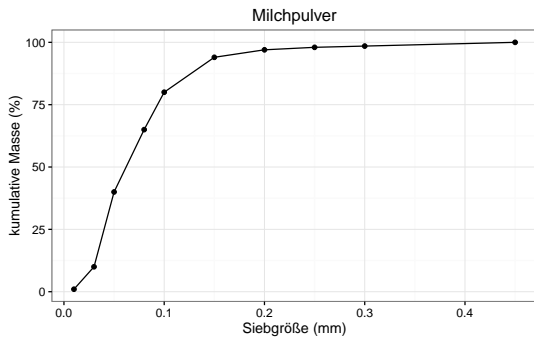


Abbildung 5-21: Partikelgrößenverteilung des Milchpulvers.

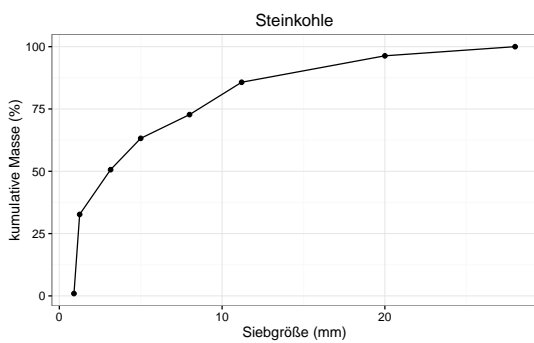


Abbildung 5-22: Partikelgrößenverteilung der Steinkohle.

5.3.3 Schüttwinkel

In Tabelle 5-6 sind die Mittelwerte und Standardabweichungen für alle Schüttwinkelversuche aufgelistet. Sie wurden nach dem Durchmesser des zylindrischen Behälters und der Hubgeschwindigkeit gegliedert. Die Werte für Eisen- und Kupfererz stammen aus den in Abschnitt 5.1 erwähnten Berichten und können keiner der Spalten zugeordnet werden, da die Daten aus den Berichten mittels eines anderen Messverfahrens gemessen wurden bzw. die Angaben zum eingesetzten Messverfahren fehlen. Die Messergebnisse für die Schüttwinkel bewegen sich in dem für Schüttgüter üblichen Bereich zwischen 25° und 40° . Mit 55° wurde der steilste Schüttwinkel bei Holzhackschnitzeln gemessen. Durch ihre markanten Partikelformen und die durch die Holzfaser relativ raue Oberfläche tendierten sie sehr stark dazu, sich zu verhaken statt beim Hochziehen des Behälters auseinander zu rutschen.

Tabelle 5-6: Mittelwerte und Standardabweichungen (in °) aus den Schüttwinkelmessungen für N = 3...10; d: Durchmesser des zylindrischen Behälters; v_{Hub}: Hubgeschwindigkeit.

Schüttgut	d (mm)	100		250		425		600	
		v _{Hub} (mm/s)	ruckart.	v _{Hub} (mm/s)	ruckart.	v _{Hub} (mm/s)	ruckart.	v _{Hub} (mm/s)	ruckart.
Braunkohle		32 ± 4	20 ± 3	33 ± 2	31 ± 2	25 ± 3	-	30 ± 0	30 ± 1
Holzhackschmitzel		50 ± 19	36 ± 13	42 ± 14	41 ± 1	55 ± 15	38 ± 3	35 ± 2	37 ± 1
Kalkstein		32 ± 10	23 ± 7	31 ± 4	26 ± 3	19 ± 3	31 ± 1	26 ± 1	27 ± 0
Koks		25 ± 13	14 ± 5	33 ± 4	20 ± 1	15 ± 3	-	21 ± 2	24 ± 1
Mainsand		31 ± 1	23 ± 2	31 ± 1	26 ± 1	-	-	-	-
Maiskörner (frisch)		30 ± 1	16 ± 1	31 ± 1	22 ± 1	17 ± 0	-	21 ± 0	21 ± 0
Maiskörner (trocken)		29 ± 2	16 ± 2	27 ± 2	16 ± 0	16 ± 2	19 ± 3	16 ± 1	18 ± 0
Milchpulver		37 ± 10	14 ± 4	-	36 ± 2	-	-	32 ± 0	31 ± 1
Steinkohle		33 ± 1	21 ± 0	33 ± 0	28 ± 2	23 ± 1	-	29 ± 1	31 ± 2
Eisenerz	laut Bericht	40...45							
Kupfererz	laut Bericht	38							

5.3.4 Schüttdichte

Die Messergebnisse der Schüttdichte sind in Tabelle 5-7 in Form von Mittelwert und Standardabweichung aufgelistet. Mit Werten zwischen 130 kg/m^3 bei Holzhackschnitzeln und 2850 kg/m^3 bei Kupfererz wird ein sehr breiter Bereich an Schüttdichten abgebildet. Der Vergleich zwischen getrockneten und frischen Maiskörnern zeigt, dass das getrocknete Produkt trotz des Verlustes des Wasseranteils eine höhere Schüttdichte aufweist. Dieser Effekt lässt sich mit dem Volumenverlust beim Trocknungsvorgang erklären, der sich auch in den Unterschieden der beiden Partikelgrößenverteilungen in Abbildung 5-19 und Abbildung 5-20 zeigt.

Tabelle 5-7: Mittelwerte und Standardabweichungen aus den Schüttdichtemessungen (in kg/m^3) für N = 3... 4.

Schüttgut	OvGU	Behälterdurchmesser d (mm)		
		250	425	600
Braunkohle	732 ± 14	775 ± 4	819 ± 5	798 ± 11
Holzhackschnitzel	130 ± 4	146 ± 5	141 ± 10	148 ± 5
Kalkstein	1170 ± 75	1271 ± 33	1287 ± 12	1304 ± 110
Koks	521 ± 23	566 ± 48	637 ± 4	626 ± 4
Mainsand	1570 ± 20	-	-	-
Maiskörner (frisch)	651 ± 4	706 ± 18	701 ± 8	715 ± 3
Maiskörner (trocken)	709 ± 4	725 ± 8	717 ± 5	723 ± 8
Milchpulver	507 ± 2	543 ± 12	559 ± 7	570 ± 2
Steinkohle	855 ± 25	851 ± 15	853 ± 3	846 ± 2
Eisenerz	laut Bericht	2200		
Kupfererz	laut Bericht	2850		

5.3.5 Wandreiwerte und Haftreibungskoeffizienten

Die Wandreiwerte und Haftreibungskoeffizienten der Schüttgüter auf unlegiertem Baustahl mit Walzhaut (S235) liegen nur für die direkt im Projekt untersuchten Materialien vor. Die entsprechenden Werte und Standardabweichungen sind in Tabelle 5-8 zusammengefasst.

Beide Reibwerte korrelieren für Maiskörner (frisch) und Steinkohle sehr gut. Für Braunkohle und Mainsand beträgt die Differenz maximal 0,05. Größere Unterschiede liegen bei Holzhackschnitzeln, Koks und Mais (trocken) vor. Allen Differenzen ist gemein, dass der Haftreibungskoeffizient etwas höher ausfällt.

Die Messwerte für Kalkstein und Milchpulver unterscheiden sich mit Bezug zu den Messverfahren sehr stark. Bei Milchpulver spielte die Adhäsion zwischen Produkt und Stahlplatte eine entscheidende Rolle. Sie führte dazu, dass bei der Haftreibungsmessung effektiv nicht der Haftreibungskoeffizient zwischen Stahlplatte und Milchpulver, sondern der innere Reibungskoeffizient des Milchpulvers gemessen wurde. Abbildung 5-23 zeigt ein Foto des

5.3 Ergebnisse

Versuchsaufbaus nach der Versuchsdurchführung. Das an der Stahlplatte anhaftende Milchpulver ist in Form eines Kreises deutlich zu erkennen. Bei der Haftreibungsmessung von Kalkstein war nicht auszuschließen, dass der Aluminiumring Kontakt mit der Stahlplatte hatte und so die Messung verfälscht wurde. Zudem wurde die großen Partikel des Kalksteins für die Wandreibungsmessung in der Translationsscherzelle gebrochen. Eine gewisse Erhöhung des Wandreibungswerts, μ_W , durch frische Bruchkanten ist nicht auszuschließen.



Abbildung 5-23: Auf der Stahlplatte anhaftendes Milchpulver nach der Messung des Haftreibungskoeffizienten (unten links).

Tabelle 5-8: Wandreibungswerte (Mittelwerte), μ_W (N=3), und Haftreibungskoeffizienten, μ_H (N=5), inkl. Standardabweichungen auf unlegiertem Baustahl mit Walzhaut.

Schüttgut	μ_W (-)	μ_H (-)
Braunkohle	$0,37 \pm 0,007$	$0,32 \pm 0,02$
Holz hackschnitzel	$0,36 \pm 0,005$	$0,43 \pm 0,01$
Kalkstein	$0,40 \pm 0,01$	$0,20 \pm 0,01$
Koks	$0,21 \pm 0,003$	$0,29 \pm 0,02$
Mainsand	$0,34 \pm 0,007$	$0,39 \pm 0,01$
Maiskörner (frisch)	$0,41 \pm 0,01$	$0,43; 0,45^a$
Maiskörner (trocken)	$0,19 \pm 0,009$	$0,32 \pm 0,01$
Milchpulver	$0,36 \pm 0,01$	$0,67 \pm 0,04$
Steinkohle	$0,41 \pm 0,01$	$0,41; 0,42^a$

^a: nur zwei Messdurchgänge

6 Kalibrierung von verschiedenen Schüttgütern

Die Kalibrierung der DEM-Materialmodellparameter erfolgte nach dem in Kapitel 4 beschriebenen Kalibrierungsverfahren. Die Anzahl der dazu eingesetzten Parameter und die oberen bzw. unteren Intervallgrenzen variierten je nach Schüttgut.

6.1 Allgemeines

Alle betrachteten Schüttgüter wurden auf einem Desktop-PC mit 20 physikalischen CPUs und 64 GB Arbeitsspeicher kalibriert. Die eingesetzten Programmversionen von LIGGGHTS und GNU Octave waren 3.4.1 bzw. 4.0.0.

Als Zielgrößen für die Kalibrierung wurden die zuvor gemessenen Daten des Schüttwinkels und der Schüttdichte herangezogen. Zusätzlich wurde der Rayleigh-Zeitschritt mit einbezogen. Dieser wurde in den Optimierungsprozessen mit einem Vorfaktor von 0,5 in die Optimierung übernommen, um dessen Einfluss nicht überproportional zu gewichten (vgl. [Rac-2017b]). Beide Zielgrößen wurden als Ergebnisse der DEM-Simulationen automatisch ausgewertet. Dazu wurden die in Unterabschnitt 5.2.3 und Unterabschnitt 5.2.4 beschriebenen Versuchsaufbauten mit den jeweils unterschiedlichen Behältervolumina, Füllhöhen und Hubgeschwindigkeiten in LIGGGHTS modelliert.

Die Schüttdichte lässt sich in der DEM-Simulation sehr einfach aus der in einem definierten Volumen befindlichen Masse des jeweiligen Schüttguts berechnen. Die Messung des Schüttwinkels gestaltete sich dahingegen schwieriger, da hierbei die optische Erfassung von Merkmalen notwendig ist. Im Rahmen dieses Projekts wurde deshalb auf Verfahren der digitalen Bildverarbeitung zurückgegriffen. Zur Bestimmung des Schüttwinkels wurden von jedem Haufwerk aus der DEM-Simulation monochrome Abbildungen in Drauf- und Seitenansicht erstellt. Neben dem interessierenden Haufwerk enthielten beide Ansichten je eine Kugel mit bekanntem Durchmesser, als Referenz für die Bestimmung von physikalischen Längenmaßen. Abbildung 6-1 zeigt zwei solcher Abbildungen mit den Referenzkugeln. Die Berechnung des Schüttwinkels erfolgte analog zu den Experimenten in Anlehnung an die FEM-Richtlinie 2582 aus dem Durchmesser und der Höhe des Haufwerks. Dazu wurden automatisiert monochromatische Screenshots von einer Drauf- und Seitenansicht des zu vermessenden Haufwerks aus der DEM-Software LIGGGHTS erstellt. Um absolute Maße bestimmen zu können, wurde den Screenshots eine Referenzkugel mit einem bekannten Durchmesser hinzugefügt (siehe Abbildung 6-1). Folgende Schritte wurden zur Messung des Durchmessers implementiert:

1. Die Draufsicht einlesen (Abbildung 6-1a).
2. Die beiden größten Objekte finden, welches die Kugel und das Haufwerk sind, und alle übrigen Objekte entfernen.

6.1 Allgemeines

3. Einen Skalierungsmaßstab aus dem bekannten Durchmesser der Kugel und ihrer Größe in Pixeln berechnen und anschließend die Kugel entfernen.
4. Die von Pixeln belegte Fläche, A_t , in der Abbildung bestimmen (nur das Haufwerk ist nun übrig), den Flächenschwerpunkt bestimmen und letzteren als Mittelpunkt für einen Kreis mit dem Radius $r_l = \sqrt{A_t/\pi}$ einsetzen.
5. Alle schwarzen Pixel außerhalb dieses Kreises entfernen.
6. Schritte 4 und 5 wiederholen und den so aktualisierten Radius r_t bestimmen. Diese Wiederholung dient dazu, um den Radius zu verkleinern, da der äußere Bereich des Haufwerks nur mit wenigen Partikeln besetzt ist (vgl. Abbildung 6-1a).
7. Den Radius r_t mittels des in Schritt 3 berechneten Maßstabs in ein absolutes Maß in Millimetern konvertieren. Dieser neue Radius, r_f , wird als der Radius des Haufwerks ausgegeben.

Um die Höhe des Haufwerks zu bestimmen, wurden die folgenden Schritte abgearbeitet:

1. Die Seitenansicht einlesen (Abbildung 6-1b).
2. Die beiden größten Objekte finden, welches die Kugel und das Haufwerk sind, und alle übrigen Objekte entfernen.
3. Einen Skalierungsmaßstab aus dem bekannten Durchmesser der Kugel und ihrer Größe in Pixeln berechnen und anschließend die Kugel entfernen.
4. Innerhalb der Abbildungsmatrix die erste und letzte Zeile mit einem schwarzen Pixel finden. Aus der Differenz der Zeilennummern ergibt sich die Höhe des Haufwerks in Pixel, h_t .
5. Die Höhe h_t mittels des in Schritt 3 berechneten Maßstabs in ein absolutes Maß in Millimetern konvertieren; dies ist h_f und wird als Höhe des Haufwerks bezeichnet.
6. Je nach dem, ob das Haufwerk von einem Ring mit definierter Höhe, h_{Ring} , gestützt wird oder nicht, muss die Höhe h_{Ring} von h_f subtrahiert werden, um die wahre Höhe, h_f , des Haufwerks zu erhalten.

Im letzten Schritt wurde der Schüttwinkel des Haufwerks mittels Gleichung 6-1 berechnet.

$$\alpha = \arctan \frac{h_f}{r_f} \quad (6-1)$$

Die Hauptbedingung bei der Kalibrierung war es, die aus den DEM-Modellen berechneten Zielgrößen durch Veränderung der DEM-Materialmodellparameter so einzustellen, dass sie möglichst nahe oder – im Idealfall – gleich der Versuchsdaten sind. Je nach Schüttgut wurden ein bis drei DEM-Modelle mit verschiedenen Hubgeschwindigkeiten oder Behältergrößen verwendet, um bei jedem DEM-Modell jeweils die Schüttdichte und den Schüttwinkel zu kalibrieren. Allen Kalibrierungsläufen war gemein, dass mittels LHS 21 Probepunkte bestimmt wurden. Durch Parallelisierung von DEM-Simulationsläufen wurden die Berechnungszeiten reduziert.

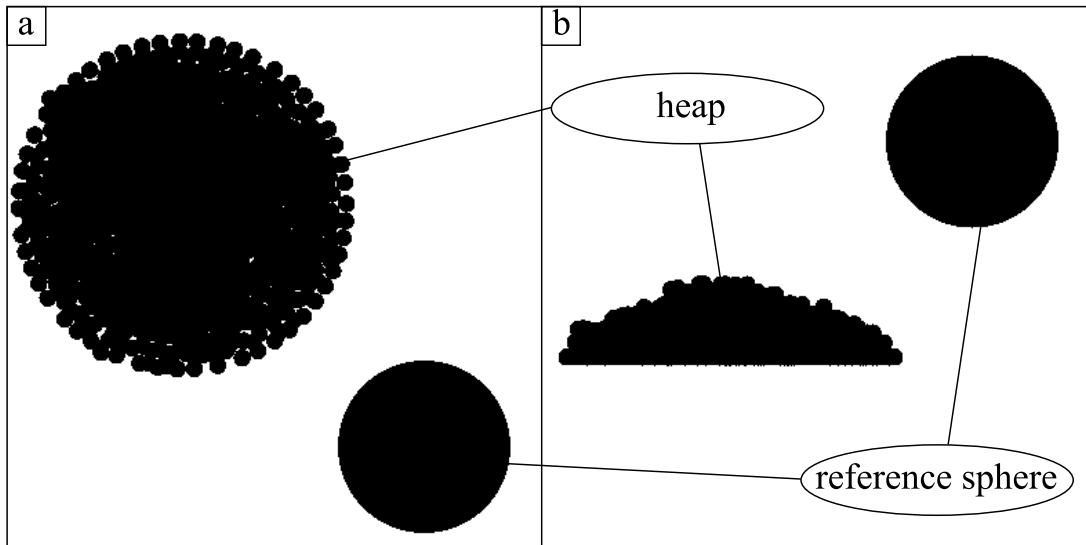


Abbildung 6-1: Die beiden zur Bildverarbeitung erzeugten Screenshots zeigen je eine Drauf- (a) und Seitenansicht (b) des Haufwerks inkl. der Referenzkugel (Abb. aus [Rac-2017b]).

Zur Kalibrierung der zwei bis sechs Zielgrößen wurden fünf bis sieben DEM-Materialmodellparameter eingesetzt; diese waren die Partikeldichte, die Querkontraktionszahl, der Elastizitätsmodul, zwei Reibungskoeffizienten (Partikel-Behälter, Partikel-Partikel), zwei Rollreibungskoeffizienten (Partikel-Behälter, Partikel-Partikel) sowie Kohäsionsenergiegedichten (Partikel-Behälter, Partikel-Partikel) bei kohäsiven Schüttgütern. Als Kontaktmodell wurde Hertz-Mindlin (vgl. Abschnitt 3.1) mit Rollreibung (EPSD2) eingesetzt. Dieses Rollreibungsmodell basiert auf der Arbeit von Iwashita und Oda [Iwa-1998] und addiert ein künstliches Drehmoment als Rollwiderstand. Es hängt von nur einem Parameter ab und berücksichtigt keine viskose Dämpfung [lig-a]. Sofern berücksichtigt, wurden Effekte aus Adhäsion bzw. Kohäsion mittels eines vereinfachten JKR-Modells (Johnson-Kendall-Roberts; SJKR) abgebildet, welches die anziehende Kraft zwischen zwei Partikeln aus deren Überschneidungsfläche und einer zu kalibrierenden Kohäsionsenergiegedichte (in Arbeit pro Volumen) berechnet [lig-b].

Vor dem Kalibrierungsprozess wurde für jedes Schüttgut die Partikelgrößenverteilung diskretisiert. Nicht alle Materialien wurden mit exakt der gemessenen Partikelgrößenverteilung modelliert, da ein hoher Anteil an kleinen Partikeln (Feinanteil) zu einem exorbitanten Aufwand bezüglich der Berechnungszeit zur Folge gehabt hätte. Alle Partikel wurden als Kugeln modelliert, da die parallele Simulation von *multi-sphere clumps* zum Zeitpunkt der Kalibrierung noch nicht in LIGGGHTS implementiert war¹. Die in den DEM-Modellen verwendeten Partikelgrößenverteilungen sind in Tabelle 6-1 aufgelistet.

Zur Kalibrierung wurden zur Rechenzeiterparnis und wegen nur bedingtem Informationszuwinn durch ähnliche Testreihen nicht alle experimentellen Daten eingesetzt. Tabelle 6-2 zeigt eine Übersicht darüber, welche Behältergröße und Hubgeschwindigkeit zur Kalibrierung des entsprechenden Schüttguts herangezogen wurde.

¹ ab Version 3.5.0 (September 2016)

Tabelle 6-1: Partikelgrößenverteilungen in den DEM-Modellen; Kugeldurchmesser, d_i , in mm und Massenanteil, v_i , in Prozent pro Fraktion.

Schüttgut	Fraktionen											
	d_1	v_1	d_2	v_2	d_3	v_3	d_4	v_4	d_5	v_5	d_6	v_6
Braunkohle	8	55	15	20	23	15	30	10				
Holzhack- schnittel	10	15	11,5	30	16	40	25	15				
Kalkstein	15	5	20	10	25	25	27,5	50	40	10		
Koks	17	15	20	40	25	35	35,5	10				
Mainsand	5	20	6	30	7	50						
Maiskörner												
- frisch	5,5	10	6,6	70	7,7	20						
- trocken	5	10	6	70	7	20						
Milchpulver	4	33,3	4,5	33,3	5	33,3						
Steinkohle	10	35	15	50	20	15						
Eisenerz	19	67	25	8	32	8	50	7	75	7	100	3
Kupfererz	15	50	19	30	30	20						

Tabelle 6-2: Zur Kalibrierung verwendete Messdaten und DEM-Modelle.

Schüttgut	d (mm)	100		250			425		600
		v_{Hub} (mm/s)	8	ruckart.	8	142	ruckart.	33	142
Bezeichnung		A1	A2	B1	B2	B3	C1	C2	D
Braunkohle				X	X				X
Holz hackschnitzel							X	X	
Kalkstein							X	X	
Koks				X				X	
Mainsand		X	X						
Maiskörner (frisch)		X			X				
Maiskörner (trocken)		X			X				
Milchpulver		X			X				
Steinkohle									X
Eisenerz									X
Kupfererz									X

6.2 Kalibrierungsrandbedingungen nach Materialien

Je nach Schüttgut wurden andere Parameter und Parametergrenzen für die Kalibrierung definiert. Beispielsweise unterschieden sich die zu erwartenden Partikeldichten teils erheblich und sollten für jedes Schüttgut stets zwischen physikalisch orientierten Grenzen liegen. Außerdem wurde z. B. bei der Kalibrierung von Milchpulver Kohäsion zwischen den Partikeln und Adhäsion zwischen Wand und Partikeln berücksichtigt, was wiederum bei Holzhack-schnitzeln vernachlässigt werden konnte. Die zur Kalibrierung verwendeten Parameter und ihre entsprechenden Ober- und Untergrenzen sind in Tabelle 6-3 zusammengefasst.

Ein DEM-Materialmodellparameter-Satz bestand im Rahmen der hier durchgeführten Kalibrierung aus den Werten für die Partikeldichte, beiden Reibungs- sowie Rollreibungskoeffizienten, dem Elastizitätsmodul und der Querkontraktionszahl. Die Werte für die Kohäsionsenergie-dichte wurden als optional betrachtet, da sie nur für kohäsive Materialien eine Rollen spielten. Neben diesen Parametern werden für einen vollständigen DEM-Parametersatz noch weitere material- bzw. materialpaarungsspezifische Werte benötigt. In Tabelle 6-4 sind zum einen die DEM-Parameter aufgelistet, die gesetzt wurden, wenn der entsprechende Parameter nicht zur Kalibrierung verwendet wurde und zum anderen diejenigen, die ständig konstant waren. Bei letzteren Parametern handelte es sich um die Stoßzahlen zwischen Partikel und Partikel sowie Partikel und Wand. Im Rahmen der durchgeführten DEM-Berechnungen war ihr Einfluss vernachlässigbar.

Tabelle 6-3: Parameter und Parametergrenzen für die Kalibrierung. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R,PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R,PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand.

Schüttgut	ρ_P (kg/m ³)	$m\mu_{PP}$ (-)	$m\mu_{PW}$ (-)	$\mu_{R,PP}$ (-)	$\mu_{R,PW}$ (-)	E (10 ⁶ N/m ²) (-)	ν (-)	γ_{PP} (10 ³ J/m ³)	γ_{PW} (10 ³ J/m ³)
Braunkohle	1200	0,2	0,2	0,05	0,05				
	1600	0,9	0,9	1,3	1,3				
Holzhackschnittel	200	0,2	0,2	0,05	0,05				
	350	1	1	1,3	1,3				
Kalkstein	1700	0,2	0,2	0,05	0,05				
	2500	1	1	1,3	1,3				
Koks	900	0,2	0,2	0,05	0,05				
	1400	0,9	0,9	1,3	1,3				
Mainsand	2200	0,12	0,2	0,05	0,05	6	0,17		
	2800	0,6	0,6	0,9	0,9	7	0,4		
Maiskörner (frisch)	1100	0,2	0,2	0,05	0,05				
	1600	0,9	0,9	1,3	1,3				
Maiskörner (trocken)	1000	0,12	0,2	0,05	0,05				
	1500	1,3	1,3	1,3	1,3				
Milchpulver	800	0,12	0,2	0,05	0,05	6	0,17	0	0
	1500	1,3	1,3	1,3	1,3	7	0,4	0	30
Steinkohle	1200	0,2	0,2	0,05	0,05				
	1500	0,9	0,9	1,3	1,3				
Eisenerz	2500	0,2	0,2	0,05	0,05				
	4500	1	1	1,3	1,3			5	5
Kupfererz	3800	0,2	0,2	0,05	0,05			40	40
	4200	1,5	1,5	1,3	1,3				

Tabelle 6-4: Werte der nicht zur Kalibrierung eingesetzten bzw. ständig konstant gehaltenen DEM-Parameter.

DEM-Parameter	stets konstant?	konstanter Wert
Elastizitätsmodul	nein	$6 \cdot 10^6 \text{ N/m}^2$
Querkontraktionszahl	nein	0,3
Stoßzahl Partikel/Partikel	ja	0,6
Stoßzahl Partikel/Wand	ja	0,69

6.3 Ergebnisse

Für alle betrachteten Schüttgüter konnten DEM-Parametersätze gefunden werden, die alle jeweiligen Vorgaben zufriedenstellend erfüllen. Es zeigte sich, dass das Kalibrierungsverfahren zuverlässig valide Parametersätze identifizierte und dabei selbst für die simultane Kalibrierung von sechs Zielgrößen aus drei DEM-Modellen nur eine relativ niedrige Anzahl an DEM-Berechnungsläufen nötig war.

6.3.1 Kalibrierte Materialparameter und Kalibrierungsqualität

Tabelle 6-5 zeigt eine Übersicht über die durch das Kalibrierungsverfahren bestimmten Materialparametersätze für alle elf untersuchten Schüttgüter. Bei sechs der kalibrierten Schüttgüter liegt die kalibrierte Partikeldichte am oberen Ende der vorgegebenen Intervallgrenzen. Die entsprechende Partikeldichte der restlichen Schüttgüter lag stets um den Mittelwert des jeweiligen Intervalls. Es kann angenommen werden, dass die Partikeldichten aufgrund der Einbeziehung des Rayleigh-Zeitschritts systematisch in die Mitte bzw. obere Hälfte ihrer Intervalle fielen

Die Differenzen zwischen Schüttgut- bzw. Schüttwinkelmessung und den Ergebnissen aus den kalibrierten DEM-Modellen sind in Tabelle 6-6 aufgelistet. Über alle Schüttgüter betrachtet liegen die Abweichungen zwischen Computermodell und Experiment innerhalb einer Spanne von circa $\pm 20\%$. Der Mittelwert der absoluten Differenzen beträgt 9,6%. Teilt man die Differenzen aus Tabelle 6-6 in Schüttwinkel und Schüttdichte ein, so ergeben sich mittlere relative Abweichungen von $-8,8\%$ bzw. $7,9\%$. Die Kalibrierungsergebnisse für den Schüttwinkel waren also geringfügig niedriger als der Zielwert, wohingegen die Schüttdichte im Mittel etwas zu hoch kalibriert wurde. Letzteres ist auf die Berücksichtigung des Rayleigh-Zeitschritts bei der Kalibrierung zurückzuführen und deckt sich mit der Erfahrung aus der Entwicklung des Kalibrierungsverfahrens [Rac-2017b].

Tabelle 6-6: Vergleich zwischen den Messdaten und den Ergebnissen der kalibrierten DEM-Modelle. Zielwerte sind in Winkelgrad für den Schüttwinkel (sw) und (kg/m^3) für die Schüttdichte (sd); Bezeichnung des Versuchsaufbaus laut Tabelle 6-2.

Schüttgut	Bezeichnung	Zielgröße	Zielwert	DEM-Ergebnis	Diff. (%)
Braunkohle	B1	sw	33	33.1	0.3
		sd	775	858	10.6
	B2	sw	31	28.7	-7.4
		sd	775	858	10.6
	C2	sw	30	28.4	-5.5
		sd	819	878	7.2
Holzhackschnitzel	C2	sw	35	29.6	-15.3
	C2	sd	141	157	11.5
	C1	sw	38	32.3	-15.1
	C1	sd	141	157	11.5
Kalkstein	C1	sw	31	31.9	2.7

Tabelle 6-6 – fortgesetzt: Vergleich zwischen den Messdaten und den Ergebnissen der kalibrierten DEM-Modelle. Zielwerte sind in Winkelgrad für den Schüttwinkel (sw) und (kg/m³) für die Schüttdichte (sd); Bezeichnung des Versuchsaufbaus laut Tabelle 6-2.

Schüttgut	Bezeichnung	Zielgröße	Zielwert	DEM-Ergebnis	Diff. (%)
	C2	sd	1287	1343	4.3
		sw	26	26	0
		sd	1287	1343	4.3
Koks	B1	sw	33	36.5	10.5
		sd	566	646	14.1
	C2	sw	21	18.6	-11.3
		sd	637	667	4.7
Mainsand	A1	sw	31	31.2	0.6
		sd	1570	1570	0
	A2	sw	23	21.6	-5.9
		sd	1570	1570	0
Maiskörner (frisch)	A1	sw	30	30.2	0.6
		sd	651	760	16.8
	B2	sw	22	21.5	-2.4
		sd	706	780	10.5
Maiskörner (trocken)	A1	sw	29	28.5	-1.9
		sd	709	764	7.7
	B2	sw	16	13.7	-14.1
		sd	725	788	8.7
Milchpulver	A1	sw	37	30.7	-17.1
		sd	507	598	17.9
	B2	sw	36	15.3	-57.4
		sd	543	612	12.6
Steinkohle	D	sw	31	28.6	-7.8
		sd	846	878	3.8
Eisenerz	D	sw	38	33.9	-10.8
		sd	2200	2457	11.7
Kupfererz	D	sw	43	35.2	-18.1
		sd	2850	2558	-10.2

Es kann festgehalten werden, dass das entwickelte Kalibrierungsverfahren die Zielwerte für den Schüttwinkel und die Schüttdichte für eine Vielzahl von verschiedenen Schüttgütern mit einer zufriedenstellenden Übereinstimmung mit Messdaten kalibrieren konnte. Bei der Bewertung der Qualität der Kalibrierungsergebnisse muss zudem drauf geachtet werden, dass die gemessenen Zielgrößen zum Teil erheblichen Schwankungen unterliegen können. In diesem Zusammenhang sei die Relation zwischen Mittelwerte und Standardabweichung einiger der in Tabelle 5-6 auf Seite 38 aufgelisteten Schüttgüter verwiesen.

Tabelle 6-5: Ergebnisse für die Materialparameter aus den Kalibrierungsprozessen. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R,PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R,PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand.

Schüttgut	Kalibrierte Parameter									
	ρ_P (kg/m ³)	$m\mu_{PP}$ (-)	$m\mu_{PW}$ (-)	$\mu_{R,PP}$ (-)	$\mu_{R,PW}$ (-)	E (10 ⁶ N/m ²)	ν (-)	γ_{PP} (10 ³ J/m ³)	γ_{PW} (10 ³ J/m ³)	
Braunkohle	1500	0,90	0,43	1,08	1,3					
Holzhackschnittel	277	0,83	0,57	0,71	0,41					
Kalkstein	2390	1,0	0,94	0,47	0,35					
Koks	1170	0,72	0,2	0,95	1,29					
Kupfererz	4160	1,17	1,06	1,3	0,06		0,4	40	16,93	
Mainsand	2800	0,60	0,39	0,61	0,05	6				
Maiskörner (frisch)	1370	0,69	0,31	0,54	0,54					
Maiskörner (trocken)	1390	0,85	0,2	0,53	0,87					
Milchpulver	1140	1,29	0,2	0,88	0,05	6	0,33	27,5	19,2	
Steinkohle	1490	0,87	0,87	0,72	0,05					
Eisenerz	3810	0,92	1,0	1,29	0,35					

6.3.2 Effizienz des Kalibrierungsverfahrens

Der Berechnungsaufwand für das entwickelte Kalibrierungsverfahren richtet sich maßgeblich nach der Berechnungsdauer für die zu kalibrierenden DEM-Modelle. Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf die Betrachtung von absoluten Berechnungsdauern verzichtet, da diese vor allem von den gewählten Modellierungsansätzen, Materialparametern sowie der eingesetzten Hardware abhängen. Um die Effizienz des Kalibrierungsverfahrens zu bewerten, wurde die Anzahl der gestarteten DEM-Berechnungsläufe herangezogen [Rac-2017b]. Unabhängig von Faktoren wie der eingesetzten Hardware kann vorausgesetzt werden, dass ein Kalibrierungsvorgang immer dann effizienter ist, wenn weniger DEM-Berechnungsläufe zur erfolgreichen Kalibrierung der Materialmodellparameter nötig sind.

Die in dieser Arbeit verfügbaren Daten zur Effizienz des Kalibrierungsverfahrens sind in Tabelle 6-7 zusammengefasst. Es waren pro DEM-Modell zwischen 37 und 67 DEM-Berechnungsläufe nötig. Systematische Abhängigkeiten zwischen den verschiedenen Kenngrößen konnten nicht identifiziert werden. Es muss jedoch beachtet werden, dass die hier vorliegende Datenmenge als zu gering anzusehen ist, als dass signifikante Effekte hätten beschrieben werden können; dies war kein Ziel dieser Studie. Weitere Informationen zur Effizienz des Kalibrierungsverfahrens können Abschnitt 4.4 entnommen werden.

Tabelle 6-7: Kennwerte zur Effizienz des Kalibrierungsverfahrens; n_{pMod} : Anzahl der DEM-Berechnungsläufe pro Modell, n_{Par} : Anzahl der zur Kalibrierung eingesetzten Parameter, n_{Mod} : Anzahl der zur Kalibrierung eingesetzten DEM-Modelle.

Schüttgut	n_{pMod}	n_{Par}	n_{Mod}
Braunkohle	48	5	3
Eisenerz	48	5	1
Holz hackschnitzel	49	5	2
Kalkstein	48	5	2
Koks	50	5	2
Kupfererz	53	7	1
Mainsand	67	7	2
Maiskörner (frisch)	37	5	2
Maiskörner (trocken)	57	5	2
Milchpulver	42	9	2
Steinkohle	46	5	1

7 Zusammenfassung der Forschungsergebnisse und Ausblick

Die für das Projekt gesteckten Ziele wurden erreicht. Dieses Kapitel fasst die Hauptergebnisse zusammen gibt einen Ausblick auf die mögliche industrielle Anwendung des entwickelten Kalibrierungsverfahrens.

7.1 Zusammenfassung

Das Ziel des Projekts DEM-Schüttgutdatenbank war die Entwicklung eines einheitlichen Vorgehens zur Kalibrierung von DEM-Materialparametern. Insgesamt wurden 11 industrierelevante Schüttgüter der Messung von charakteristischen Schüttguteigenschaften unterzogen. Zur Messung kamen unter anderem eine Translationsscherzelle und ein im Rahmen des Projekts entwickelter Versuchsstand zur Messung von Schüttdichte und Schüttwinkel zum Einsatz. Die gemessenen Daten dienten als Grundlagen für den Praxistest einer eigens entwickelten automatisch ablaufenden Methodik zur Kalibrierung von DEM-Material- und Kontaktmodellparametern, welche erfolgreich verifiziert und angewandt wurde. Zusätzlich konnte demonstriert werden, dass die Einbindung des *Rayleigh*-Zeitschritts in den Optimierungsvorgang systematisch zu größeren Simulationszeitschritten führt und ein geeignetes Mittel ist, um die Lösungsvielfalt bei der Kalibrierung von DEM-Schüttgutmodellen zu einzuschränken und schneller valide Parametersätze zu identifizieren [Rac-2017b].

Im Anhang dieser Arbeit werden ab Seite 63 die durch den jeweiligen Kalibrierungsprozess ermittelten DEM-Parameter und die eingesetzten Partikelgrößenverteilungen gesammelt für eine Datenbank aufgeführt. Sie können im Hinblick auf Schüttdichte und Schüttwinkel gemäß den zu Grunde liegenden DEM-Modellen direkt zur Simulation eingesetzt werden. Wie von Rackl und Hanley [Rac-2017b] beschrieben, ist die Kalibrierung nur auf Basis von Schüttdichte und Schüttwinkel jedoch oft nicht ausreichend. Um ein DEM-Schüttgutmodell für eine Vielzahl von Anwendungsfällen vorzubereiten, müssen zusätzliche Schüttgutkenngößen zur Kalibrierung hinzugefügt werden. Insbesondere führt die Veränderung der Partikelgrößenverteilung, z. B. das Skalieren der Partikelgrößen, dazu, dass das erneute Kalibrieren von DEM-Material- oder Kontaktparametern nötig werden kann [Coe-2017]. Für diesen Zweck wird der Quellcode des automatischen Kalibrierungsverfahrens unter einer *open-source*-Lizenz veröffentlicht und der Wissenschaft und Wirtschaft zur freien Verwendung und Weiterentwicklung verfügbar gemacht.

7.2 Nutzen und industrielle Anwendungsmöglichkeiten

Die Kalibrierung von DEM-Parametern ist der größte Faktor, der den industriellen Einsatz der DEM limitiert [Mar-2015]. Durch die Entwicklung eines methodischen Vorgehens zur Ka-

librierung wurde eine wichtige Grundlage für die Vereinfachung des Kalibrierungsprozesses geschaffen. Die Funktionalität, Robustheit, Nützlichkeit und Effizienz des Kalibrierungsverfahrens wurde in mehreren Studien beschrieben, überprüft und erfolgreich verifiziert [Rac-2016d; Rac-2017c; Rac-2017b]. Das Verfahren ist im Sinne eines modularen Aufbaus erweiterbar und lässt sich durch die Veröffentlichung des Quellcodes an verschiedenste Bedürfnisse anpassen. Der konsequente Einsatz von frei verfügbarer Software ermöglicht einer breiten Masse von Interessierten den Zugang, die Anwendung sowie die Anpassung und Erweiterung des Verfahrens, mit einem wissenschaftlich verifizierten Code als Grundlage.

Das Kalibrierungsverfahren ermöglicht es auch unerfahrenen Anwendern DEM-Schüttgutparameter treffend einzustellen. Gerade bei komplexen Kalibrierungsaufgaben ist zu erwarten, dass quantitativ und qualitativ bessere Parametersets als bei der manuellen Kalibrierung identifiziert werden.

Durch die Einbeziehung des *Rayleigh*-Zeitschritts werden Parametersätze gesucht, die neben der Erfüllung der Zielgrößen auch einen möglichst hohen Simulationszeitschritt ermöglichen. Bereits geringfügig höhere Simulationszeitschritte, können bei den langen Berechnungszeiten der DEM merkliche Einsparungen bei der Simulationszeit hervorbringen.

Ein weiterer großer Vorteil des Verfahrens für die industrielle Anwendung ist dessen automatischer Ablauf. Dem zunächst etwas höheren Aufwand zum Automatisieren der Ergebnisauswertung stehen sehr hohe zeitliche Vorteile beim Kalibrierungsprozess gegenüber. Ist ein DEM-Modell erst einmal automatisch auswertbar, kann es für alle Versuche mit dem Versuchsaufbau wiederverwendet werden. Durch den automatischen Ablauf des Kalibrierungsverfahrens wird der DEM-Anwender während der Parametersuche spürbar entlastet und die Fehlerrate reduziert. Aufgrund der zum Teil sehr langen Berechnungszeiten von DEM-Modellen, sind zur Kalibrierung üblicherweise mehrere Tage oder Wochen zu planen. Der Anwender wird kann sich sodann während dieser Zeit anderen Aufgaben widmen, da die Kalibrierung nicht ständig seine volle Aufmerksamkeit erfordert.

Der Nutzen des Kalibrierungsverfahrens kommt insbesondere in drei Bereichen zum Tragen:

- Vereinheitlichung von wiederkehrenden Kalibrierungsaufgaben in Unternehmen, die die DEM einsetzen. Hier treten die zeitlichen Vorteile besonders in den Vordergrund.
- Einstellen von DEM-Schüttgutparametern unter schwierigen Randbedingungen, wie z. B. einer Vielzahl von Zielgrößen und DEM-Modellen, wenn möglichst verlässliche Simulationsergebnisse benötigt werden; beispielsweise zur Vorhersage von Belastungen von Anlagenbaugruppen bzw. -einzelteilen für Unternehmen aus der Fördertechnik sowie dem Anlagenbau.
- Der Kalibrierungsprozess kann von weniger erfahrenen DEM-Anwendern angestoßen und überwacht werden. Erfahrenes Personal, welches üblicherweise für die Kalibrierung eingesetzt wird, steht für andere Aufgaben zur Verfügung.

7.3 Ausblick

In einem aktuellen (2017) Übersichtsartikel zeigt Coetzee den Stand der Technik und Wissenschaft und die vielen noch ungelösten Probleme bezüglich der Kalibrierung von DEM-Parametern auf. Dies zeigt, dass das Thema der Kalibrierung auch weiterhin aktuell ist und großer Bedarf an einheitlichen Messverfahren zur Charakterisierung von Schüttgütern sowie Standards zur Kalibrierung besteht [Coe-2017]. Bestehende Messverfahren sollten insbesondere hinsichtlich ihrer Skalierbarkeit für verschiedene Partikelgrößen und der Anwendbarkeit auf kohäsive Schüttgüter hin überprüft und entsprechend verbessert werden.

Zur effektiveren Gestaltung des Kalibrierungsverfahrens sollten weitere Untersuchungen angestellt werden. Insbesondere die Auswahl der Optimierungsstrategie hat einen sehr großen Einfluss auf die Anzahl der benötigten DEM-Berechnungsläufe. Viele der Berechnungsläufe sind auf die Berechnung von Gradienten zurück zu führen und ihre Anzahl könnte durch den Einsatz von anderen Optimierungsalgorithmen unter Umständen signifikant verringert werden.

7.4 Verwendung der zugewiesenen Mittel

Um eine Vorauswahl an Schüttgütern zu generieren, wurden die am projektbegleitenden Ausschuss teilnehmenden Unternehmen nach für sie relevanten Schüttgütern befragt. Aus den genannten Materialien wurden solche mit potenziell gefährlichen oder gesundheits-schädlichen Eigenschaften entfernt und Mehrfachnennungen zusammengeführt. Aus der so entstandenen Liste wurden im Rahmen der ersten Sitzung des projektbegleitenden Ausschusses elf industrielle Schüttgüter zur weiteren Untersuchung empfohlen und ausgewählt: Mainsand, Maiskörner (getrocknet), Maiskörner (erntefrisch), Holzhackschnitzel, Koks, Milchpulver, Kalkstein, Braunkohle, Steinkohle, Eisenerz (Daten aus Untersuchungsbericht; keine eigenen Messungen), Kupfererz (Daten aus Untersuchungsbericht; keine eigenen Messungen).

Um die ausgewählten Schüttgüter näher beschreiben zu können, wurden mehrere Messverfahren zur Charakterisierung ausgewählt. Es wurden der Schüttwinkel, Schüttdichte, der Reibungskoeffiziente Partikel-Stahl, der Feuchtigkeitsgehalt und die Partikelgrößenverteilung der Schüttgüter gemessen. Zur Bestimmung des Schüttwinkels und der Schüttdichte wurde ein kombinierter Versuchsaufbau konstruiert, mit dessen Hilfe auch Schüttgüter mit großen Partikelgrößen untersucht werden konnten. Die Messung und Auswertung von Schüttgütereigenschaften erforderte den Einsatz von wissenschaftlichem Mitarbeitern, welche die Versuchsplanung durchführten, die Durchführung durch wissenschaftliche Hilfskräfte betreuten und die Messdaten auswerten und aufbereiteten. Diese Daten dienten als Grundlagen für die abschließende Kalibrierung der DEM-Schüttgutparameter der untersuchten Schüttgüter.

Zur Simulation der Materialtests mussten die entsprechenden Versuchsaufbauten mittels der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) modelliert werden. Dabei wurden die Geometrien durch Computer-Aided-Design (CAD) erstellt und für die DEM vernetzt. Des Weiteren musste die

Ergebnisauswertung für diese Modelle für den Einsatz im Kalibrierungsverfahren automatisiert werden. Dabei kamen unter anderem optische Messmethoden zum Einsatz, welche fortgeschrittene Kenntnisse auf dem Gebiet der digitalen Bildverarbeitung voraussetzten und deshalb dem Einsatz eines wissenschaftlichen Mitarbeiters bedurften. Gleiches gilt für die qualitätsbezogene Absicherung des Bildverarbeitungsalgorithmus, um Fehler bei der Datenauswertung zu vermeiden.

Um DEM-Materialparameter zu kalibrieren, wurden die realen Versuchsaufbauten mittels DEM modelliert. Dieser Schritt umfasste neben der eigentlichen Modellierung mit der DEM-Software LIGGGHTS auch die Verifizierung und Parametrisierung der Modelle. Das Ziel war die Entwicklung von schnell zu simulierenden DEM-Modellen, die die reproduzierbare Auswertung der interessierenden Zielgrößen Schüttwinkel und Schüttdichte ermöglichten. Der Aufbau von hochgradig parametrisierten DEM-Modellen setzte Erfahrung mit der Anwendung der DEM bzw. und speziell der DEM-Software LIGGGHTS voraus und wurde von einem wissenschaftlichen Mitarbeiter bearbeitet.

Um den Aufwand zur Kalibrierung von DEM-Schüttgutparametern nachhaltig und signifikant zu erleichtern, wurde ein Verfahren basierend auf Methoden der statistischen Versuchsplanung entwickelt, mit dessen Hilfe die Kalibrierung automatisch von einer Software gesteuert wird. Die Implementierung erfolgte mittels der DEM-Software LIGGGHTS, welche durch das Programm GNU Octave gesteuert wird. GNU Octave gibt dabei die zu testenden Materialparameter-Kombinationen vor und bildet aus den entsprechenden Messergebnisse ein Metamodell der DE-Modelle. Diese Metamodelle werden in einem nächsten Schritt eingesetzt, um durch numerische Optimierung viel versprechende Materialparameter-Sätze zu bestimmen, welche sodann an den DE-Modellen validiert werden. In diesem letzten Schritt wird die Qualität der Ergebnisse ebenfalls durch Einsatz eines Optimierungsalgorithmus weiter verbessert. Vor der Festlegung auf eine Methode zur Metamodellbildung mussten Vorabuntersuchungen durchgeführt werden, um die Leistungsfähigkeit und Flexibilität der in Frage kommenden Verfahren zu bewerten und Anwendungserfahrung zu sammeln. Ein wissenschaftlicher Mitarbeiter war mit der Konzeption und Implementierung des Kalibrierungsverfahrens beschäftigt. Die Implementierung von einfacheren Programmstrukturen konnte an wissenschaftliche Hilfskräfte übertragen werden. Ein wissenschaftlicher Mitarbeiter wurde benötigt, um die Implementierung von komplexen Routinen zu übernehmen sowie die korrekte Funktionsweise des Kalibrierungsverfahrens zu verifizieren und gezielt programmtechnische Schwachstellen aufzudecken.

Bevor für die untersuchten Schüttgüter DEM-Parameter mittels des Kalibrierungsverfahrens gesucht werden konnten, mussten die Partikelgrößen bzw. die Partikelgrößenverteilung für die DEM-Simulation festgelegt werden. Dieser wichtige Schritt hatte einen großen Einfluss auf die Berechnungsdauer der Modelle und wurde in Abstimmung zwischen zwei wissenschaftlichen Mitarbeitern vorgenommen. Beispielsweise wäre es nicht zielführend, Pulver mit ihrer realen Partikelgrößenverteilung zu diskretisieren, da sich sonst, je nach Verfügbarkeit von Berechnungsleistung, Berechnungsdauern von mehreren Monaten ergeben hätten. Nach Festlegung der Partikelgrößenverteilungen wurde das im Projekt entwickelte Kalibrierungsverfahren eingesetzt, um DEM-Schüttgutparameter zu bestimmen.

Kurz vor Abschluss des Projekts wurde für Unternehmen aus dem Projektbegleitenden Ausschuss ein technischer Termin zur Anwendung des Kalibrierungsverfahrens abgehalten, bei

dem unter anderem gezeigt wurde, wie eigene DEM-Modelle in das Verfahren implementiert werden können.

Die mittels des automatischen Kalibrierungsverfahrens ermittelten DEM-Schüttgutparameter für die ausgewählte Industrie-Schüttgüter wurden zusammengefasst und werden zusammen mit dem Forschungsbericht dieses Projekts veröffentlicht. Während der Projektlaufzeit erfolgte die fortlaufende Präsentation von Forschungsergebnissen auf nationalen und internationalen Konferenzen sowie in wissenschaftlichen Zeitschriften.

7.4.1 Wissenschaftlich-technisches Personal (Einzelansatz A.1 des Finanzierungsplans)

Am Lehrstuhl fml wurden zwei wissenschaftliche Mitarbeiter eingesetzt. Ein Mitarbeiter wurde mit einem Umfang von 18 Monaten eingesetzt und ein weiterer Mitarbeiter mit einem Umfang von 6 Monaten. Die Planung, Konzeption und Umsetzung der Arbeiten im Projekt erforderte zwingend fachspezifische Kenntnisse und Fertigkeiten, die einen Hochschulabschluss (Master, Diplom) bedingen. Insbesondere die Implementierung, Verifikation und initiale Anwendung des Kalibrierungsverfahrens mittels statistischen Methoden, Regressionsberechnung, Kriging sowie der DEM und die Planung und Durchführung von Versuchen im Bereich der Schüttgut-Technik (z.B. Scherzelle), stellte sehr hohe Anforderungen an das Personal. Darüber hinaus wurden studentische und wissenschaftliche Hilfskräfte im Umfang von 24 Personenmonaten (21,5 Stunden pro Woche) beschäftigt, um kleinere Teilaspekte des Projekts zu bearbeiten und den wissenschaftlichen Mitarbeitern zuzuarbeiten.

Abbildung 7-1 zeigt eine Übersicht über die eingesetzten Personalressourcen für das Forschungsprojekt. Der Ablauf des Projekts war planmäßig.

Arbeitsplan		Zeitplan																								Personal			
		1												2												MM			
Jahr	Monat	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	wiss. MA	Stud. HK		
AP 1	Auswahl der Schüttgüter	■																								1	1		
AP 2	Festlegung und Durchführung experimenteller Untersuchungen zur Bestimmung der Schüttguteigenschaften		■	■	■	■																				4	4		
AP 3	Erstellung geeigneter CAD-Modelle und DEM-Partikel					■																				1	1		
AP 4	Entwicklung geeigneter DEM-Versuche zur Adaptierung des Realgutverhaltens						■	■	■	■																3	3		
AP 5	Entwicklung eines Kalibrierverfahrens und Kalibrierung der Kontakt- und Materialparameter								■	■	■	■													5	5			
AP 6	Skalierung der Korngrößenmodelle zur Rechenzeitsparung															■	■	■	■	■	■					6	6		
AP 7	Konzeption der Datenbank und Hinterlegung der Werte																					■	■			2	2		
AP 8	Dokumentation																							■	■			2	2
		Summe																								24	24		

Abbildung 7-1: Arbeitspakete und eingesetztes Personal.

7.5 Ergebnistransfer in die Wirtschaft

7.4.2 Geräte (Einzelansatz B des Finanzierungsplans)

Geräte waren in diesem Projekt nicht vorgesehen.

7.4.3 Leistungen Dritter (Einzelansatz C des Finanzierungsplans)

Leistungen Dritter waren in diesem Projekt nicht vorgesehen.

7.5 Ergebnistransfer in die Wirtschaft

Tabelle 7-1 listet alle im Projekt durchgeführten Maßnahmen zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft auf.

Tabelle 7-1: Übersicht über Maßnahmen zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft.

Maßnahme	Ziel	Rahmen	Zeitraum
Maßnahme A: Projektbegleitender Ausschuss PA	Der Projektbegleitende Ausschuss (PA) stellt ein tragendes Element in der Konzeption dieses Forschungsvorhabens dar. Er sichert den engen Praxisbezug und sorgt gleichzeitig für eine frühzeitige Weitergabe von Untersuchungsergebnissen bereits während der Projektlaufzeit.	A1 Vorstellung des Projekts und Einbringung bedarfsbezogener Anforderungen der KMU	19.05.2015
		A2 Berichterstattung über den Projektfortschritt und Evaluierung der Ergebnisse aus AP1-4	12.02.2016
		A3 Berichterstattung über die Messergebnisse aus der zweiten Schüttgutcharge und Stand der Arbeit am Kalibrierungsverfahren	19.07.2016
		A4 Abschlusspräsentation und Diskussion der erzielten Ergebnisse	16.11.2017
Maßnahme B: Vorträge	Präsentation von (Teil-) Ergebnissen des Projekts auf Fachtagungen vor Industrie und Wissenschaft	Siehe „Vorträge“ weiter unten.	
Maßnahme C: Internetdarstellung	Elektronische Verbreitung der Forschungsinhalte und -ergebnisse, Gewinnung weiterer interessierter Unternehmen	C1 Vorstellung des Projekts auf der Homepage der Forschungsvereinigung IFL (www.ifl-forschung.de)	seit 10.07.2015
		C2 Vorstellung des Projekts über den Newsletter des Logistik-Innovations-Zentrums liz des Lehrstuhls fml (Fokus KMU)	24.11.2015
		C3 Internetauftritt des Lehrstuhls fml	seit April 2015

7.5 Ergebnistransfer in die Wirtschaft

Maßnahme Messepräsentationen	D:	Ergebnistransfer in die Wirtschaft	D1 Vorstellung des Projekts und der For- schungsergebnisse auf dem „Deutschen Materialfluskongress“	durch Posterprä- sentation
Maßnahme Veröffentlichun- gen	E:	Präsentation von (Teil-) Ergebnissen des Pro- jekts in Fachzeitschrif- ten	Siehe „Zeitschriftenbei- träge“ bzw. „Konferenz- beiträge “ weiter unten.	
Maßnahme Übernahme die Lehre	F:	Einbringung der erar- beiteten Ergebnisse in den Lehrbetrieb	F1 Mitarbeit studentischer Hilfskräfte F2 Studienarbeiten Arbeit 1: Erstel- lung eines DEM- Materialmodells und simulative Untersu- chung des Einflusses von Rührwerks- und Schneckenparame- tern Arbeit 2: Optimizing the energy consump- tion of an agitator transporting wood chips Arbeit 3: Studie zur 3D-gestützten Ana- lyse von Schütthaufen Arbeit 4: Experimente zur Bestimmung der Oberflächenform von Schüttungen	seit Projekt- start waren durch- gehend stud. HK beschäftigt
Maßnahme Ergebnistransfer in die Industrie	G:	Unterweisung von Industrieunternehmen in die Anwendung des Kalibrierungsverfah- rens	G1 Seminar mit Teil- nehmern aus der In- dustrie in Garching	21.11.2016

Im Projekt entstandene Veröffentlichungen

Zeitschriftenbeiträge

- [Rac-2017b] Rackl, M.; Hanley, K. J.: “A methodical calibration procedure for discrete element models”. In: *Powder Technology* 307 (2017), S. 73–83. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.11.048.

Konferenzbeiträge

- [Rac-2016d] Rackl, M.; Görnig, C. D.; Hanley, K. J.; Günthner, W. A.: “Efficient calibration of discrete element material model parameters using Latin hypercube sampling and Kriging”. In: *Proceedings of ECCOMAS 2016*. Hrsg. von Papadrakakis, M.; Papadopoulos, V.; Stefanou, G.; Plevris, V. Bd. 2. Athen: 2016, S. 4061–4072.
- [Rac-2016e] Rackl, M.; Günthner, W. A.: “Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern”. In: *21. Fachtagung Schüttgutördertechnik*. Hrsg. von Günthner, W. A.; Fottner, J.; Katterfeld, A.; Krause, F. Garching: 2016, S. 143–151.
- [Rac-2017a] Rackl, M.; Grötsch, F. E.; Günthner, W. A.: “Angle of repose revisited: When is a heap a cone?” In: *Powders & Grains :8th International Conference on Micromechanics of Granular Media*. 2017, Accepted contribution.
- [Rac-2017c] Rackl, M.; Hanley, K. J.; Günthner, W. A.: “Verification of an automated work flow for discrete element material parameter calibration”. In: *Proceedings of the 7th international conference on discrete element methods*. Hrsg. von Li, X.; Feng, Y.; Mustoe, G. Springer Proceedings in Physics. Springer Verlag, Singapore, Singapur: 2017, S. 201–208. URL: <http://link.springer.com/book/10.1007/978-981-10-1926-5/page/2>.

Vorträge

- [Rac-2016a] Rackl, M.: Efficient calibration of discrete element material model parameters using Latin hypercube sampling and Kriging: VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2016). Chersonissos, Griechenland, 10. Juni 2016.
- [Rac-2016b] Rackl, M.: Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern: 21. Fachtagung Schüttgutördertechnik. Garching, 13. Okt. 2016.
- [Rac-2016c] Rackl, M.: Verification of an automated work flow for discrete element material parameter calibration: The 7th International Conference on Discrete Element Methods (DEM7). Dalian, China, 4. Aug. 2016.

A Anhang

Tabelle 1-1 enthält eine Übersicht über die kalibrierten DEM-Schüttgutparameter. Die dabei verwendeten Partikelgrößenverteilungen sind in Tabelle 1-2 aufgelistet.

Tabelle 1-1: Ergebnisse für die Materialparameter aus den Kalibrierungsprozessen. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R,PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R,PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand.

Schüttgut	Kalibrierte Parameter									
	ρ_P (kg/m ³)	$m\mu_{PP}$ (-)	$m\mu_{PW}$ (-)	$\mu_{R,PP}$ (-)	$\mu_{R,PW}$ (-)	E (10 ⁶ N/m ²)	ν (-)	γ_{PP} (10 ³ J/m ³)	γ_{PW} (10 ³ J/m ³)	
Braunkohle	1500	0,90	0,43	1,08	1,3					
Holzhackschnitze	277	0,83	0,57	0,71	0,41					
Kalkstein	2390	1,0	0,94	0,47	0,35					
Koks	1170	0,72	0,2	0,95	1,29					
Kupfererz	4160	1,17	1,06	1,3	0,06			40	16,93	
Mainsand	2800	0,60	0,39	0,61	0,05	6	0,4			
Maiskörner (frisch)	1370	0,69	0,31	0,54	0,54					
Maiskörner (trocken)	1390	0,85	0,2	0,53	0,87					
Milchpulver	1140	1,29	0,2	0,88	0,05	6	0,33	27,5	19,2	
Steinkohle	1490	0,87	0,87	0,72	0,05					
Eisenerz	3810	0,92	1,0	1,29	0,35					

Tabelle 1-2: Partikelgrößenverteilungen in den DEM-Modellen; Kugeldurchmesser, d_i , in mm und Massenanteil, v_i , in Prozent pro Fraktion.

Schüttgut	Fraktionen											
	d_1	v_1	d_2	v_2	d_3	v_3	d_4	v_4	d_5	v_5	d_6	v_6
Braunkohle	8	55	15	20	23	15	30	10				
Holzhack-												
schnitzel	10	15	11,5	30	16	40	25	15				
Kalkstein	15	5	20	10	25	25	27,5	50	40	10		
Koks	17	15	20	40	25	35	35,5	10				
Mainsand	5	20	6	30	7	50						
Maiskörner												
- frisch	5,5	10	6,6	70	7,7	20						
- trocken	5	10	6	70	7	20						
Milchpulver	4	1/3	4,5	1/3	5	1/3						
Steinkohle	10	35	15	50	20	15						
Eisenerz	19	67	25	8	32	8	50	7	75	7	100	3
Kupfererz	15	50	19	30	30	20						

Abbildungsverzeichnis

3-1:	Schematische Darstellung des Hertz-Mindlin-Kontaktmodells.	6
4-1:	Ablaufschema des Kalibrierungsverfahrens.	14
4-2:	Schematischer Ablauf des Materialtests zur Messung von Schüttdichte und Schüttwinkel.	17
4-3:	Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf den absoluten Fehler zwischen angestrebter und kalibrierter Schüttdichte.	18
4-4:	Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf den absoluten Fehler zwischen angestrebtem und kalibriertem Schüttwinkel.	19
4-5:	Einfluss der Faktorintervallbreite (FIW) und der anfänglichen Partikelkonfiguration (RFS) auf die Anzahl der zur Kalibrierung benötigten DEM-Berechnungsläufe.	20
4-6:	Abbildung der Verifizierungsergebnisse.	21
4-7:	Betrag des absoluten Unterschied zwischen den betrachteten Zielgrößen und den DEM-Modellen.	21
4-8:	Boxplots der kalibrierten Parametersets.	22
4-9:	Boxplots, die den Effekt der Berücksichtigung des <i>Rayleigh</i> -Zeitschritts auf den Zeitschritt und die Zielgrößen zeigen.	23
4-10:	Anzahl der im zweiten Optimierungsschritt benötigten DEM-Berechnungsläufe (links) und Gesamtzahl der DEM-Berechnungsläufe (rechts) aufgetragen über der normierten Anzahl an Probepunkten pro DEM-Parameter	24
5-1:	Foto der untersuchten Braunkohle.	26
5-2:	Foto der untersuchten Holzhackschnitzel.	26
5-3:	Foto des untersuchten Kalksteins.	26
5-4:	Foto des untersuchten Koks.	27
5-5:	Foto des untersuchten Mainsands.	27
5-6:	Foto der getrockneten Maiskörner (Futtermais).	27
5-7:	Foto der im Projekt untersuchten erntefrischen Maiskörner.	28
5-8:	Foto des untersuchten Magermilchpulvers.	28
5-9:	Foto der untersuchten Steinkohle.	28
5-10:	Schematischer Aufbau (links) und Foto (rechts) des Versuchsstands. . . .	30
5-11:	Scherzellenversuch zur Messung des Wandreibwerts.	32
5-12:	Partikelgrößenverteilung der Braunkohle.	33
5-13:	Partikelgrößenverteilung des Eisenerzes.	34
5-14:	Partikelgrößenverteilung der Holzhackschnitzel.	34
5-15:	Partikelgrößenverteilung des Kalksteins.	34

Abbildungsverzeichnis

5-16: Partikelgrößenverteilung des Koks.	35
5-17: Partikelgrößenverteilung des Kupfererzes.	35
5-18: Partikelgrößenverteilung des Mainsands.	35
5-19: Partikelgrößenverteilung der Maiskörner (frisch).	35
5-20: Partikelgrößenverteilung der Maiskörner (getrocknet).	35
5-21: Partikelgrößenverteilung des Milchpulvers.	36
5-22: Partikelgrößenverteilung der Steinkohle.	36
5-23: Auf der Stahlplatte anhaftendes Milchpulver bei der Messung des Haftreibungskoeffizienten (unten links).	40
6-1: Die beiden zur Bildverarbeitung erzeugten Screenshots zeigen je eine Drauf- (a) und Seitenansicht (b) des Haufwerks inkl. der Referenzkugel.	43
7-1: Arbeitspakete und eingesetztes Personal.	57

Tabellenverzeichnis

4-1: Mittelwerte für die vier Ergebnisgruppen der Kalibrierung. sw: Schüttwinkel; sd: Schüttdichte; ρ_O : optimierte Partikeldichte; $\mu_{r,O}$: optimierter Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; [Rac-2016c]. 20

4-2: Residuen (10^{-2}) und Summe der Residuen (in Klammern) des Optimierungsalgorithmus. Die Summen wurden als Summen der absoluten Terme der Schüttdichte (sd), Schüttdichte (sd) und des jeweiligen Anteils des *Rayleigh*-Zeitschritts (RLTS) berechnet; es gelten die Mittelwerte der Gruppen. Zudem wird hier darauf verwiesen, dass der verwendete Algorithmus auf multivariater Optimierung beruht [Rac-2016c]. 22

5-1: Untersuchte Materialien in alphabetischer Reihenfolge. 25

5-2: Behälterabmessungen und Füllhöhen. 29

5-3: Behälterdurchmesser und Füllvolumen zur Schüttdichtemessung. 31

5-4: Feuchtigkeitsgehalte und Standardabweichungen in Massenprozent (N=3). 33

5-5: Medianwerte der Partikelgrößenverteilungen. 34

5-6: Mittelwerte und Standardabweichungen (in °) aus den Schüttwinkelmessungen für N = 3... 10; d: Durchmesser des zylindrischen Behälters; v_{Hub} : Hubgeschwindigkeit. 38

5-7: Mittelwerte und Standardabweichungen aus den Schüttdichtemessungen (in kg/m^3) für N = 3... 4. 39

5-8: Wandreibungswerte (Mittelwerte), μ_W (N=3), und Haftreibungskoeffizienten, μ_H (N=5), inkl. Standardabweichungen auf unlegiertem Baustahl mit Walzhaut. 40

6-1: Partikelgrößenverteilungen in den DEM-Modellen; Kugeldurchmesser, d_i , in mm und Massenanteil, v_i , in Prozent pro Fraktion. 44

6-2: Zur Kalibrierung verwendete Messdaten und DEM-Modelle. 44

6-3: Parameter und Parametergrenzen für die Kalibrierung. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R,PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R,PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand. 46

6-4: Werte der nicht zur Kalibrierung eingesetzten bzw. ständig konstant gehaltenen DEM-Parameter. 47

6-6: Vergleich zwischen den Messdaten und den Ergebnissen der kalibrierten DEM-Modelle. Zielwerte sind in Winkelgrad für den Schüttwinkel (sw) und (kg/m^3) für die Schüttdichte (sd); Bezeichnung des Versuchsaufbaus laut Tabelle 6-2. 48

6-5: Ergebnisse für die Materialparameter aus den Kalibrierungsprozessen. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R.PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R.PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand.	50
6-7: Kennwerte zur Effizienz des Kalibrierungsverfahrens; n_{pMod} : Anzahl der DEM-Berechnungsläufe pro Modell, n_{Par} : Anzahl der zur Kalibrierung eingesetzten Parameter, n_{Mod} : Anzahl der zur Kalibrierung eingesetzten DEM-Modelle. . .	51
7-1: Übersicht über Maßnahmen zum Ergebnistransfer in die Wirtschaft.	59
1-1: Ergebnisse für die Materialparameter aus den Kalibrierungsprozessen. ρ_P : Partikeldichte; μ_{PP} : Reibungskoeffizient Partikel/Partikel; μ_{PW} : Reibungskoeffizient Partikel/Wand; $\mu_{R.PP}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Partikel; $\mu_{R.PW}$: Rollreibungskoeffizient Partikel/Wand; E : Elastizitätsmodul; ν : Querkontraktionszahl; γ_{PP} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Partikel; γ_{PW} : Kohäsionsenergiedichte Partikel/Wand.	64
1-2: Partikelgrößenverteilungen in den DEM-Modellen; Kugeldurchmesser, d_i , in mm und Massenanteil, v_i , in Prozent pro Fraktion.	65

Quellenverzeichnis

- [Asa-2007] Asaf, Z.;Rubinstein, D.; Shmulevich, I.: “Determination of discrete element model parameters required for soil tillage”. In: *Soil and Tillage Research* 92.1-2 (2007), S. 227–242. DOI: 10.1016/j.still.2006.03.006.
- [Bay-2014] BayWa AG, B.: Futtermais, Ernte 2014, Charge 63. 2014.
- [Bay-2016] BayWa AG, B.: Mais (erntefrisch), Ernte 2016. Okt. 2016.
- [Bec-2014] Bect, J.;Vazquez, E. u. a.: STK: a Small (Matlab/Octave) Toolbox for Kriging. Release 2.3. 2014. URL: <http://kriging.sourceforge.net>.
- [Ben-2016] Benevenuti, L.;Kloss, C.; Pirker, S.: “Identification of DEM simulation parameters by Artificial Neural Networks and bulk experiments”. In: *Powder Technology* 291 (2016), S. 456–465. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.01.003.
- [Ber-2015] Berger, R.;Kloss, C.;Kohlmeyer, A.; Pirker, S.: “Hybrid parallelization of the LIGGGHTS open-source DEM code”. In: *Powder Technology* 278 (2015), S. 234–247. DOI: 10.1016/j.powtec.2015.03.019.
- [Bha-2010] Bharadwaj, R.;Ketterhagen, W. R.; Hancock, B. C.: “Discrete element simulation study of a Freeman powder rheometer”. In: *Chemical Engineering Science* 65.21 (2010), S. 5747–5756. DOI: 10.1016/j.ces.2010.04.002.
- [Bie-2009] Bierwisch, C.;Kraft, T.;Riedel, H.; Moseler, M.: “Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling”. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 57.1 (2009), S. 10–31. DOI: 10.1016/j.jmps.2008.10.006.
- [Cab-2011] Cabrejos M., F.; del Campo, A.: Determinacion de propiedades de fluidez y recomendaciones para el manejo y almacenamiento ineral chancado (unpublished report). Hrsg. von Jenike and Johanson Chile S.A. 16. Sep. 2011.
- [Coe-2009] Coetzee, C. J.; Els, D.: “Calibration of discrete element parameters and the modelling of silo discharge and bucket filling”. In: *Computers and Electronics in Agriculture* 65.2 (2009), S. 198–212. DOI: 10.1016/j.compag.2008.10.002.
- [Coe-2010] Coetzee, C. J.;Els, D.; Dymond, G. F.: “Discrete element parameter calibration and the modelling of dragline bucket filling”. In: *Journal of Terramechanics* 47.1 (2010), S. 33–44. DOI: 10.1016/j.jterra.2009.03.003.
- [Coe-2017] Coetzee, C. J.: “Review: Calibration of the Discrete Element Method”. In: *Powder Technology* (2017), in press. DOI: 10.1016/j.powtec.2017.01.015.
- [Cun-1979] Cundall, P. A.; Strack, O. D. L.: “A discrete numerical model for granular assemblies”. In: *Géotechnique* 29.1 (1979), S. 47–65. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47.

- [Cur-2009] Curry, D.;Favier, J.; LaRoche, R. D.: “A systematic approach to DEM material model calibration”. In: *6th International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids: , Queensland, Australia*. Hrsg. von Wypych, P. W. Barton: 2009. URL: <http://search.informit.com.au/documentSummary;dn=231163197444105;res=IELENG>.
- [Dea-2015] Dean, A.;Morris, M.; Stufken, J.: Handbook of design and analysis of experiments. Handbooks of modern statistical methods. 2015. URL: <http://lib.myilibrary.com/Open.aspx?id=802716>.
- [Deu-2014] Deutsches Institut für Normung: Biogene Festbrennstoffe - Brennstoffspezifikationen und -klassen - Teil 4: Klassifizierung von Holzhackschnitzeln. 2014. (Besucht am 06. 12. 2016).
- [Eat-2015] Eaton, J. W.;Bateman, D.;Hauberg, S.; Wehbring, R.: GNU Octave version 4.0.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations. 2015. URL: <http://www.gnu.org/software/octave/doc/interpreter>.
- [Eur-1991] European Federation of Materials Handling: FEM 2.582: Allgemeine Schüttguteigenschaften und ihre Darstellung in Kurzform. Paris, 1991.
- [eur-2013] eurosérum, Port Sur Saone, Frankreich: Skimmed Milk Premium - Medium Heat - ADPI Extra grade. 25. Juni 2013.
- [Fak-2007] Fakhimi, A.; Villegas, T.: “Application of Dimensional Analysis in Calibration of a Discrete Element Model for Rock Deformation and Fracture”. In: *Rock Mechanics and Rock Engineering* 40.2 (2007), S. 193–211. DOI: 10.1007/s00603-006-0095-6.
- [Fav-2010] Favier, J.;Curry, D.; LaRoche, R. D.: “Calibration of DEM Material Models to Approximate Bulk Particle Characteristics”. In: *Proceedings: WCPT6 - World Congress on Particle Technology 6*. 2010, ???–???
- [Fra-2013] Frankowski, P.;Paulick, M.;Combarros, M.;Simons, T.;Kwade, A.;Schilling, M.;Feise, H. J.; Morgeneyer, M.: “Material Characterisation for Discrete Element Modelling Calibration”. In: *Particle-based methods III*. Hrsg. von Bischoff, M. CIMNE, Barcelona: 2013, S. 375–383.
- [Fre-2016] Free Software Foundation: GNU General Public License. 2016. URL: <http://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.en.html>.
- [Gon-2011] González-Montellano, C.;Ramírez, Á.;Gallego, E.; Ayuga, F.: “Validation and experimental calibration of 3D discrete element models for the simulation of the discharge flow in silos”. In: *Chemical Engineering Science* 66.21 (2011), S. 5116–5126. DOI: 10.1016/j.ces.2011.07.009.
- [Gon-2012] González-Montellano, C.;Gallego, E.;Ramírez-Gómez, Á.; Ayuga, F.: “Three dimensional discrete element models for simulating the filling and emptying of silos: Analysis of numerical results”. In: *Computers & Chemical Engineering* 40 (2012), S. 22–32. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2012.02.007.
- [Gri-2009a] Grima, A. P.; Wypych, P. W.: “Investigations into Calibration for Discrete Element Modelling of Granular Materials”. In: *6th International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids: , Queensland, Australia*. Hrsg. von Wypych, P. W. Barton: 2009, S. 65–72.

- [Gri-2009b] Grima, A. P.; Wypych, P. W.: "Investigations into Calibration for Discrete Element Modelling of Granular Materials". In: *Proceedings of the 6th International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids*. Hrsg. von Wypych, P. W. Barton: 2009, S. 65–72.
- [Gri-2010] Grima, A. P.; Wypych, P. W.: "Discrete element simulation of a conveyor impact-plate transfer: calibration, validation and scale-up". In: *Australian Bulk Handling Review* May/June (2010), S. 64–72.
- [Gri-2011] Grima, A. P.; Wypych, P. W.: "Development and validation of calibration methods for discrete element modelling". In: *Granular Matter* 13.2 (2011), S. 127–132. DOI: 10.1007/s10035-010-0197-4.
- [Guo-2010] Guo, Y.: "A coupled DEM/CFD analysis of die filling process". PhD thesis. Birmingham: The University of Birmingham, 2010. URL: <https://core.ac.uk/download/files/121/76745.pdf> (besucht am 25.05.2016).
- [Han-2011] Hanley, K. J.; O'Sullivan, C.; Oliveira, J. C.; Cronin, K.; Byrne, E. P.: "Application of Taguchi methods to DEM calibration of bonded agglomerates". In: *Powder Technology* 210.3 (2011), S. 230–240. DOI: 10.1016/j.powtec.2011.03.023.
- [Her-1882] Hertz, H.: "Ueber die Berührung fester elastischer Körper". In: *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92 (1882), S. 156–171. (Besucht am 23.01.2015).
- [Hic-2008] Hicks, T.; Fitzgerald, M.: Functional Specification (unpublished report). Hrsg. von BHP Billiton Iron Ore Pty Ltd. 16. Juli 2008.
- [Iwa-1998] Iwashita, K.; Oda, M.: "Rolling Resistance at Contacts in Simulation of Shear Band Development by DEM". In: *Journal of Engineering Mechanics* 124.3 (1998), S. 285–292. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(1998)124:3(285).
- [Joh-2010] Johnstone, M. W.: "Calibration of DEM models for granular materials using bulk physical tests". Dissertation. Edinburgh, Scotland, United Kingdom: University of Edinburgh, 2010.
- [Käß-2015] Käßmeyer Biomasse-Kompetenz-Zentrum: Premium FireFlakes P 45S M15. 16. Sep. 2015.
- [Kle-2008] Kleijnen, J. P.: Design and Analysis of Simulation Experiments. Bd. 111. International Series in Operations Research & Management Science. Springer Science+Business Media LLC, Boston, MA: 2008. DOI: 10.1007/978-0-387-71813-2. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-71813-2>.
- [Klo-2012] Kloss, C.; Goniva, C.; Hager, A.; Amberger, S.; Pirker, S.: "Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM". In: *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal* 12.2/3 (2012), S. 140. DOI: 10.1504/PCFD.2012.047457.
- [Kni-2016] Knight Energy Services Ltd., London, Vereinigtes Königreich: Kraftwerkskohle gewaschen (Russian Steam Coal), Certificate of analysis, reference 336007/1. 9. März 2016.
- [Kri-1951] Krige, D. G.: "A statistical approach to some mine valuation and allied problems on the Witwatersrand". Master's thesis. Johannesburg: University of the Witwatersrand, 1951. (Besucht am 19.11.2016).

- [lig-a] liggghts documentation: Rolling friction model EPSD2. URL: http://www.cfdem.com/media/DEM/docu/gran_rolling_friction_epsd2.html (besucht am 22. 12. 2016).
- [lig-b] liggghts documentation: Simplified JKR cohesion model. URL: http://www.cfdem.com/media/DEM/docu/gran_cohesion_sjkr.html (besucht am 22. 12. 2016).
- [Lom-2014] Lommen, S.;Schott, D.; Lodewijks, G.: “DEM speedup: Stiffness effects on behavior of bulk material”. In: *Particuology* 12 (2014), S. 107–112. DOI: 10.1016/j.partic.2013.03.006.
- [Mar-2015] Marigo, M.; Stitt, E. H.: “Discrete Element Method (DEM) for Industrial Applications: Comments on Calibration and Validation for the Modelling of Cylindrical Pellets”. In: *KONA Powder and Particle Journal* 32.0 (2015), S. 236–252. DOI: 10.14356/kona.2015016.
- [Mär-2016] Märker Kalk GmbH: Märker Stückkalk: Technisches Datenblatt. Harburg, Mai 2016.
- [Mat-1963] Matheron, G.: “Principles of geostatistics”. In: *Economic Geology* 58.8 (1963), S. 1246–1266. DOI: 10.2113/gsecongeo.58.8.1246.
- [MAT-2016] MATLAB. The MathWorks Inc, Natick, Massachusetts: 2016.
- [Min-1953] Mindlin, R. D.; Deresiewicz, H.: “Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces”. In: *Journal of Applied Mechanics* 20 (1953), S. 327–344. (Besucht am 25. 05. 2016).
- [Nas-2015] Nasato, D. S.;Goniva, C.;Pirker, S.; Kloss, C.: “Coarse Graining for Large-scale DEM Simulations of Particle Flow – An Investigation on Contact and Cohesion Models”. In: *Procedia Engineering* 102 (2015), S. 1484–1490. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.01.282.
- [Rac-2016a] Rackl, M.: Efficient calibration of discrete element material model parameters using Latin hypercube sampling and Kriging: VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2016). Chersonissos, Griechenland, 10. Juni 2016.
- [Rac-2016b] Rackl, M.: Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern: 21. Fachtagung Schüttgutförderertechnik. Garching, 13. Okt. 2016.
- [Rac-2016c] Rackl, M.: Verification of an automated work flow for discrete element material parameter calibration: The 7th International Conference on Discrete Element Methods (DEM7). Dalian, China, 4. Aug. 2016.
- [Rac-2016d] Rackl, M.;Görnig, C. D.;Hanley, K. J.; Günthner, W. A.: “Efficient calibration of discrete element material model parameters using Latin hypercube sampling and Kriging”. In: *Proceedings of ECCOMAS 2016*. Hrsg. von Papadrakakis, M.;Papadopoulos, V.;Stefanou, G.; Plevris, V. Bd. 2. Athen: 2016, S. 4061–4072.
- [Rac-2016e] Rackl, M.; Günthner, W. A.: “Effiziente Kalibrierung von DEM-Materialmodell-Parametern”. In: *21. Fachtagung Schüttgutförderertechnik*. Hrsg. von Günthner, W. A.;Fottner, J.;Katterfeld, A.; Krause, F. Garching: 2016, S. 143–151.

- [Rac-2016f] Rackl, M.;Top, F.;Molhoek, C. P.; Schott, D. L.: “Feeding System for Wood Chips: A DEM Study to Improve Equipment Performance”. In: *Biomass and Bioenergy* (2016), manuscript under review.
- [Rac-2017a] Rackl, M.;Grötsch, F. E.; Günthner, W. A.: “Angle of repose revisited: When is a heap a cone?” In: *Powders & Grains :8th International Conference on Micromechanics of Granular Media*. 2017, Accepted contribution.
- [Rac-2017b] Rackl, M.; Hanley, K. J.: “A methodical calibration procedure for discrete element models”. In: *Powder Technology* 307 (2017), S. 73–83. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.11.048.
- [Rac-2017c] Rackl, M.;Hanley, K. J.; Günthner, W. A.: “Verification of an automated work flow for discrete element material parameter calibration”. In: *Proceedings of the 7th international conference on discrete element methods*. Hrsg. von Li, X.;Feng, Y.; Mustoe, G. Springer Proceedings in Physics. Springer Verlag, Singapore, Singapur: 2017, S. 201–208. URL: <http://link.springer.com/book/10.1007/978-981-10-1926-5/page/2>.
- [Sak-2014] Sakai, M.;Abe, M.;Shigeto, Y.;Mizutani, S.;Takahashi, H.;Viré, A.;Percival, J. R.;Xiang, J.; Pain, C. C.: “Verification and validation of a coarse grain model of the DEM in a bubbling fluidized bed”. In: *Chemical Engineering Journal* 244 (2014), S. 33–43. DOI: 10.1016/j.cej.2014.01.029.
- [Sak-2016] Sakai, M.: “How Should the Discrete Element Method Be Applied in Industrial Systems? A Review”. In: *KONA Powder and Particle Journal* 33.0 (2016), S. 169–178. DOI: 10.14356/kona.2016023.
- [San-2003] Santner, T. J.;Williams, B. J.; Notz, W. I.: *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer Series in Statistics. Springer, New York, NY: 2003. DOI: 10.1007/978-1-4757-3799-8. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4757-3799-8>.
- [Sch-2014] Schulze, D.: *Pulver und Schüttgüter: Fließeigenschaften und Handhabung*. 3., erg. Aufl. 2014. VDI-Buch. Springer Vieweg, Berlin: 2014. DOI: 10.1007/978-3-642-53885-8. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-53885-8>.
- [Ste-1999] Stein, M. L.: *Interpolation of Spatial Data: Some Theory for Kriging*. Springer Series in Statistics. Springer, New York, NY: 1999. DOI: 10.1007/978-1-4612-1494-6. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4612-1494-6>.
- [Suh-2016] Suhr, B.; Six, K.: “On the effect of stress dependent interparticle friction in direct shear tests”. In: *Powder Technology* 294 (2016), S. 211–220. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.02.029.
- [Wan-2010] Wang, Y.; Tonon, F.: “Calibration of a discrete element model for intact rock up to its peak strength”. In: *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 34.5 (2010), S. 447–469. DOI: 10.1002/nag.811.
- [Web-2007] Webster, R.; Oliver, M. A.: *Geostatistics for environmental scientists*. 2. ed. Statistics in practice. Wiley, Chichester u.a.: 2007.
- [Wen-2012] Wensrich, C. M.; Katterfeld, A.: “Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM”. In: *Powder Technology* 217 (2012), S. 409–417. DOI: 10.1016/j.powtec.2011.10.057.

- [Yoo-2007] Yoon, J.: "Application of experimental design and optimization to PFC model calibration in uniaxial compression simulation". In: *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 44.6 (2007), S. 871–889. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2007.01.004.