



# Diplomarbeit

## Empirischer Ansatz zur Rechenzeitabschätzung von DEM Modellen

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines  
Diplom-Ingenieurs bzw. Master of Science unter der Leitung von

**Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Georg KARTNIG**

**und**

**Senior Scientist Dipl.-Ing. Dr. techn. Klaus Decker**

Institut für Konstruktionswissenschaften und Technische Logistik  
Forschungsbereich Konstruktionslehre und Fördertechnik

eingereicht an der Technischen Universität Wien

Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

**Johannes Handler**  
**0827986 (066.482)**  
**Wilhelm-Kreiß-Platz 29/62/3**  
**1110 Wien**

Wien, im März 2014

---

Johannes Handler

## **Kurzfassung**

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Diskrete Elemente Methode (DEM), die zur Simulation von Schüttgütern verwendet wird, vorgestellt. Ihr Aufbau und inhärente Berechnungsabläufe werden analysiert, das Vorgehen zur Kalibrierung eines Modells dargelegt und die Notwendigkeit einer Rechenzeit-Prognoseformel aufgezeigt.

Alle in Bezug auf die Rechenzeit der Simulation relevanten Einflussgrößen werden betrachtet und mit Hilfe der erlangten Erkenntnisse eine Vorhersageformel zur Abschätzung der Rechenzeit formuliert. Nach der Erstellung einer passenden und praktischen Eingabemaske wird die Gültigkeit der Formel anhand einiger Versuche verifiziert.

Den Abschluss der Arbeit bilden eine Zusammenfassung der gewonnenen Erkenntnisse sowie ein Ausblick über naheliegende Vertiefungsmöglichkeiten.

## **Abstract**

The discrete element method (DEM), which applies to bulk material simulations, is introduced in this work. Its structure and inherent calculation processes are analysed, approaches on model calibration and the necessity of calculation time prognosis are expounded.

By observing and considering all relevant variables which influence the calculation time of the simulation, a prediction formula is developed. After designing a suitable and practical input screen, the validity of the formula is verified experimentally.

A closing summary of acquired insights is presented and prospects of further research conclude this diploma thesis.

## **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich all jenen danken, die durch ihre fachliche und persönliche Unterstützung zum Gelingen dieser Diplomarbeit und erfolgreichen Abschluss meines Studiums beigetragen haben.

Allen voran Herrn Senior Scientist Dipl.-Ing. Dr. techn. Klaus Decker der stets ein offenes Ohr und guten Rat parat hatte. Ferner all meinen Arbeitskollegen am Institut für Konstruktionswissenschaften und technische Logistik die durch ihre freundschaftliche Art für ein rundum angenehmes Arbeitsklima sorgten. Im Speziellen erwähnt sei Andreas Fertin, Georg Havlicek, Franz Paulischin und Ilse Ladengruber, die das Herzstück des Instituts darstellt.

Auch meinen Studienkollegen möchte ich meinen Dank aussprechen, durch deren Gesellschaft und Mithilfe auch die arbeitsintensivsten Zeiten stets unterhaltsam und erfolgreich gestaltet werden konnten, im Speziellen Gerald Firmberger, Martin Marenich, Martin Ortbauer, Philip Sitte, Severin Strehl, Clemens Zinkl, Benjamin Mörzinger, Alexandra Wimmer, Alexander Haber und Christian Schmaus.

Ich möchte auch meinen Eltern und meiner Familie danken, die mir schon immer großes Vertrauen entgegen brachten und deren Glauben an mich und meine Fähigkeiten das Fundament meiner Erfolge legten.

Nicht zuletzt gilt mein besonderer Dank meiner Frau Jill, die mein Leben in jedem Bereich positiv beeinflusst und mich in all meinen Zielen liebevoll unterstützt.

# Inhaltsverzeichnis

1	Aufgabenstellung und Zielsetzung der Arbeit.....	1
2	Einleitung .....	2
2.1	Häufige Probleme bei der Handhabung von Schüttgütern .....	3
2.1.1	Probleme beim Betreiben von Silos .....	3
2.1.2	Probleme bei Baumaschinen .....	4
2.1.3	Probleme in der Schüttgutfördertechnik .....	4
2.1.4	Zusammenfassung .....	6
3	Die Diskrete Elemente Methode (DEM) .....	8
3.1	Allgemeines .....	8
3.2	Softwareunterstützung.....	9
3.3	Simulationsmethodik und Ablauf .....	9
3.3.1	Simulationsvorbereitung und Initialisierung.....	11
3.3.2	Schleife 1 .....	14
3.3.3	Schleife 2 .....	19
3.3.4	Schleife 3 .....	20
4	Kalibrierung einer Simulation/eines Modells .....	23
4.1.1	Feststoffdichte $\rho$ .....	24
4.1.2	Partikelradius $R$ .....	25
4.1.3	Haftreibungs- und Rollwiderstandskoeffizient .....	26
5	Abschätzung der Rechenzeit .....	27
5.1	Notwendigkeit und Vorteile .....	27
5.2	Einschränkungen.....	27
5.2.1	Rechenzeitvergleich: 2 vs. 8 Prozessorkerne .....	28
5.3	Einflussgrößen auf die Rechenzeit .....	30
5.3.1	Initialisierung.....	31

5.3.2	Schleife 1 .....	36
5.3.3	Schleife 2 .....	40
5.3.4	Schleife 3 .....	40
5.3.5	Sonstige Parameter .....	44
6	Erstellung der Vorhersageformel .....	47
6.1	Bisherige Ansätze zur Rechenzeitabschätzung .....	47
6.2	Aufbau, Vorgehensweise und Einschränkungen .....	49
6.3	Einflussfaktoren .....	50
6.3.1	Beta-Faktor .....	50
6.3.2	$k_T$ - Korrekturfaktor Partikeltätigkeit.....	54
6.3.3	$k_R$ – Korrekturfaktor Rayleigh-Zeit.....	56
7	Eingabemaske .....	61
7.1	Maske A .....	61
7.2	Maske B .....	62
8	Validierung der Formel durch Anwendung auf unterschiedliche Versuchsaufbauten.....	64
8.1	Bunkeraustragsschnecke .....	64
8.2	Fallrohrversuche.....	66
8.3	Schneckenförderer mit Becherwerk.....	69
8.4	Trichterauslaufversuche .....	71
8.5	Ergebnisse .....	73
9	Vorgehen zur Erstellung einer neuen Formel.....	75
9.1	Schritt 1: Gültigkeitsbereich festlegen .....	75
9.2	Schritt 2: Partikeltätigkeiten definieren .....	76
9.3	Schritt 3: Versuchsplan erstellen .....	77
9.4	Schritt 6: Eingabemaske erstellen .....	78
10	Zusammenfassung und Ausblick .....	79
11	Formelzeichen .....	80

12	Abbildungsverzeichnis .....	83
	Literaturverzeichnis .....	85

## 1 Aufgabenstellung und Zielsetzung der Arbeit

Mit steigender Rechnerleistung wird die Diskrete Elemente Methode (DEM) als Grundlage von Computersimulationen zur Auslegung und Optimierung von Fördermitteln, Lagerbehälter und dergleichen mit bzw. in denen Schüttgüter transportiert, manipuliert und gelagert werden, immer attraktiver. Nichtsdestotrotz dauern Simulationen derzeit noch mehrere Tage, wenn nicht sogar Wochen. Die Rechenzeit ist im starken Maße von Material- und Eingabeparametern abhängig, weshalb sie starken Schwankungen unterworfen ist. Dies verhindert eine genaue zeitliche Planung und erschwert Auslegungs- und Optimierungsprozesse.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Struktur der DEM-Simulationen zu analysieren, alle relevanten Einflussgrößen auf die Rechenzeit zu identifizieren und anhand dieser eine Formel zu entwickeln, die es ermöglicht die Dauer von Simulationen mit einer Genauigkeit von  $\pm 10\%$  vorherzusagen.

## 2 Einleitung

Ob in der Energieversorgung, der Landwirtschaft, der Lebensmittelindustrie, der Chemischen Industrie oder dem Bauwesen, Schüttgüter sind in fast allen Industriezweigen zu finden und das in der Regel in großen Mengen und den unterschiedlichsten Erscheinungsformen (siehe auch Abbildung 1). Im Jahr 2009 wurden beispielsweise 7 Milliarden Tonnen Braun- und Steinkohle gefördert [1].

Derartige Fördermengen sind keine Ausnahmen und erfordern entsprechende Transportkapazitäten, Lagermöglichkeiten und vor allem auch passende Anlagen zur Handhabung und Manipulation der Güter. Bei diesen Aufgaben steht man allerdings besonderen Herausforderungen gegenüber. Werden zum Beispiel die Lagerungsmöglichkeiten näher betrachtet, so werden neben Lagerhallen hauptsächlich Silos und Bunker für kurz- und mittelfristige Aufbewahrung herangezogen. Bei der Entnahme sollte das Gut mühelos ausfließen. Probleme wie z.B. Fließstörungen, Entmischung, Erschütterungen oder unregelmäßiger Fluss sind jedoch häufig [2], weshalb es unter besonderer Berücksichtigung der Schüttgütereigenschaften passende Lösungen zu finden gilt.

Schüttgüter	Industriezweig
Schotter, Kies, Sand	Steine und Erden
Kalk, Zement, Gips	Baustoffe
Erze, Schlacken, Metallpulver	Bergbau, Hüttenwesen
Rauchgasstäube	Metallurgische Industrie
Kohle, Koks (stückig bis staubförmig)	Kohlebergbau und -verarbeitung
Holzpellets	Energieversorgung
Chemikalien, Waschpulver	Chemische Industrie
Oxide, Mineralsande	Keramische und Glasindustrie
Pharmazeutika, Puder	Pharma-Industrie
Kunststoffgranulate	Kunststoffverarbeitung
Farbpigmente, Füllstoffe	Farbindustrie
Holzspäne, Holzmehl	Holzverarbeitung
Futtermittel (Grünfütter, Mais), Düngemittel	Landwirtschaft, Agrarindustrie
Getreide, Mehl, Kernfrüchte, Gewürze,	Lebensmitteldindustrie
Milchpulver, Zucker	

Abbildung 1: Beispiele für Schüttgüter [3]



## 2.1 Häufige Probleme bei der Handhabung von Schüttgütern

### 2.1.1 Probleme beim Betreiben von Silos

Je nach Art, Herkunft, Eigenschaften und Verwendungszweck wird ein Schüttgut mit Hilfe unterschiedlicher Anlagen und Geräte transportiert, gelagert und gehandhabt. Nichtsdestotrotz sind die am häufigsten auftretenden Probleme in allen Fällen ähnlicher Natur. Abbildung 2 veranschaulicht mögliche Probleme beim Betreiben von Silos.

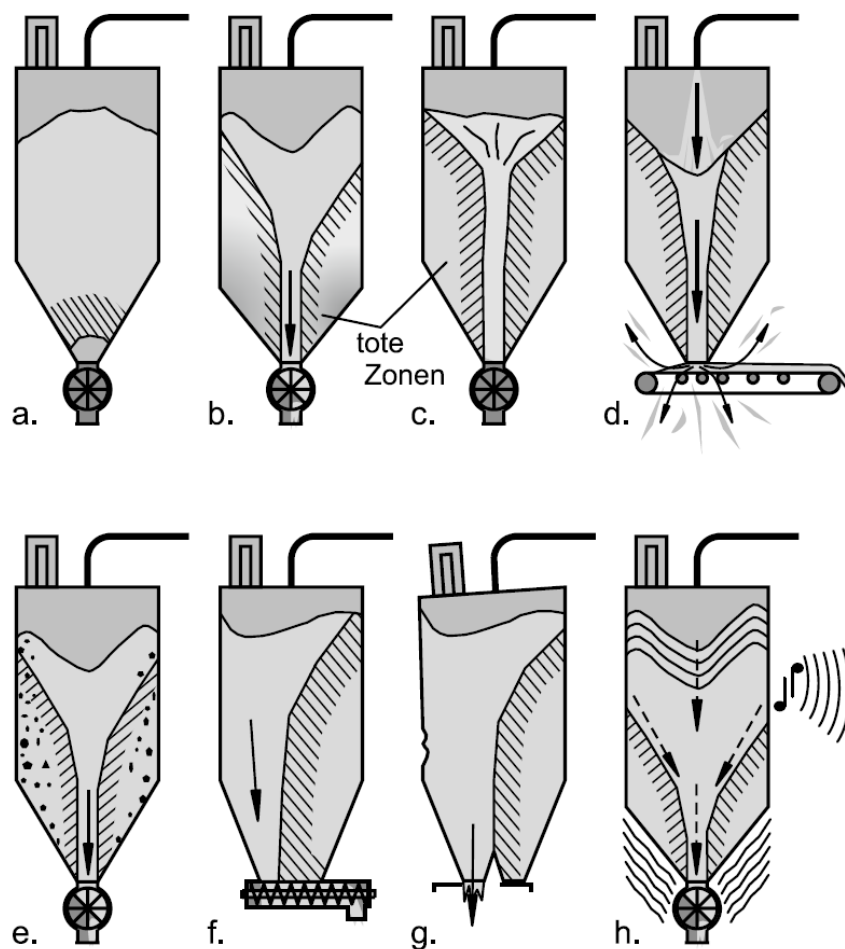


Abbildung 2: Mögliche Probleme beim Betreiben von Silos [2]

a zeigt die sogenannte Brücke, bei der sich im Bereich der Siloöffnung ein stabiles Konglomerat des Gutes bildet, das den Auslauf verstopft und den Ausfluss hemmt oder sogar vollständig verhindert. Dies kann darin begründet sein, dass die Öffnung in Relation zu den Partikeln zu klein ist und diese sich verkeilen oder kleine Partikel, im Speziellen Pulver, aufgrund der kohäsiven Kräfte verkleben.

b und c zeigen den sogenannten Kernfluss. Dieser entsteht, wenn die Trichterwand nicht ausreichend steil oder glatt ist, was zur Folge hat, dass das Schüttgut zunächst lediglich im Bereich der Auslauföffnung in Bewegung kommt und sich seitlich sogenannte „tote Zonen“ ausbilden können. Eine weitere mögliche Konsequenz wäre, dass neu nachgefüllte Produkte sogleich wieder abgezogen werden und kaum im Silo verweilen (siehe d).

e, f, g und h stellen des Weiteren die Probleme der Entmischung, einseitigen Abzugs durch das Austraggerät, Beulen aufgrund von einseitigem Schüttgutfluss und die Entstehung von Erschütterungen (Silobeben und Silohupen) dar. [2]

### 2.1.2 Probleme bei Baumaschinen

Im Bereich der Baumaschinen ist die Situation ähnlich. Die notwendigen Informationen in Bezug auf funktionale Rahmenbedingungen oder Lastannahmen, welche für die Auslegung Voraussetzung sind, sind unzureichend vorhanden um ausreichend genaue Berechnungen zu gewährleisten.

Derzeit werden für die komplexen Zusammenhänge und Wechselwirkungen zwischen dem zu manipulierenden Gut und verwendeten Werkzeugen vereinfachte Modellannahmen getroffen, welche aber sehr schnell an ihre Grenzen stoßen. Dies ist darin begründet, dass sich während der unterschiedlichen Arbeitsprozesse die wirkenden Belastungen, als auch die physikalischen und geometrischen Eigenschaften des Schüttgutes ändern, was wiederum die Erfassung der notwendigen Grundannahmen und Parameter, die in die Berechnung einfließen, erschwert oder gar unmöglich macht.

### 2.1.3 Probleme in der Schüttgutfördertechnik

„Die Fördertechnik beschäftigt sich mit der Realisierung von innerbetrieblichen Transportaufgaben von Stück- und Schüttgütern. Stetigförderer zur Förderung von Schüttgütern werden neben dem Bergbau vor allem in der Verfahrenstechnik eingesetzt.“ [4]

„Meist stellt die Fördertechnik das Bindeglied zwischen verschiedenen verfahrenstechnischen Prozessen dar. Aus diesem Grund ist der störungsfreie Transport und die einwandfreie Funktion eines Förderers überaus wichtig.“ [5]

Die Praxis zeigt jedoch, dass die besonderen Herausforderungen, denen man bei der Auslegung der Transporteinrichtungen gegenüber steht, noch nicht gemeistert sind.



Abbildung 3: Verstopfung und Verschüttung [6]



Abbildung 4: (Förder-)Gurtverschleiß [6]

Die Abbildungen dieses Abschnittes dienen als Beispiele für mögliche Folgen suboptimaler Auslegung der Förderer. Verschüttung des Fördergutes führt neben der Verringerung des Fördervolumens oft zu Korrosion und Zusatzkosten für Wartung und Aufräumarbeiten, nicht zuletzt aber vor allem auch zu Sicherheitsproblemen. Einer Statistik der MSHA (Mine Safety and Health Administration) des US Department of Labor zufolge passieren rund 50% der Arbeitsunfälle in Zusammenhang mit Gurtförderern bei Reinigungs- und Wartungsarbeiten.

Fördergutverschleiß, wie in Abbildung 4 gezeigt, ist in starkem Maß von der adäquaten Konstruktion der Rutschen abhängig. So können unsachgemäß dimensionierte oder ausgelegte Rinnen und Rutschen die Lebenszeit des Gurtes um bis zu 75% verkürzen, was, nachdem Gurte die größten Kostenträger dieses Fördersystems darstellen, zu erheblichen Kostensteigerungen führt.



Abbildung 5: Schlag- und Stoßschäden [6]



Abbildung 6: Verschüttung [6]



Abbildung 7: Staubentstehung und Materialzerfall [6]



Abbildung 8: seitlicher Rutschenverschleiß [6]

Materialzerfall (siehe Abbildung 7) führt zu Staubentwicklung, Qualitätsreduktion des Fördergutes und in Extremfällen sogar zu Explosionen und Brand. [6]

Ein weiterer Aspekt, dem Beachtung geschenkt werden muss, ist jener, dass aufgrund der kontinuierlich arbeitenden Prozesse Reparatur- oder Wartungsarbeiten an nur einem Glied der Prozesskette die Abschaltung der ganzen Anlage zur Folge hat, was ebenfalls immense Kosten verursacht.

### 2.1.4 Zusammenfassung

Die angeführten Beispiele deuten das Ausmaß möglicher Probleme bei der Handhabung von Schüttgütern an. Über dies hinaus stellt aber auch, der, durch die kontinuierlich anwachsende Marktglobalisierung, stetig steigende Zeit- und Kostendruck bei der Planung und Entwicklung eine zusätzliche Herausforderung dar. Um diese zu bewältigen werden Förderanlagen oft aus fertigen Modulen oder Produktbaugruppen zusammengestellt. Dies erhöht die Flexibilität und verringert die Bearbeitungs- und Lieferzeiten, führt aber ebenso dazu, dass Anlagen oft nur überschlägig und allgemein nach den vorhandenen Normen berechnet werden und folglich für die oft sehr speziellen Anwendungssituationen nur bedingt geeignet sind. An dieser Stelle muss auch erwähnt sein, dass einerseits keineswegs für alle Förderer und Maschinen Normen und Auslegungsvorschriften existieren, und andererseits die verfügbaren Normen nicht in der Lage sind die komplexen Situationen, die aus den komplexen und vielseitigen Eigenschaften der Schüttgüter und deren Wechselwirkungen mit der Umgebung und der Anlagen und Maschinen resultieren, ausreichend genau zu betrachten.

Folglich bleibt Herstellern oft nichts anderes übrig als sich auf die eigenen Erfahrungen und Experimente zu verlassen. Dies ist jedoch gerade dann besonders

problematisch, wenn es sich um Anlagen handelt, die nur einmal gebaut werden, also keinerlei oder kaum Erfahrung vorhanden ist, deren Parameter nur schwer nachgestellt werden können oder Versuche sehr kosten- und zeitintensiv sind.

All diese Argumente und Beispiele verdeutlichen den Bedarf oder sogar die Notwendigkeit einer Methode, die die kostengünstige Planung, Konstruktion und Auslegung von Förderern, Baumaschinen, Silos etc. ermöglicht und dabei die besonderen Eigenschaften unterschiedlichster Schüttgüter berücksichtigen kann. Mit der Diskreten Elemente Methode (DEM) wurde eine Methodik gefunden, die all diesen Anforderungen gerecht wird.

## 3 Die Diskrete Elemente Methode (DEM)

Bereits 1964 untersuchte Aneesur Rahman in seiner Arbeit „Correlation in the Motion of Atoms in Liquid Argon“ die Interaktion von 864 Partikeln und simulierte auf einem digitalen Computer ihr dynamisches Verhalten auf molekularer Ebene. [7] Circa 10 Jahre später, im Laufe der 70er Jahre, stellten Cundall und Stack die sogenannte Diskrete Elemente Methode (DEM) vor, die auf selbiger Grundlage fußt und anhand welcher sie Probleme der Felsmechanik zu lösen versuchten. [8]

In weiterer Folge verzweigte sich die Methodik und verschiedene Ansätze wurden entwickelt. Hocking, Williams und Mustoe stellten 1985 die verallgemeinerte Diskrete Elemente Methode vor [9] und Shi veröffentlichte 1988 eine Arbeit zur diskontinuierlichen Deformationsanalyse (DDA). [10], [11]

### 3.1 Allgemeines

Bei der DEM, wie sie von Cundall und Stack vorgestellt wurde, handelt es sich um eine numerische Berechnungsmethode für Partikelsysteme, die jedes einzelne Partikel, dessen Wechselwirkung mit den umliegenden Partikeln und den Einfluss äußerer Kräfte betrachtet. Dieser Ansatz erlaubt die Berechnung und Simulation von diskreten, diskontinuierlichen Vorgängen und stellt damit einen Gegensatz zur klassischen Betrachtungsweise der Kontinuumsmechanik dar.

Ausgangspunkt der DEM ist also das einzelne Partikel bzw. jedes einzelne diskrete Element eines physikalischen Mehrkörpersystems für das die Newton'schen Bewegungsgleichungen für jeden der möglichen Freiheitsgrade gelöst wird. Dieser Vorgang wird in vordefinierten Zeitschritten bis zum Ende der Simulation wiederholt. [12]

Wie sich schnell erkennen lässt, führt diese Vorgehensweise bei höheren Partikelanzahlen und längeren Simulationszeiten sehr schnell zu einem extrem hohen Rechenaufwand, dem die Computer in den 80er Jahren nicht gewachsen waren. Seit den 90ern wächst jedoch die Leistungsfähigkeit der zur Verfügung stehenden Rechner zügig und kontinuierlich, was den Einsatz dieser Methode vorantreibt, da nun mehr und mehr auch komplexere Problemstellungen mit mehreren hunderttausenden Partikeln simuliert und berechnet werden können.

Nichtsdestotrotz ist man noch nicht an dem Punkt angelangt, dass sich die Rechenzeiten so weitgehend reduziert haben, dass die Diskrete Elemente Methode in allen Anwendungsbereichen wirtschaftlich sinnvoll einsetzbar ist, weshalb Rechenzeitoptimierung speziell in der Schüttgutfördertechnik ein sehr aktuelles Thema darstellt.

### 3.2 Softwareunterstützung

Das Potential der Diskrete Elemente Methode wurde schnell erkannt, weshalb es nach der Publizierung der Arbeit von Cundall und Stack nicht lange dauerte, bis unterschiedliche kommerzielle, als auch nicht-kommerzielle und open-source Softwarelösungen verfügbar wurden.

Cundall selbst programmierte in den Jahren 1979 und 1980 „BALL“ und „TRUBAL“. Die in Fortran geschriebenen Programme, die die DEM auf Scheiben und Kugeln anwandten, wurden seitdem kostenlos vertrieben. [11], [13]

Im Jahr 2005 brachte das britische Unternehmen DEM-Solutions die Software EDEM auf den Markt, welche auch von der Technischen Universität Wien genutzt wird. EDEM bezeichnet sich selbst als das erste „Allzweck-CAE-Werkzeug“, das speziell für das Simulieren und Analysieren von Schüttgütern und Fertigungsprozessen konzipiert wurde. [14]

Wenn in dieser Arbeit in weiterer Folge die Prinzipien der Simulation näher erläutert und mit Beispielen veranschaulicht oder konkretisiert werden, stammen diese, sofern nichts anderes ausdrücklich erwähnt wird, aus EDEM.

### 3.3 Simulationsmethodik und Ablauf

Bei der Modellierung eines Systems kann man prinzipiell zwischen zwei verschiedenen Ansätzen unterscheiden, dem „Bottom-Up“- und dem „Top-Down“-Ansatz.

Die Diskrete Elemente Methode geht von ersterem Ansatz aus, bei dem das Verhalten des ruhenden oder fließenden Schüttgutes als Summe vieler einzelner Kontaktereignisse zwischen den Partikeln beschrieben wird. [15] Berücksichtigt werden dabei die Partikel/Partikel-, sowie die Partikel/Wand-Wechselwirkungen, auf deren Grundlage in weiterer Folge das makroskopische Verhalten errechnet wird.

Der „Top-Down“-Ansatz wäre die gegenteilige Variante, bei der anhand von makroskopischen Gesetzmäßigkeiten Rückschlüsse auf die mikroskopischen Wechselwirkungen zwischen den betrachteten Körpern gezogen werden würden. [16]

Abbildung 9 zeigt ein schematisches Flussdiagramm, das den Ablauf der Diskreten Elemente Methode anschaulich verdeutlicht. Diesem Ablauf folgend wird die DEM in den folgenden Unterkapiteln etwas detaillierter betrachtet werden.

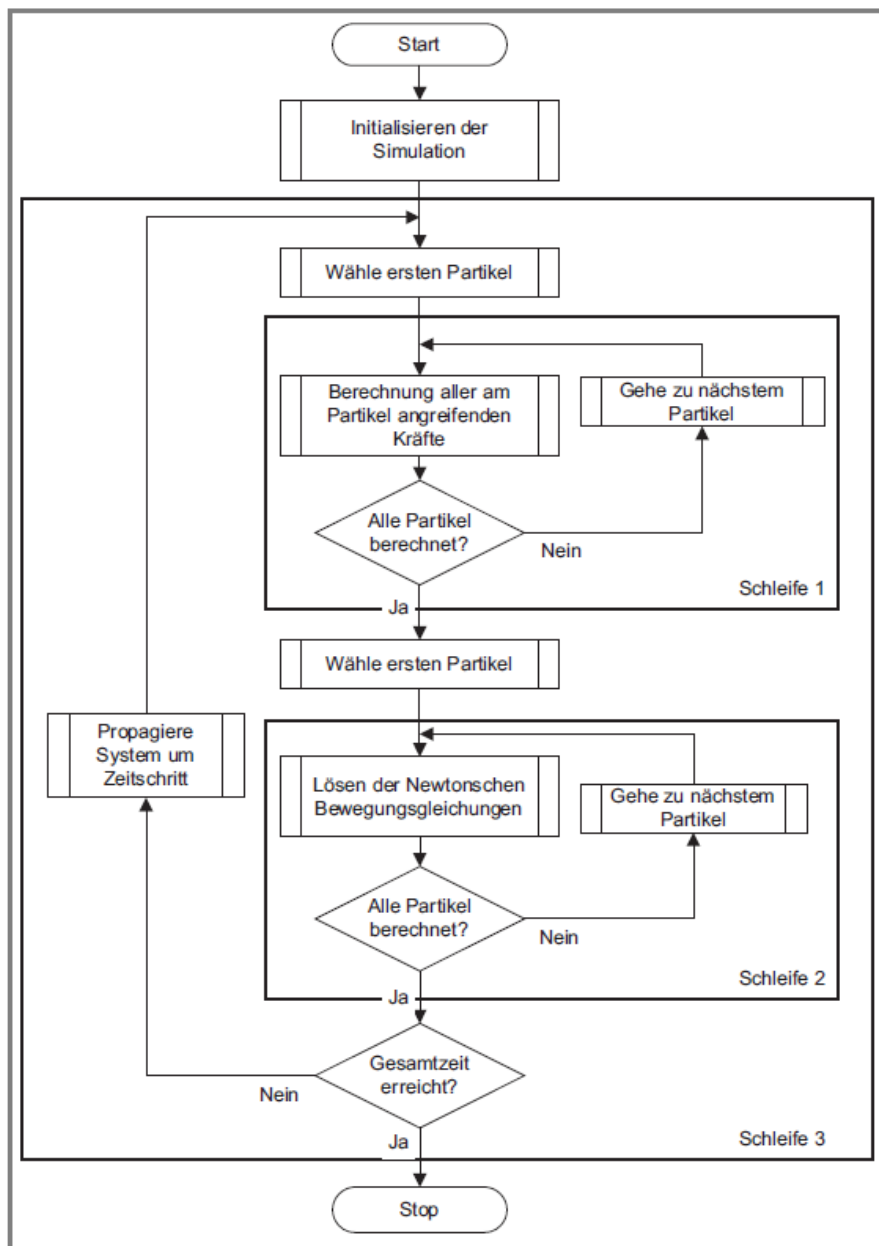


Abbildung 9: Schematisches Flussdiagramm zum Ablauf der Diskreten Elemente Methode (DEM) [15]



### 3.3.1 Simulationsvorbereitung und Initialisierung

#### 3.3.1.1 Erzeugung bzw. Import der notwendigen Körper und Definition ihrer Eigenschaften

Der erste Schritt zur Simulation ist die Erstellung der für die Simulation notwendigen Geometrien und Körper. Die meisten Programme bieten hierzu zwei Möglichkeiten an. Einerseits können einfache Geometrien, wie zum Beispiel Platten, Scheiben, Zylinder, Trichter etc. direkt im Programm erzeugt und angeordnet werden.

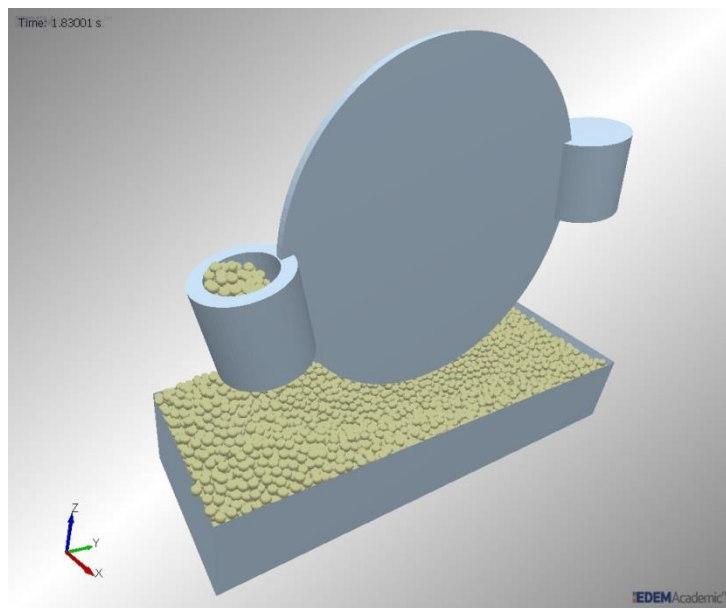


Abbildung 10: In EDEM erzeugtes Becherwerk

Abbildung 10 zeigt als Beispiel hierfür ein, mit Hilfe sehr einfacher Formen, direkt in EDEM erzeugtes Becherwerk.

Andererseits können auch komplexere Geometrien, Bauteile und Anlagen in CAD-Programmen konstruiert und anschließend importiert werden.

Nachdem die notwendigen Bauteile nun vorhanden sind, werden ihnen Eigenschaften zugewiesen. Es gibt die Möglichkeit unterschiedliche Materialien wie z.B. Stahl, Aluminium usw. zu definieren und Materialeigenschaften wie z.B. Schubmodul, Dichte, Querkontraktionszahl etc. anzugeben. Jedem Teil muss ein Material zugewiesen werden.

Sofern Bewegungen durchgeführt werden sollen, im Falle des Becherwerks z.B. eine Drehbewegung der Scheibe mit den beiden Bechern, kann für jeden Körper

Bewegungsrichtung, Art der Bewegung, Geschwindigkeit, Beschleunigung, sowie Start- und Endzeitpunkt vorgegeben werden.

### 3.3.1.2 Wahl der Partikelgeometrie

Im nächsten Schritt muss darüber entschieden werden, auf welche Art und mit welchen Eigenschaften das zu betrachtende Schüttgut simuliert wird. In den seltensten Fällen wird das zu untersuchende Gut aus kugelförmigen Partikeln bestehen, weshalb der Versuch gemacht werden kann, die Form der simulierten Partikel, jener der realen anzunähern.

Die hierzu am häufigsten verwendete Methode ist das sogenannte „Clustering“, bei dem mehrere Partikel derselben simplen Form so zusammengefügt werden, dass sich daraus eine dem realen Element möglichst ähnliche Geometrie ergibt.

Die folgende Abbildung ist der Dissertation von Dr. Nivedita Das entnommen und zeigt, wie mithilfe mehrerer Kreise die Form eines Sandkorns angenähert wird.

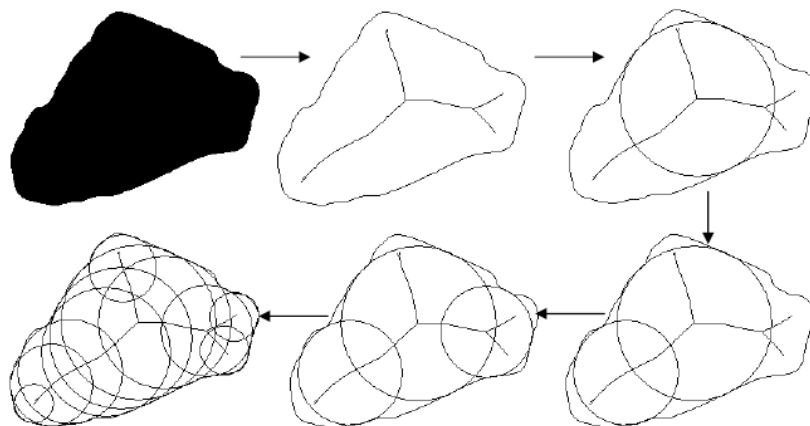


Abbildung 11: 2D-Modellierung eines Sandpartikels mittels überlappenden Kreisen [17]



Abbildung 12: Vergleich des originalen Sandkorns und der Näherung durch Clustering [17]

Abbildung 12 zeigt den direkten Vergleich, der veranschaulicht, dass dieses Verfahren eine recht genaue Näherung ermöglicht. Die hier im 2-Dimensionalen gezeigte Methode wird ebenso für dreidimensionale Objekte angewandt.

Je genauer die Form der virtuellen Partikel, jener der realen ähnelt, desto wahrscheinlicher ist es mit der Simulation auch realitätsgetreue Ergebnisse zu erzielen. Der große Nachteil, der sich aus dem Clustering ergibt, ist der daraus folgende erhöhte Rechenaufwand und somit eine deutlich längere Rechenzeit.

Aus diesem Grund wird in den meisten Fällen von dem Vorhaben die Partikelform genau anzunähern abgesehen. Stattdessen werden sphärische Partikel gewählt. Das dies natürlich zu einem anderen Verhalten des Gutes führt liegt auf der Hand, weshalb versucht wird dies durch passende Veränderung anderer Partikelparameter, wie z.B. Roll- und Haftreibungskoeffizienten zu kompensieren.

In allen Simulationen, die im Zuge dieser Arbeit durchgeführt wurden, wurden ausschließlich kugelförmige Partikel verwendet.

### *3.3.1.3 Definition von Eigenschaften und Generierung des Schüttgutes*

Nachdem die Wahl zugunsten einer bestimmten Partikelform getroffen wurde, gilt es im nächsten Schritt auch den Partikeln Materialeigenschaften zuzuweisen. Hierfür stehen die gleichen Eingabefelder zur Verfügung, die bereits für die Bestimmung der erzeugten oder importierten Bauteile und Geometrien genutzt wurde.

Um Partikel generieren zu können, muss zuerst ein Bereich festgelegt werden, in dem dies geschehen soll. Man hat dafür die Option entweder einen geschlossenen Volumenkörper anzugeben in dem die Generierung stattfindet, oder eine Fläche zu bestimmen, die sich ähnlich einem Fenster verhält, durch das die Partikel in die Simulation gelangen.

Im nächsten Schritt wird die gesamte Anzahl oder die gesamte Masse der zu generierenden Partikel angegeben sowie eine Generierungsrate und der Zeitpunkt zu dem begonnen werden soll. Des Weiteren wird noch vorgegeben ob die Positionierung der Partikel zufällig oder nach einer bestimmten Anordnung (z.B. kubisch raumzentriert, kubisch flächenzentriert etc.) erfolgt, ob sie einer bestimmten Größenverteilung unterliegen, ob eine Anfangsgeschwindigkeit vorliegt und ob die Partikel zufällig oder in eine vorgegebene Richtung orientiert sind.

Die Partikel können nun gemäß den gewählten Einstellungen generiert werden. Eine letzte Bedingung ist jedoch noch zu beachten: Partikel können nur an freien Plätzen erfolgreich erzeugt werden, d.h. es dürfen keine Überlappungen oder Berührungen

mit anderen Partikeln oder Geometrien gegeben sein. Wenn nun eine zufällige Auswahl des Generierungsortes eingestellt wurde, wird es vorkommen, dass Partikel zu eng aneinander platziert werden und aufgrund der genannten Bedingung die Generierung fehlschlägt. Aus diesem Grund ist es notwendig einen Wert festzulegen, der bestimmt, wie viele Versuche, einen freien Ort zu finden, pro Partikel unternommen werden sollen.

### 3.3.1.4 Allgemeine Simulationsparameter

Bevor die Simulation gestartet werden kann, müssen als letztes noch einige allgemeine Simulationsparameter vorgegeben werden.

Es muss eingestellt werden, ob die Erdbeschleunigung wirkt und welchen Wert sie hat, die gesamte Simulationszeit, das „Target Save Intervall“ (TSI) und die Zellengröße sowie ein Prozentwert, der angibt, wie groß der für die Iteration verwendete Zeitschritt („Fixed Time Step“) im Verhältnis zu der aus den Materialkennwerten errechneten Rayleigh-Zeit (siehe 3.3.4 „Schleife 3“, Seite 20 bzw. Formel 3.15, Seite 22) ist.

Auf die hier erwähnten Eingabewerte und deren Bedeutung wird im Laufe der nächsten Kapitel noch genauer eingegangen.

### 3.3.2 Schleife 1

Nachdem alle notwendigen Einstellungen vorgenommen und die Simulation initialisiert wurde, wird die erste Prozessschleife durchlaufen. Ziel dieser Schleife ist es für jedes einzelne Partikel resultierende Kräfte und Momente zu bestimmen (siehe Abbildung 13).

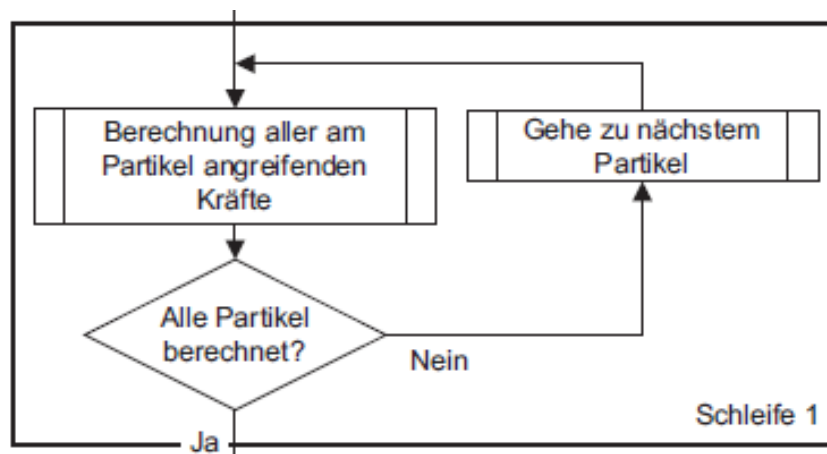


Abbildung 13: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 1 [15]

### 3.3.2.1 Kontakterkennung

Bevor die Kräfte, die auf ein Partikel wirken, bestimmt werden können, müssen Anzahl und Orte der Kontakte ermittelt werden, was den Hauptrechenaufwand darstellt. [18]

Als erster Schritt wird die Domänengröße festgelegt. Die Domäne stellt jenen Bereich dar, innerhalb dessen Grenzen Partikel berechnet werden. Überschreitet ein Partikel die Domänengrenze (siehe Abbildung 14, Domänengrenze in Rot eingezeichnet), verschwindet es automatisch aus der Simulation.

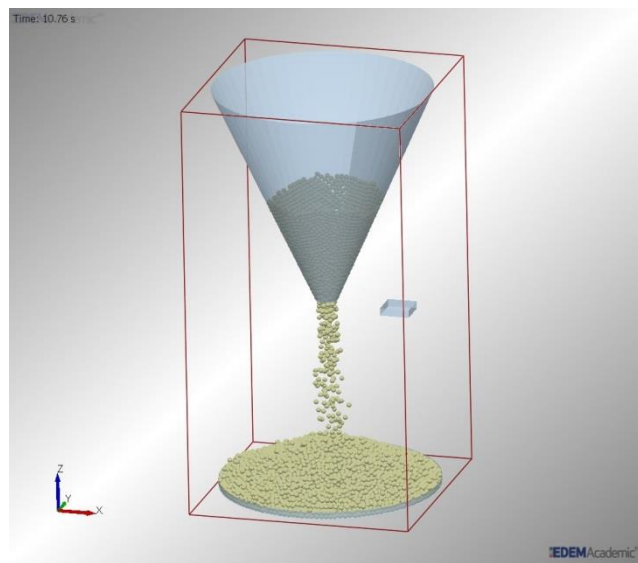


Abbildung 14: Simulationsdomäne

Die Bestimmung der Kontaktpaare, also aller Partikel, die mit einander in Kontakt stehen, muss für jeden Zeitschritt durchgeführt werden. Dies ist ein sehr rechenaufwändiges Unterfangen, vor allem für große Simulationen mit vielen Elementen, da die Suchzeit mit der Anzahl der Partikel quadratisch zunimmt.

Um diesen Prozess zu beschleunigen wird das Domänenvolumen in quaderförmige Zellen unterteilt. Für die Wahl der optimalen Zellengröße ist es allerdings schwer einen geeigneten Formalismus zu formulieren. Auf diese Problematik wird in Kapitel 5.3.2.1 näher eingegangen.

Nachdem die Domäne unterteilt ist, wird jedes Partikel und jedes Geometrieelement einer oder mehreren Zellen zugewiesen. Zellen, die weniger als zwei Elemente beinhalten, werden passive Zellen genannt. Sie müssen nicht berechnet werden, da in ihnen keine Kontakte auftreten können.

Jede aktive Zelle, also jede die mehr als ein Element enthält, wird näher analysiert. Abbildung 15 veranschaulicht dies im zweidimensionalen Fall. Zelle 13 ist eine aktive Zelle, da sich in ihr zwei Elemente, nämlich Elemente 1 und 3, befinden. Ebenso Zelle 7 und 8. Die Zellen 9, 12 und 14 müssen nicht näher betrachtet werden, da sich darin jeweils nur ein Element aufhält.

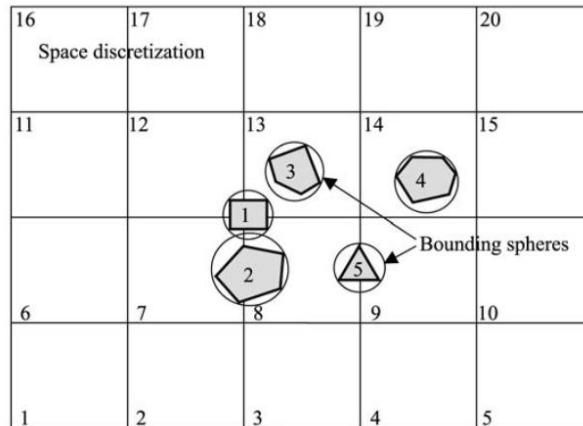


Abbildung 15: Einteilung der Kugeln in Zellräume für den zweidimensionalen Fall [19]

Nachdem alle Elemente in Zellen aufgeteilt wurden und zwischen aktiven und passiven Zellen unterschieden wurde, ist es nun leicht Nachbarelemente zu bestimmen. EDEM vergleicht dazu in den aktiven Zellen die Distanz zwischen den Mittelpunkten der einzelnen Kugeln mit den Kugelradien, woraus sich die Anzahl der Kontakte, die Kontaktpunkte und die Überlappungen  $\delta_n$  und  $\delta_t$  (siehe Abbildung 16) ergeben. [18]

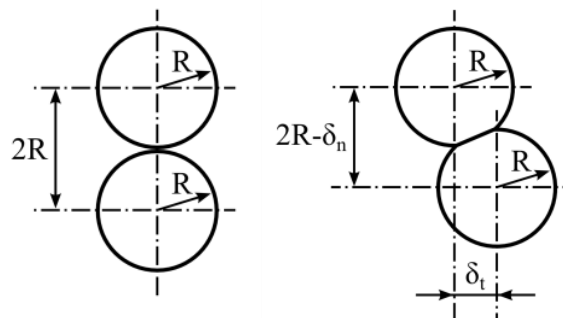


Abbildung 16: Partikelkontakt

Sind die Partikel nicht kugelförmig, wird dieser Vorgang deutlich komplizierter und rechenaufwändiger, worauf in dieser Arbeit, die sich ausschließlich mit sphärischen Partikeln beschäftigt, jedoch nicht näher eingegangen wird.

### 3.3.2.2 Das Hertz-Mindlin Kontaktmodell

Für die Simulation von leicht fließendem Schüttgut eignet sich das Hertz-Mindlin Kontaktmodell, welches auch das Standardmodell in EDEM darstellt. Für kohäsive Schüttgüter kann dieses Modell um eine Kohäsionskraft erweitert werden.

Das Hertz-Mindlin Kontaktmodell (siehe Abbildung 17) berücksichtigt Normal- und Tangentialkräfte zwischen den Partikeln. Diese Kräfte sind abhängig von der Überlappung  $\delta_n$  und  $\delta_t$ , die sich durch die neuen Positionen der Partikel nach einem Zeitschritt ergeben.

Zusätzlich zu den Normal- und Tangentialkräften wirken noch Dämpfungskräfte (Normal- und Tangentialdämpfungskraft). Die Tangentialkraft wird beschränkt durch die Coulombsche Reibungskraft. Auch Rollreibung kann berücksichtigt werden. Für kohäsive Schüttgüter kann zusätzlich eine Normalkraft zwischen den Partikeln angesetzt werden, die von der Kontaktfläche und der Kohäsionsenergiedichte in  $\text{J/m}^3$  (bzw.  $\text{N/m}^2$ ) abhängt.

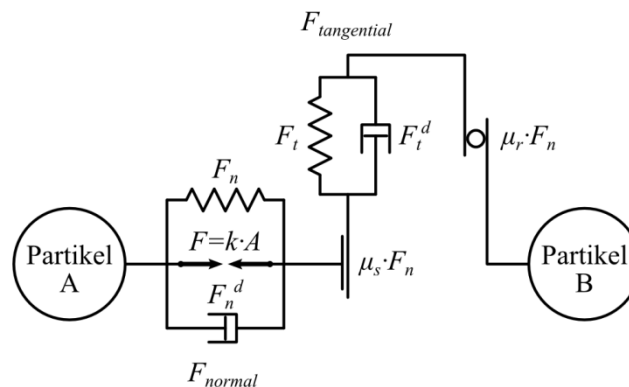


Abbildung 17: Kontaktmodell

#### 3.3.2.2.1 Kontaktkräfte:

Anhand der nachstehend angeführten Formeln und mithilfe bekannter Materialkennwerte können nun aus den ermittelten Überlappungen die an den Partikeln wirkenden Kräfte errechnet werden.

**Normalkraft:**

$$F_n = \frac{4}{3} E' \sqrt{R'} \delta_n^{\frac{3}{2}} \quad 3.1$$

mit dem äquivalenten Radius:

$$\frac{1}{R'} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad 3.2$$

und dem äquivalenten E-Modul: 
$$\frac{1}{E'} = \frac{(1 - \nu_i^2)}{E_i} + \frac{(1 - \nu_j^2)}{E_j}$$
 3.3

**Dämpfungskraft normal:** 
$$F_n^d = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m' v_n^{rel}}$$
 3.4

mit der äquivalenten Masse: 
$$m' = \frac{1}{\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}}$$
 3.5

und 
$$\beta = \frac{\ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}}$$
 3.6

$$S_n = 2E \sqrt{R \delta_n}$$
 3.7

**Tangentialkraft:** 
$$F_T = -S_t \delta_t$$
 3.8

mit 
$$S_t = 8G \sqrt{R \delta_n}$$
 3.9

Die Tangentialkraft wird beschränkt durch  $\mu_s F_n$  (Coulombsche Reibungskraft)

**Dämpfungskraft tangential:** 
$$F_t^d = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_t m' v_t^{rel}}$$
 3.10

**Rollwiderstand:** 
$$F_r = \mu_r F_n$$
 3.11

**Kohäsionskraft:** 
$$F = kA$$
 3.12

Nach dem Durchlaufen der ersten Schleife liegen für alle Partikel und alle anderen Geometrien die in Tabelle 1 gelisteten Informationen vor.



Parameter	Partikel	Wand
Form	Kugel, Scheiben oder Zylinder	Gerade oder Kreis
Größe und Anfangsposition	Koordinaten des Partikelzentrums, für die Kugeln: Radius, für die Zylinder: Radius und Länge	Gerade: Koordinaten der Wandgrenzen Kreis: Koordinaten des Mittelpunktes und Radius
Anfangsgeschwindigkeit	Geschwindigkeiten und Beschleunigungen von Translation und Rotation, Zentrum der Rotation	
Stoffeigenschaften	Dichte, Kontaktsteifigkeit, Reibungs- und Dämpfungskoeffizienten	Kontaktsteifigkeit, Reibungskoeffizient
Anfangsspannungszustand	Kontaktkräfte und -momente, äußere Kräfte und Momente: Schwerkraft, Zentrifugalkraft, Strömungskraft, Adhäsionskraft u. a.	

Tabelle 1: Anfangs- und Randbedingungen sowie Stoffeigenschaften der diskreten Elemente [20]

### 3.3.3 Schleife 2

Im nächsten Schritt bzw. der nächsten Schleife (siehe Abbildung 18) müssen nun die Newton'schen Bewegungsgleichungen für jedes diskrete Element numerisch gelöst werden.

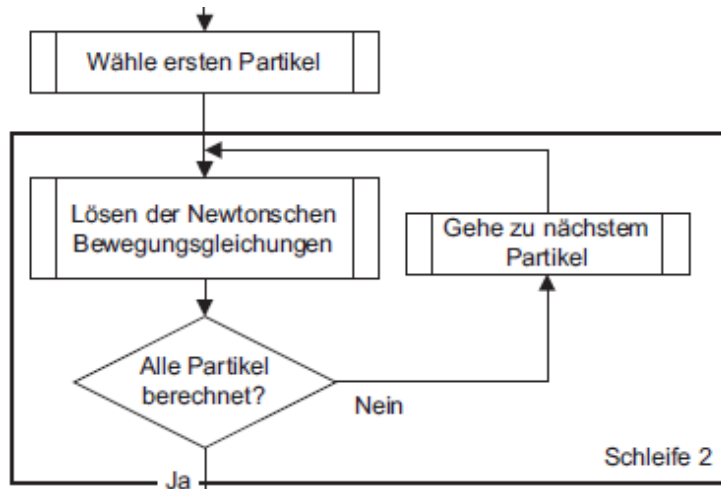


Abbildung 18: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 2 [15]

$$m_i \cdot \vec{a}_i = \sum_{p=1}^k \vec{F}_p \quad 3.13$$

$$J_i \cdot \dot{\vec{\omega}}_i = \sum_{p=1}^r \vec{M}_p \quad i \neq p \quad 3.14$$

Dazu werden die bereits errechneten Kräfte und Momente in die Formeln 3.13 und 3.14 eingesetzt und für jedes Partikel Beschleunigung und Winkelbeschleunigung

bestimmt. Somit kann die Bewegung eines starren Partikels vollständig, also für alle sechs Freiheitsgrade, beschrieben werden.

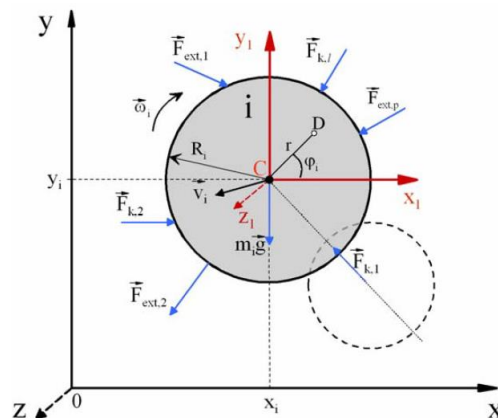


Abbildung 19: Darstellung eines Partikels in globalen und lokalen Koordinaten [20]

Abbildung 19 veranschaulicht die auf ein Partikel wirkenden Kräfte.

### 3.3.4 Schleife 3

Nun sind alle Beschleunigungen für jeden in der Simulation befindlichen Körper zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannt. Im nächsten Schritt wird über einen vorgegebenen Zeitschritt integriert, was die neuen Positionen aller Partikel als Ergebnis liefert, womit man wieder am Anfang des gesamten Kreislaufes angelangt ist (siehe Abbildung 20)

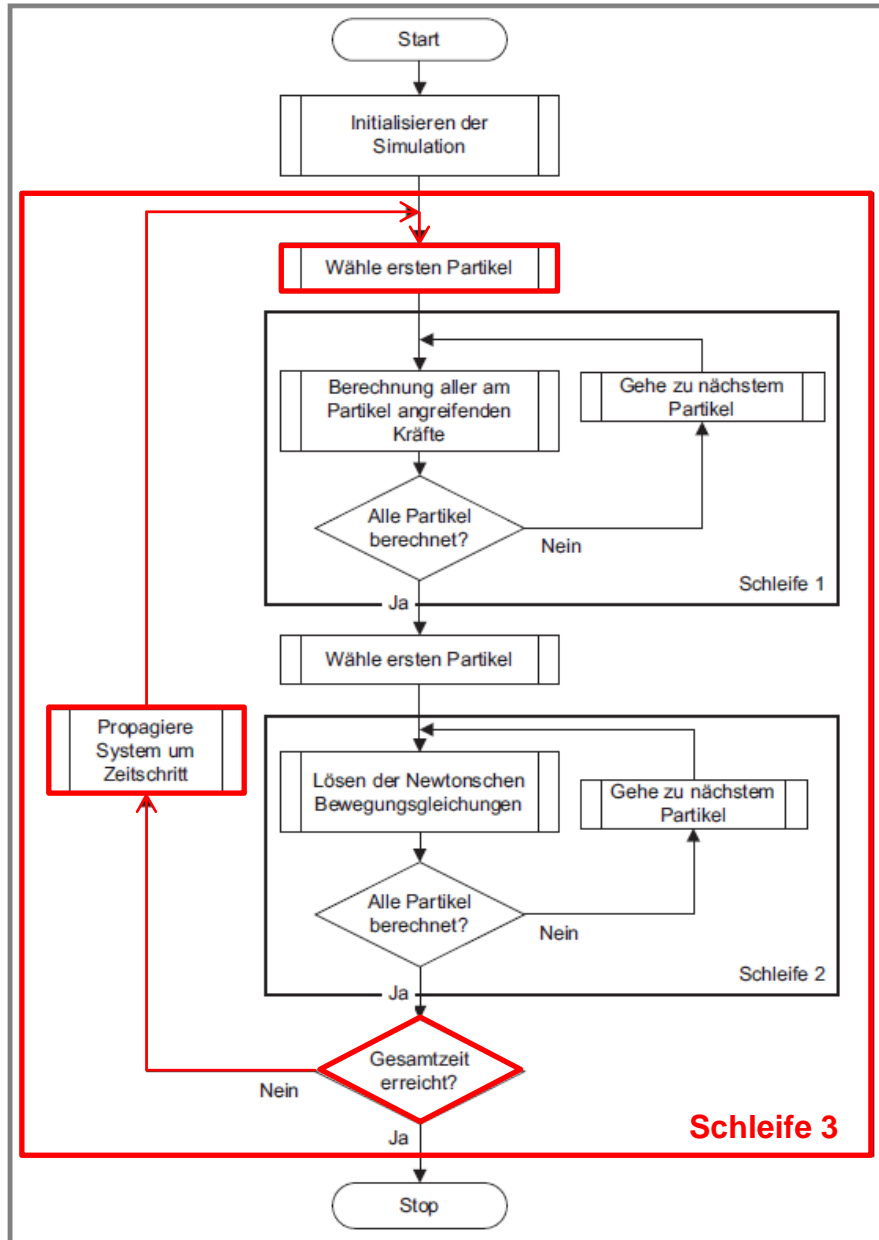


Abbildung 20: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 3 [15]

Aufgrund der neuen Positionen müssen die Partikel erneut in die Zellen der Domäne aufgeteilt, Kontakte und Überlappungen bestimmt und daraus mithilfe des Kontaktmodells die wirkenden Kräfte und Momente errechnet werden. Diese werden dann wiederum in die Newton'schen Bewegungsgleichungen eingesetzt und die Beschleunigungen berechnet. Diesen Kreislauf durchläuft die Simulationssoftware bis das Ende der vorgegebenen Simulationszeit erreicht ist.

Damit eine Simulation stabil läuft, muss der Zeitschritt, auch „Fixed Time Step“ genannt, entsprechend kurz gewählt werden. In EDEM wird die sogenannte Rayleigh-Zeit  $T_R$  als Basis für den Zeitschritt herangezogen.

Die Rayleigh-Zeit ist jene Zeit, die eine Stoßwelle benötigt, um die Energie von einem Partikel auf ein anderes Partikel zu übertragen. Sie ist folgendermaßen definiert:

$$T_R = \frac{\pi R \sqrt{\frac{\rho}{G}}}{0.1631\nu + 0.8766} \quad 3.15$$

Die Erfahrung zeigt, dass Werte zwischen 20% und 40% der Rayleigh-Zeit als Zeitschritt anzusetzen sind, um einen stabilen Simulationslauf zu erreichen. Wenn nun ein Ablauf von 10 Sekunden simuliert werden soll und der Zeitschritt beispielsweise  $5 \cdot 10^{-5}$ s beträgt, wären bereits 200.000 Iterationen notwendig.

## 4 Kalibrierung einer Simulation/eines Modells

Die Wahl der Eingabeparameter ist für den Realitätsgrad der Simulation von immenser Bedeutung. [4] Die Schwierigkeit bei der Kalibrierung des Simulationsmodells besteht nun jedoch darin, dass die meisten Werte der Parameter des Kontaktmodells nicht bekannt sind bzw. auch durch Messungen am realen Schüttgut nur sehr schwer oder mit großem Aufwand bestimmt werden können [21].

Beispielsweise die Werte des Wandreibungswinkels bzw. des inneren Reibwertes, die aus Scherzellenversuchen gewonnen werden, können nicht direkt verwendet werden, da diese Größen z.B. von der Feuchtigkeit und der Korngröße bzw. der Korngrößenverteilung abhängig sind und man in der Simulation üblicherweise größere Partikel verwendet, als es dem Partikeldurchmesser des realen Schüttgutes entspricht, damit die Rechenzeiten verkürzt werden und man in absehbarer Zeit (Größenordnung einige Tage bis max. zwei Wochen) zu Ergebnissen kommt.

Aus diesem Grund müssen Wege gefunden werden, Modelle korrekt zu kalibrieren, auch wenn die realen Materialeigenschaften nicht bekannt sind oder aufgrund zu langer Rechenzeiten adaptiert werden müssen.

Eine mögliche Vorgangsweise zur Bestimmung der Parameter im Simulationsmodell ist in der nachfolgenden Abbildung 21 zusammengefasst.

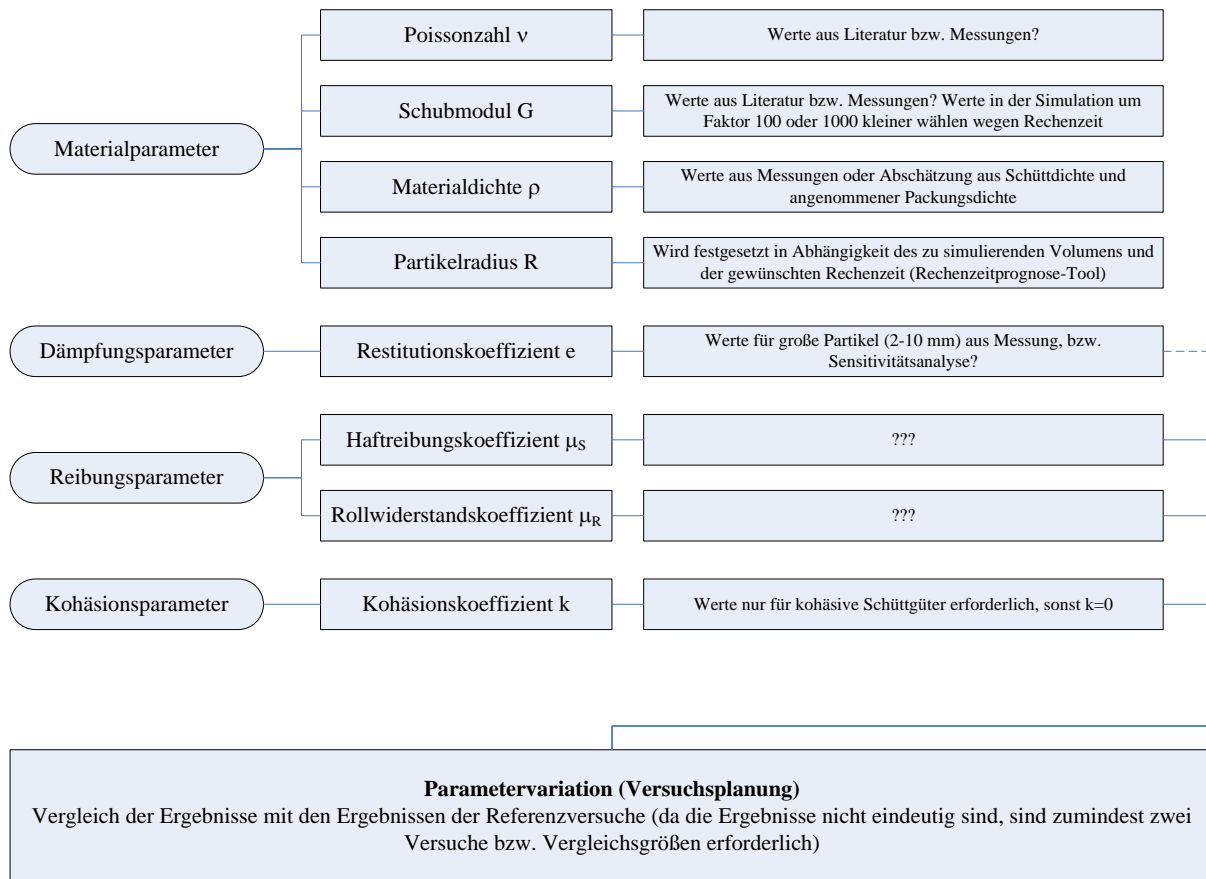


Abbildung 21: Mögliche Vorgangsweise zur Parameterbestimmung

In Abbildung 21 werden die Eingabeparameter in vier Gruppen unterteilt:

1. Materialparameter
2. Dämpfungsparameter
3. Reibungsparameter
4. Kohäsionsparameter

Die Materialparameter sind im Bereich der Schüttgüter noch am ehesten bekannt bzw. mit dem geringsten Aufwand zu ermitteln. Beispielfhaft wird an dieser Stelle etwas näher auf die Ermittlung der Feststoffdichte  $\rho$  und den Partikelradius  $R$  eingegangen.

### 4.1.1 Feststoffdichte $\rho$

Die Feststoffdichte  $\rho$  kann, sofern sie nicht aus Nachschlagewerken bekannt ist, einfach ermittelt werden. Coetzee und Els [21] beispielsweise füllten einen zylindrischen Behälter bekannten Füllvolumens, mit dem zu untersuchenden Granulat. Die Division der gesamten Masse des Gutes durch das Füllvolumen ergibt die mittlere Dichte.

Im äquivalenten Simulationsmodell wurde für die Feststoffdichte der Partikel ein Ausgangswert festgelegt, der 15% über dem der mittleren Dichte lag. Nachdem die Partikel generiert waren, wurde die mittlere Dichte in der Simulation gemessen, mit dem realen Wert verglichen und iterativ abgeglichen. Um eine Genauigkeit von 0,1% zu erreichen, reichten in der Regel drei bis vier Iterationen aus.

Wenn die Schüttguldichte bekannt ist, wovon in der Regel ausgegangen werden kann, kann die Feststoffdichte über den Zusammenhang der Packungsdichte auch direkt errechnet werden. Dies setzt allerdings voraus, dass die Packungsdichte ebenfalls bekannt ist, was schon deutlich seltener der Fall sein wird. In Abschnitt 3.3.1.2 „Wahl der Partikelgeometrie“ wurde bereits begründet, warum in dieser Arbeit ausschließlich kugelförmige Partikel betrachtet werden. Diese Vereinfachung bringt unter anderem auch den Vorteil mit sich, dass die theoretischen Packungsdichten für sphärische Körper bekannt sind.

Die dichtest-mögliche Kugelpackung hat nach Johannes Kepler eine Packungsdichte von  $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74048 \approx 74\%$  [22]. In realen Anwendungsfällen wird dieser Wert jedoch nicht erreicht. Mit Hilfe einiger Versuche ließ sich feststellen, dass die Packungsdichte der kubisch raumzentrierten Kugelpackung  $\frac{1}{8}\pi\sqrt{3} \approx 0,680 \approx 68\%$  für übliche Reibwerte eine annehmbare Näherung darstellt. Mit deren Hilfe ist es nun ausgehend von der Schüttguldichte möglich die Feststoffdichte zu errechnen, sofern auch der Partikelradius R bekannt ist.

#### 4.1.2 Partikelradius R

Wie bereits in Abbildung 21 angeführt, wird der Partikelradius in Abhängigkeit des zu simulierenden Volumens sowie der gewünschten Rechenzeit festgesetzt. Formel 3.15 (Seite 22) zeigt den linearen Zusammenhang zwischen Partikelradius und Rayleigh-Zeit, welche wiederum die Rechenzeit direkt beeinflusst. Nachdem beispielsweise eine Verdoppelung des Radius R die Rechenzeit halbiert, ist eine Erhöhung natürlich anzustreben. Diese ist allerdings nur bis zu einem gewissen Grad sinnvoll, da das makroskopische Verhalten des Gutes erhalten bleiben soll. Somit gilt es ein Optimum im Trade-Off zwischen Ergebnisgenauigkeit und benötigter Rechenzeit zu finden.

### 4.1.3 Haftreibungs- und Rollwiderstandskoeffizient

Haftreibungs- und Rollwiderstandskoeffizienten sind, wie in der Kapiteleinleitung bereits angesprochen, nicht einfach zu ermitteln. In der Literatur finden sich hierzu unterschiedlichste empirische Ansätze und Versuchsprogramme. So unterschiedlich diese auch sein mögen, sie haben in der Regel zwei Dinge gemeinsam:

1. Es werden in der Simulation mikroskopische Parameter (wie z.B. Haftreibungs- und Rollwiderstandskoeffizient) variiert und die daraus resultierenden Änderungen leicht zu messender, charakteristischer, makroskopischer Eigenschaften (wie z.B. Schüttwinkel) beobachtet. [23]
2. Die angesprochenen Parametervariationen erfordern eine Reihe an Simulationsdurchläufen, was selbst bei der Variation lediglich zweier Größen bereits mehrere Tage bis Wochen dauern kann.

Die starken Schwankungen der Rechenzeit bringen einige Nachteile mit sich, die das Bedürfnis, diese im Vorhinein abschätzen zu können verstärken. Im folgenden Kapitel werden die Vorteile und Einschränkungen einer Rechenzeitabschätzung dargelegt und relevante Einflussgrößen analysiert.



## 5 Abschätzung der Rechenzeit

### 5.1 Notwendigkeit und Vorteile

Die Beschleunigung des technologischen Fortschritts bringt unter anderem kurze Produktlebenszyklen und hohe Entwicklungsdynamik mit sich. Damit die Einführung neuer Produkte rentabel bleibt, ist es unerlässlich besonders durch die Verkürzung der Entwicklungszeit Kosten zu sparen und frühestmöglich Marktreife zu erreichen. Dies macht es notwendig den Produktentwicklungs- bzw. Produktverbesserungsprozess zu optimieren, was voraussetzt die Dauer einzelner Phasen abschätzen und minimieren zu können.

Sind DEM-Simulationen nun Teil eines solchen Prozesses sollte auch ihr zeitlicher Aufwand hinreichend genau prognostiziert werden können. Dies stellt allerdings eine besondere Herausforderung dar, da unterschiedliche Anwendungen Simulationen mit sehr unterschiedlichen Eingabeparametern zur Folge haben, deren direkte Auswirkungen auf die Rechenzeit jedoch nicht allgemein bekannt sind.

Ziel dieser Arbeit ist es nun den Einfluss einzelner Eingabeparameter sowie des Simulationsaufbaus auf die Rechenzeit zu untersuchen, etwaige andere Einflussgrößen zu identifizieren und anhand dieser Informationen eine Formel zu formulieren, die einerseits in der Lage ist die tatsächliche Rechenzeit mit ausreichender Genauigkeit vorherzusagen und es andererseits ermöglicht die Eingabewerte so zu variieren, dass eine Vorgaberechenzeit eingehalten wird.

### 5.2 Einschränkungen

Neben den Eingabeparametern und dem Simulationsaufbau stellen natürlich die zur Verfügung stehende Rechnerlandschaft sowie die verwendete Software die Haupteinflussgrößen auf die Rechenzeit dar. Die in dieser Arbeit genannten Beispiele und Erkenntnisse beziehen sich ausschließlich auf die bereits erwähnte Software EDEM von DEM-Solutions. In wie weit die Erkenntnisse auf andere Softwarelösungen übertragbar sind, wurde nicht untersucht.

EDEM Lizenzen beziehen sich immer auf eine bestimmte Anzahl an Prozessorkernen. So kann beispielsweise eine Lizenz für zwei, vier, acht oder mehr Kerne bezogen werden.

Wird in einem Unternehmen viel und regelmäßig simuliert, gilt es die Fragen zu klären, wie viele Lizenzen erworben werden sollen und ob die durch kürzere Berechnungszeiten eingesparten Kosten, die erhöhten Kosten für zusätzliche Lizenzen auch wirklich übersteigen. Um diese Frage klären zu können, muss bekannt sein, um wie viel jede zusätzliche Lizenz die Rechenzeit zu verkürzen vermag.

Aus diesem Grund wurden zwei vergleichende Versuchsreihen mit einerseits zwei und andererseits acht genutzten Prozessorkernen durchgeführt. Vorweg soll noch erwähnt sein, dass andere Hardwarekomponenten, deren Eigenschaften die Verarbeitungszeit auch beeinflussen wie zum Beispiel die Festplattenschreib- und -lesegeschwindigkeit, die Eigenschaften des Arbeitsspeichers oder die Prozessorleistung bei diesen als auch bei allen anderen in dieser Arbeit besprochenen Versuche nicht variiert wurden.

### **5.2.1 Rechenzeitvergleich: 2 vs. 8 Prozessorkerne**

Als Grundlage dieses Vergleichs wurden mehrere möglichst einfache, aber doch aussagekräftige Versuchsaufbauten gewählt, die mit unterschiedlichen Eingangswerten simuliert wurden.

Wie in den folgenden Kapiteln erklärt werden wird, spielt die Art der Partikeltätigkeit eine wichtige Rolle, da je nachdem ob Partikel beispielsweise rutschen, fallen oder geschoben werden, unterschiedlich viele miteinander in Berührung stehen. Aus diesem Grund wurde bei der Auswahl der Versuchsaufbauten darauf geachtet, mehrere Partikeltätigkeiten abzubilden.

Nachdem alle Versuchsaufbauten und Parametervariationen zu analogen Ergebnissen führten, sei an dieser Stelle nur auf den in Abbildung 22 dargestellten Aufbau näher eingegangen.

#### **5.2.1.1 Versuchsablauf**

Die Partikel wurden in einem würfelförmigen Behälter willkürlich im Raum angeordnet generiert und begannen aufgrund der Scherkraft zu fallen, bis sie auf die Zwischenplatte trafen. Nachdem alle Partikel auf dieser zum Liegen gekommen waren, wurde die Zwischenplatte seitlich entfernt und die Partikel begannen erneut zu fallen bis sie in einem an das Fallrohr anschließenden Behälter aufgefangen

wurden. Die Simulation wurde nach einer vorgegebenen Simulationszeit von 4s abgebrochen.

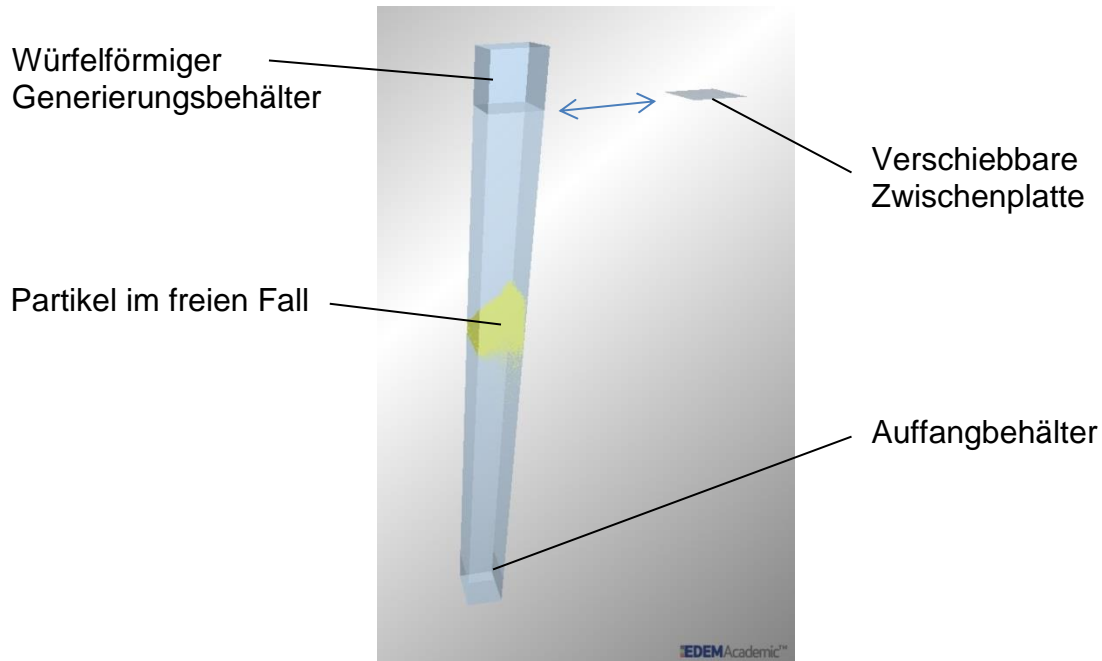


Abbildung 22: Versuchsaufbau Rechenzeitvergleich

## 5.2.1.2 Versuchsergebnisse

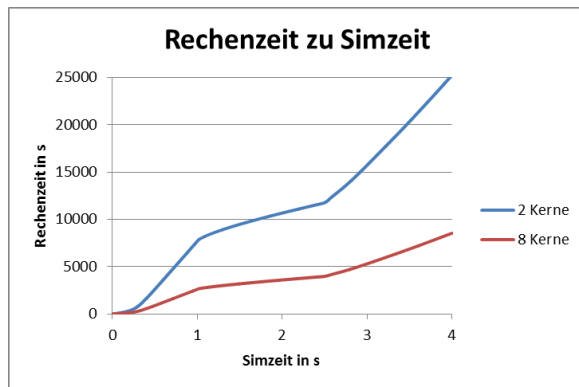


Abbildung 23: Rechenzeit zu Simulationszeit

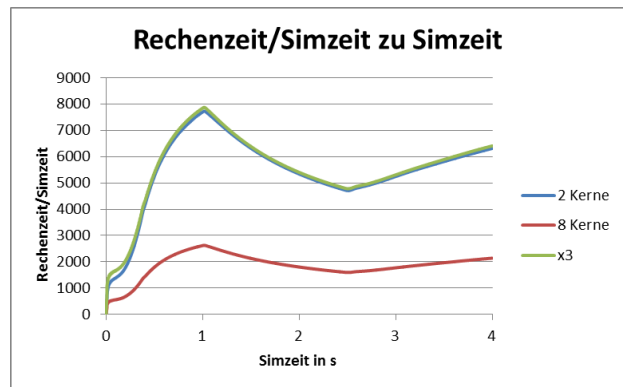


Abbildung 24: Rechenzeit pro Simulationszeit zu Simulationszeit

Abbildung 23 und Abbildung 24 zeigen die Ergebnisse der vergleichenden Versuchsreihe. In erstgenannter ist der Verlauf der benötigten Rechenzeit über die Simulationszeit aufgetragen, wobei die rote Linie die Berechnung bei Nutzung lediglich zweier Prozessorkerne, die blaue Linie die Berechnung bei Nutzung von acht Kernen beschreibt.

Unter Rechenzeit versteht man jene Zeit, die der Computer benötigt um die Berechnungen durchzuführen. Die Simulationszeit ist die Echtzeit, die in der Simulation dargestellt wird.

In Abbildung 24 ist das Verhältnis der Rechenzeit zu Simulationszeit über der Simulationszeit aufgetragen. Auch hier bezieht sich die rote Linie auf die Berechnung mit acht Kernen, die blaue auf jene mit zwei.

Die Berechnung mit acht Prozessorkernen, aber sonst unveränderten Bedingungen, verläuft ziemlich genau dreimal so schnell, wie mit zwei Prozessorkernen. Um dies zu veranschaulichen wurden die Werte der 8-Kerne-Berechnung mit dem Faktor 3 multipliziert und in grün in das Diagramm eingefügt.

Benchmark-Tests, wie der hier besprochene, werden auch vom Hersteller durchgeführt und zur Verfügung gestellt. In diesem Fall decken sich die konkreten Ergebnisse des verwendeten Rechners auch mit jenen, die von der Firma DEM-Solutions angegeben wurden.

### 5.3 Einflussgrößen auf die Rechenzeit

In diesem Abschnitt werden nun die einzelnen Einflussgrößen auf die Rechenzeit und vorgenommene Vereinfachungen näher betrachtet. Um dies möglichst übersichtlich zu tun, wird die Untergliederung an den Ablauf der Berechnungsvorgänge, welcher bereits in Abschnitt 3.3 „Simulationsmethodik und Ablauf“ vorgestellt wurde, angelehnt.

Abbildung 25 zeigt als Überblick diese Einflussgrößen den einzelnen Tätigkeiten bzw. Tätigkeitsgruppen des Flussdiagramms zugeordnet.

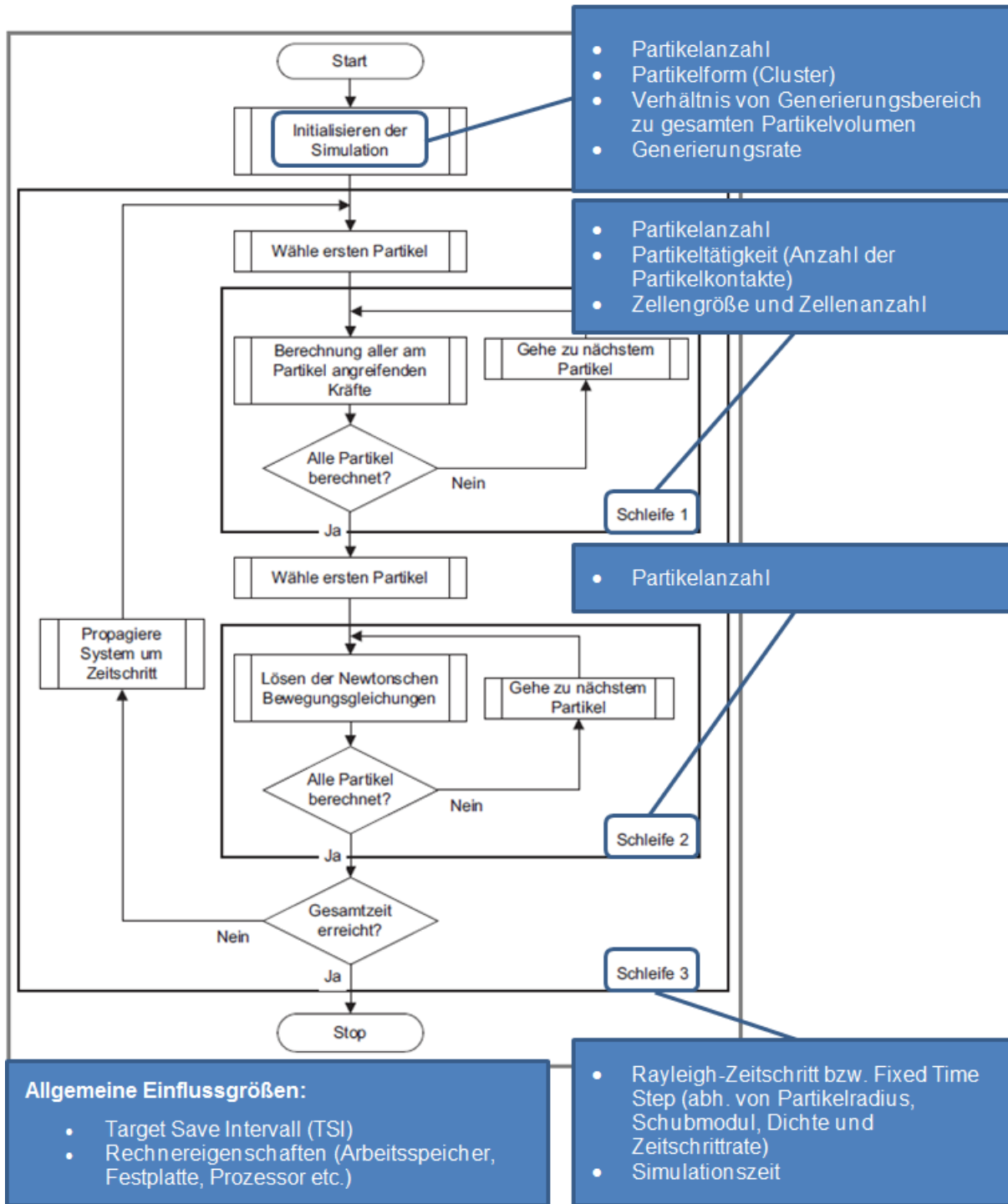


Abbildung 25: Einflussgrößen auf die Rechenzeit

### 5.3.1 Initialisierung

#### 5.3.1.1 Partikelgenerierung

In der Initialisierungsphase werden die für die Simulation benötigten Partikel generiert. Je nach Art des zu untersuchenden Aufbaus kann unterschiedlich vorgegangen werden.

Soll ein kontinuierlicher Massenstrom, wie er beispielsweise bei Stetigförderern oft auftritt, simuliert werden, kann eine Generierungsrate bei unlimitierter Partikelanzahl festgesetzt und einer Generierungsfläche zugewiesen werden. Die Fläche dient dann als virtuelles Fenster, durch das die Partikel mit definierter Geschwindigkeit, Positionierung und Orientierung die Simulationsdomäne betreten. In der Regel wird man darauf achten, dass genau so viele Partikel generiert werden, wie an anderer Stelle die Domäne verlassen, sodass die gesamte Anzahl der Partikel, die sich in der Simulation befinden, konstant bleibt.

Wird für die Simulation kein kontinuierlicher Massenstrom benötigt, kann zusätzlich zur Generierungsrate eine fixe Anzahl an zu generierenden Partikeln definiert und einem Generierungsvolumen zugewiesen werden. Dies ist die Situation von der hier ausgegangen wird.

Die genannte Generierungsrate kann entweder in „Partikelanzahl pro Sekunde“ oder in „gesamte Partikelmasse pro Sekunde“ vorgegeben werden.

Sollen Partikel in einem vorgegebenen Volumen generiert werden, ist die bereits in Abschnitt 3.3.1.3 „Definition von Eigenschaften und Generierung des Schüttgutes“ erklärte Bedingung, dass sich Partikel nicht überlappen dürfen, zu beachten. Bei Überlappung schlägt die Generierung nämlich fehl und ein neuer Versuch an neuer Position wird unternommen.

Aus diesem Grund ist es wichtig das definierte Generierungsvolumen in Relation zum von allen zu generierenden Partikeln benötigten Raum groß zu halten. Abbildung 26 zeigt auf der Ordinate die Anzahl der generierten Partikel über der Simulationszeit (in Sekunden) auf der Abszisse.

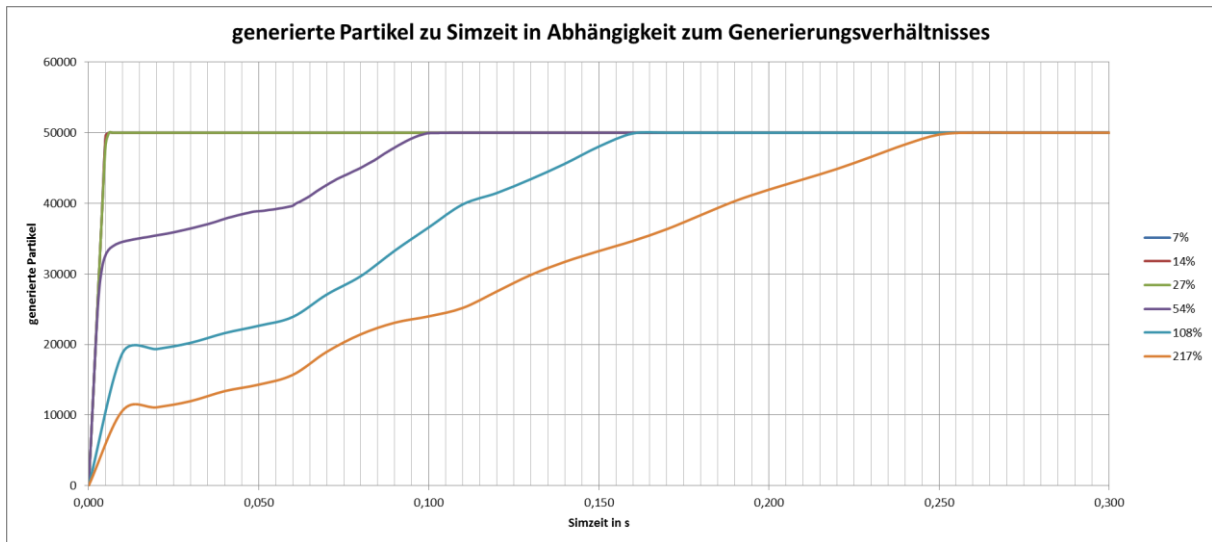


Abbildung 26: Generierte Partikel über Simulationszeit in Abhängigkeit zum Generierungsverhältnis

Jede Linie bezieht sich auf ein unterschiedliches Generierungsverhältnis  $\eta$ . Wobei folgender Zusammenhang gilt:

$$\eta = \frac{\text{gesamtes Partikelvolumen}}{\text{Generierungsvolumen}} \quad 5.1$$

Erst ab einem Verhältnis von  $\eta_4=0,54$  ist eine Verzögerung der Partikelgenerierung zu erkennen. Der Verläufe der Graphen der ersten drei Generierungsverhältnisse ( $\eta_1=0,0677$ ,  $\eta_2=0,1355$ ,  $\eta_3=0,271$ ) sind nahezu deckungsgleich. In allen drei Fällen sind spätestens bei einer Simulationszeit von 0,005s alle Partikel generiert. Die vertikalen Gitternetzlinien sind im Abstand des in dieser Versuchsreihe verwendeten Target Save Intervalls, dem Intervall in welchem vorgegebene Werte wie beispielsweise die aktuelle Partikelanzahl gespeichert werden, angeordnet. In der Abbildung wurden die in diesem Intervall zur Verfügung stehenden Werte spline-interpoliert und daraus der kontinuierliche Verlauf generiert.

Abbildung 26 gibt jedoch keinen Aufschluss darüber, wie lange für die angesprochenen 0,005s der Simulationszeit tatsächlich gerechnet wird. Dies ist in Abbildung 27 für  $\eta_1=0,068$ ,  $\eta_2=0,136$  und  $\eta_3=0,271$  dargestellt. Die Abweichung beträgt in diesen Fällen jeweils nur einige wenige Sekunden. Bei weiter steigendem  $\eta$ , steigt die Rechenzeit jedoch drastisch an. Deshalb wird empfohlen ein ausreichend großes Generierungsvolumen festzulegen (ein Verhältnis von  $\eta < 0,25$  wäre anzustreben, d.h. das Generierungsvolumen sollte mindestens das Vierfache

des gesamten Partikelvolumens ausmachen), weil dann der Einfluss der Generierung in Bezug auf die gesamte Rechenzeit vernachlässigt werden kann.

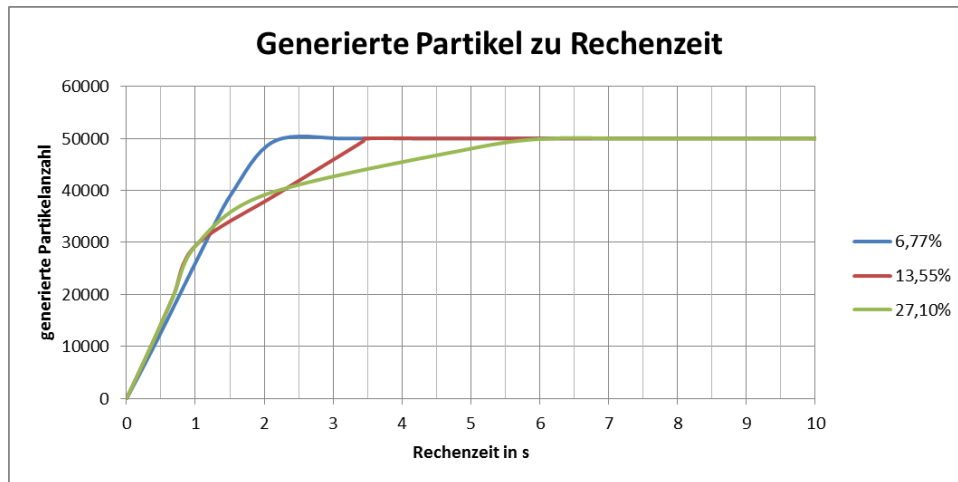


Abbildung 27: Anzahl generierter Partikel über der Rechenzeit in Abhängigkeit zum Generierungsverhältnis

Ein weiterer Grund für die Empfehlung im Bereich von  $\eta < 0,25$  zu bleiben ist, dass die Form des Generierungsvolumens speziell bei höheren  $\eta$ -Werten vermehrt eine Rolle spielt.

### 5.3.1.2 Partikelform

In Abschnitt 3.3.1.2 „Wahl der Partikelgeometrie“ wurde angesprochen, dass komplexe Partikelformen durch aus kugelförmigen Partikeln zusammengesetzten Clustern angenähert werden können. Dies hat, im Gegensatz zum restlichen Simulationsverlauf, auf die ohnehin sehr kurze Generierungsdauer nur geringen Einfluss.

### 5.3.1.3 Bewegte Geometrien

In nahezu allen Anlagen und Maschinen zur Schüttgutlagerung oder –manipulation werden gewisse Geometrien bewegt. Dies können beispielsweise Förderbänder, Schaufeln oder Becherwerke sein. Dem betrachteten Anwendungsfall entsprechend, müssen auch in der Simulation Bewegungen definiert werden. Bewegte Teile fordern eine erhöhte Rechnerleistung, deren Umfang ebenfalls in die Abschätzung einfließen muss.

Geometriebewegungen nehmen auf zweierlei Art Einfluss auf die Rechenzeit:

1. Bewegte Geometrien beeinflussen die Anzahl der Partikelkontaktpunkte, da sie den Zustand bzw. die Position der Partikel verändern. Liegen die Elemente



beispielsweise ruhig aufeinander, wie dies z.B. bei der Lagerung in einem Bunker der Fall wäre, steht jedes Partikel im Schnitt mit ca. sechs anderen Partikeln in Kontakt. Werden sie jedoch mit einer Förderschnecke oder einem Schieber bewegt, so ergeben sich im Schnitt weniger Kontakte mit anderen Partikeln, was sich auf die Rechenzeit auswirkt. Abbildung 28 zeigt dies in Form eines Diagramms. In Phase 1 wird die vorgegebene Anzahl an Partikeln erzeugt und frei im Raum des Generierungsvolumens platziert. Es gibt keine oder kaum Partikelkontakte. In Phase zwei sind die Partikel am Boden des Bunkers zur Ruhe gekommen und jedes Partikel steht, wie oben bereits erwähnt, im Schnitt mit rund sechs anderen Elementen in Kontakt. In Phase 3 wird nun der Bunker geöffnet und das Schüttgut durch die Förderschnecken vom Bunker abgezogen. Es ist zu erkennen, wie sich dadurch das Verhältnis Rechenzeit/Simulationszeit verringert. In Zahlen ausgedrückt, wäre der Zusammenhang wie folgt: In Phase 1 werden im Mittel rund 150s für 1s Simulationszeit gerechnet, in Phase 2 rund 847s, in Phase 3 hingegen nur mehr rund 730s.

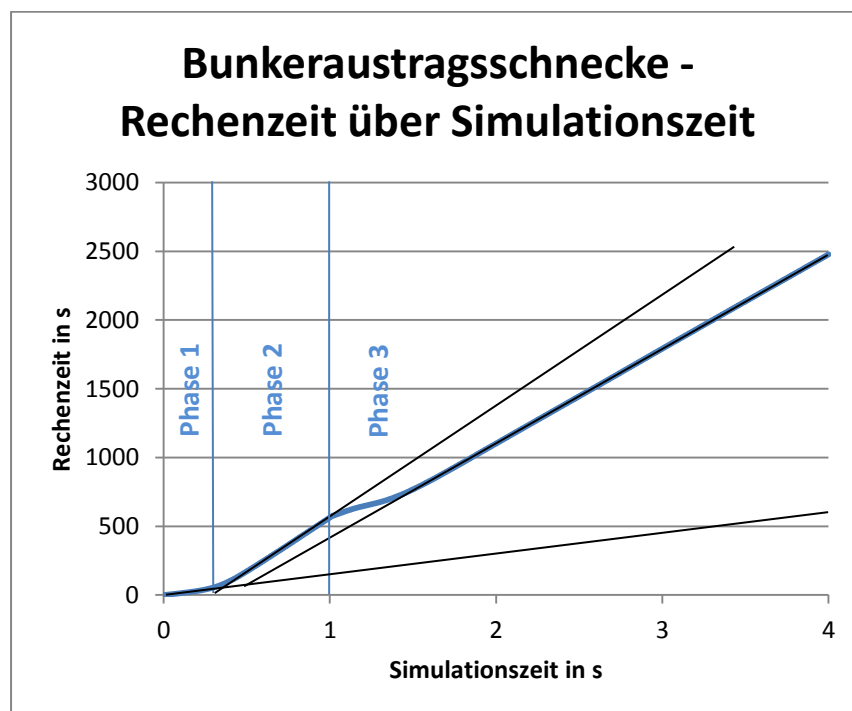


Abbildung 28: Einfluss der Geometriedynamik am Beispiel einer Bunkeraustragsschnecke

Der Einfluss der Anzahl der Partikelkontakte auf die Rechenzeit wird in Abschnitt 3.3.2 näher betrachtet.

2. Die Bewegungen der Geometrien zu simulieren fordert auch unabhängig davon, ob sie in Kontakt mit dem zu simulierenden Gut stehen, Rechenkapazitäten. Wie viel, hängt von der Art, Geschwindigkeit und Beschleunigung der Bewegung sowie der Größe der bewegten Fläche oder Geometrie ab.

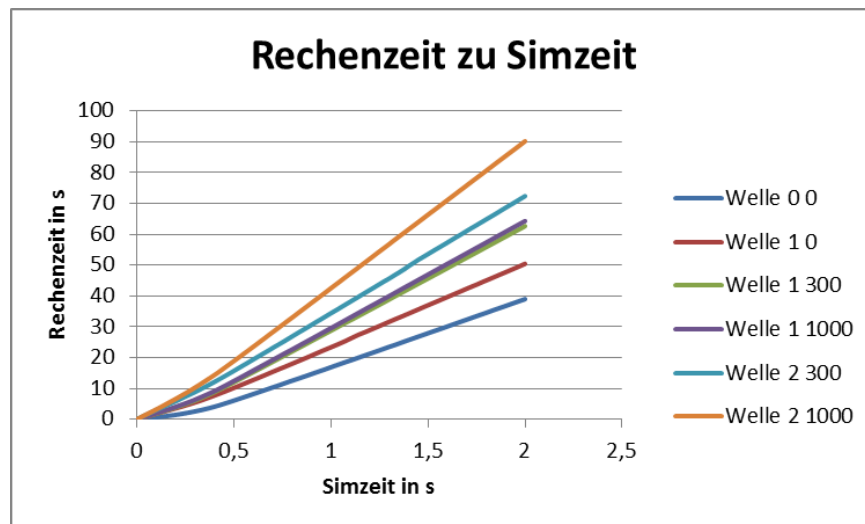


Abbildung 29: Einfluss der Geometriebewegung ohne Partikelkontakt

Abbildung 29 zeigt sechs Simulationen in denen je keine, eine oder zwei Förderschnecken mit vorgegebener Winkelgeschwindigkeit bewegt werden. Die Förderschnecke transportiert jedoch kein Gut, steht also nicht in Kontakt mit den Partikeln und beeinflusst die Anzahl der Partikelkontakte deshalb nicht. „Welle 1 300“ bedeutet beispielsweise, dass 1 Welle mit einer Winkelgeschwindigkeit von 300 Grad pro Sekunde bewegt wird. Es ist klar zu erkennen, dass je mehr und je schneller die Dynamik ist, desto mehr Zeit nimmt die Berechnung in Anspruch. Interessant ist auch der Sachverhalt, dass allein die Deklaration einer Bewegung, selbst wenn eine Geschwindigkeit von 0 Grad pro Sekunde definiert wird, wie dies bei „Welle 1 0“ der Fall ist, bereits die Rechenzeit erhöht.

### 5.3.2 Schleife 1

In Schleife 1 werden, wie bereits in Abschnitt 3.3.2 erklärt, alle angreifenden Kräfte für jedes Partikel einzeln berechnet. Die dafür benötigte Rechenzeit hängt in starkem Maß von den drei Parametern Zellengröße (bzw. Zellenanzahl), Partikelanzahl und Partikeltätigkeit ab.

### 5.3.2.1 Zellengröße

Im Unterkapitel 3.3.2.1 „Kontakterkennung“ wurde erklärt, wie der Prozess der Nachbarschaftserkennung abläuft und wie im nächsten Schritt die Kontaktpunkte aller Partikel ermittelt werden. Es wurde erwähnt, dass eine geschickte Wahl der Zellengröße den Rechenaufwand reduzieren kann, allerdings noch offengelassen wie die optimale Zellengröße ermittelt werden könne.

Die Rechenschritte, die in direktem Zusammenhang mit der Zellengröße stehen und von der Simulationssoftware für jeden Zeitschritt durchlaufen werden müssen, können wie folgt in drei Phasen eingeteilt werden:

1. Alle Partikel müssen einer oder mehreren Zellen zugewiesen werden.
2. Es müssen alle Zellen ermittelt werden, die mehr als ein Partikel enthalten.
3. Für jede dieser Zellen müssen alle Partikel-Partikel- und Partikel-Wand-Kontaktstellen ausfindig gemacht werden.

Die Anzahl der notwendigen Rechenoperationen jeder Phase hängt von mehreren Einflussgrößen ab.

Nachdem in der ersten Phase ein jedes Partikel einer oder mehreren Zellen zugewiesen werden muss, ist somit zumindest eine Operation pro Partikel notwendig. Wenn ein Partikel mehreren Zellen zugewiesen werden muss, weil es die Zellengrenzen überschreitet (siehe Partikeln 1, 2 und 5 in Abbildung 30) erhöht dies zusätzlich auch den Speicheraufwand. Für wie viele Elemente dies zutrifft ist natürlich proportional zur Zellengröße bzw. zum Zellengröße/Elementgröße-Verhältnis.

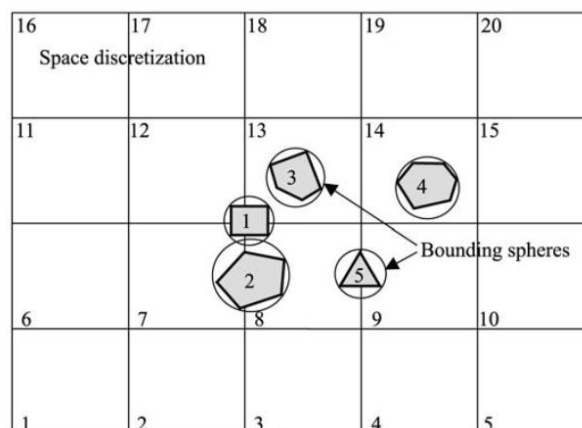


Abbildung 30: Einteilung der Kugeln in Zellräume für den zweidimensionalen Fall [19]

In der zweiten Phase müssen alle Zellen ermittelt werden, die mehr als ein Partikel enthalten. Nachdem dazu jede Zelle geprüft werden muss, ist die Anzahl der Rechenoperationen gleich der Zellenanzahl.

In der dritten Phase, in der alle Kontaktstellen ermittelt werden, ist der Rechenaufwand abhängig von der Anzahl der Zellen, die mehr als ein Element enthalten und von der konkreten Anzahl an Elementen in jeder dieser Zellen. Abbildung 31 zeigt den quadratischen Zusammenhang zwischen der Anzahl der Elemente pro Zelle und die für diese Zelle daraus resultierende Anzahl an Rechenoperationen, um alle Kontaktstellen aufzufinden.

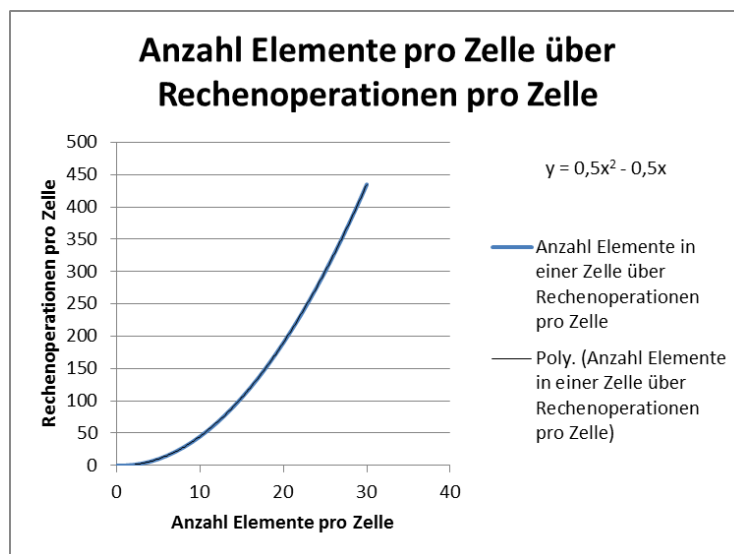


Abbildung 31: Zusammenhang der Rechenoperationen pro Zelle mit der Anzahl der Elemente pro Zelle

Bei näherer Betrachtung wird klar, dass es sinnvoll ist die Zellenseitenlänge im Bereich des Partikeldurchmessers zu positionieren - so auch der Vorschlag von DEM-Solutions [18]. Ein Algorithmus, der die optimale Zellengröße beschreibt, ist jedoch sehr schwer zu formulieren, da der tatsächliche Rechenaufwand zweier der drei Phasen sehr stark von der tatsächlichen Partikelverteilung abhängt, welche mit Wahrscheinlichkeitsberechnungen kaum realitätsnah beschrieben werden kann. Zusätzlich spielt auch, vor allem in Phase 1, die Speichergeschwindigkeit des genutzten Rechners eine nicht zu vernachlässigende Rolle.

Kotov [24] verweist aus diesem Grund auf die Nutzung heuristischer Algorithmen, DEM-Solutions empfiehlt die Seitenlänge der Zellen abhängig von der Speicherkapazität im Bereich von rund  $2 \cdot R_{min}$  anzusiedeln, wobei  $R_{min}$  den Radius des kleinsten Partikels bezeichnet. [18]

Im Zuge dieser Arbeit wurde ein Versuchsprogramm erstellt, um anhand empirischer Ergebnisse Richtwerte für eine optimale Zellengröße vorgeben und deren Einfluss auf die Rechenzeit bestimmen zu können.

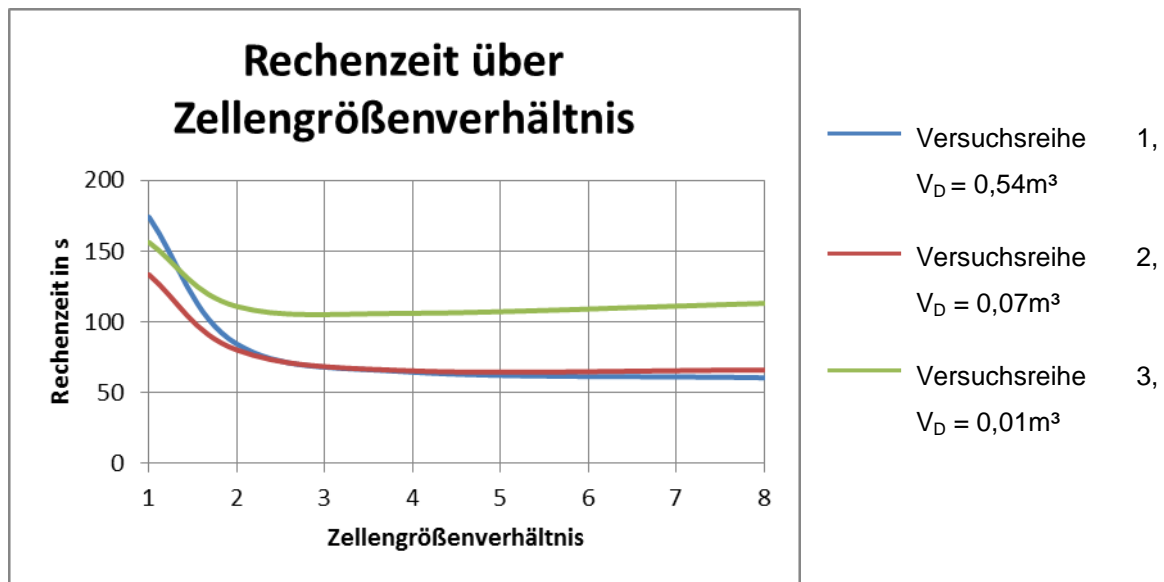


Abbildung 32: Rechenzeit über Zellengrößenverhältnis

Abbildung 32 zeigt drei der durchgeführten Versuchsreihen. Jede Versuchsreihe hatte unterschiedliche Parameter und auch ein unterschiedliches Domänenvolumen  $V_D$ , sodass ein gleiches Zellengrößenverhältnis nicht die gleiche Zellenanzahl zur Folge hatte. Über alle Versuche hinweg erwies sich im Mittel ein Zellengrößenverhältnis von 4, also einer Zellenseitenlänge von  $4 \cdot R_{min}$ , mit guter Näherung als rechenzeitminimierend. Aus diesem Grund wurde davon abgesehen eine in den empirischen Werten fußende Formel zu bestimmen, die den Einfluss der Zellengröße und Zellenanzahl noch genauer bestimmen würde, sondern entschieden, diesen Wert als Invariante für alle weiteren Versuche festzulegen.

### 5.3.2.2 Partikelanzahl und Anzahl der Partikelkontakte

Der Einfluss der Partikelanzahl auf die Rechenzeit steht in der ersten Schleife in teilweiser Wechselwirkung mit der Zellengröße, wie dies bereits aus obigem Abschnitt hervorgeht. Speziell in Phase 1 der Nachbarschaftserkennung ist sie die Haupteinflussgröße.

Nachdem die Partikelkontakte ermittelt wurden, werden im nächsten Schritt für jedes Element alle darauf einwirkenden Kräfte und Momente bestimmt, weshalb auch hier

die Partikelanzahl sowie die Anzahl der Partikelkontakte die Menge der notwendigen Rechenoperationen vorgibt.

### 5.3.3 Schleife 2

In Schleife 2 werden die Newton'schen Bewegungsgleichungen errechnet. Selbst wenn auf ein Partikel keine Kontaktkräfte wirken, so wirkt zumindest die Schwerkraft, weshalb die Anzahl der Rechenoperationen durch die Menge von Elementen in der Simulation bestimmt wird, da für jedes Element eine Gleichung pro Freiheitsgrad gelöst werden muss (siehe auch Abschnitt 3.3.3, Seite 19ff).

### 5.3.4 Schleife 3

In Schleife 3 wird das gesamte System um einen Zeitschritt propagiert, indem, die in Schleife 2 für jedes Partikel errechneten Bewegungsgleichungen, über einen vorgegeben Zeitschritt integriert werden, woraus wiederum die neue Position eines jeden Elements bestimmt wird.

#### 5.3.4.1 Rayleigh-Zeitschritt

Nachdem, wie in Abschnitt 3.3.4 (Seite 20f) erklärt wurde, die Rayleigh-Zeit als Grundlage für den gewählten Zeitschritt herangezogen wird, beeinflusst sie direkt die Anzahl an notwendigen Iterationsschritten, welche sich wiederum direkt auf die Rechenzeit auswirkt. Doppelt so viele zu durchlaufende Rechenzyklen bedeuten auch den doppelten Rechen- und Zeitaufwand.

Um die Anzahl der Rechenzyklen zu verringern, wird also versucht die Rayleigh-Zeit  $T_R$  zu vergrößern.

$$T_R = \frac{\pi R \sqrt{\frac{\rho}{G}}}{0.1631\nu + 0.8766} \quad 5.2$$

Dies ist am leichtesten durch eine Verringerung des Partikel-Schubmoduls  $G$  oder eine Erhöhung des Partikelradius  $R$  zu erreichen.

#### 5.3.4.1.1 Anpassung des Partikel-Schubmoduls

Die Variation des Partikel-Schubmoduls wird bei DEM-Simulationen sehr häufig angewandt. Abbildung 33 zeigt am Beispiel einer Siloleerung grafisch, dass dadurch die Rechenzeit beträchtlich verkürzt werden kann.

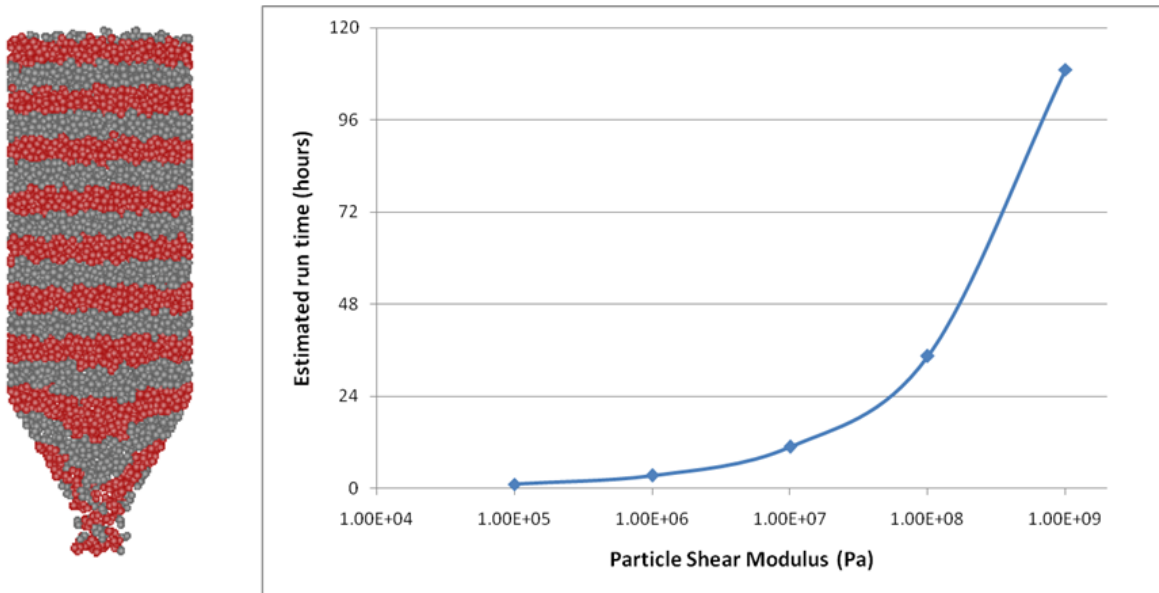


Abbildung 33: Einfluss des Partikel-Schubmoduls auf die Rechenzeit [25]

Die Anpassung des Partikel-Schubmoduls ist nur in so weit sinnvoll, als dass die relevanten Ergebnisgrößen der Simulation dadurch nicht merkbar oder nur minimal beeinflusst werden. Hierfür ist keine allgemeingültige Faustregel vorhanden, da dies vor allem vom Simulationsaufbau und den relevanten Größen abhängig ist. Aus diesem Grund wird von DEM-Solutions empfohlen, für den konkreten Anwendungsfall eine kurze Fallstudie durchzuführen, anhand welcher die Reduktion des Partikel-Schubmoduls festgelegt werden soll.

Beim Beispiel der Siloleerung bleibend, sollen zwei Kontrollmöglichkeiten betrachtet werden.

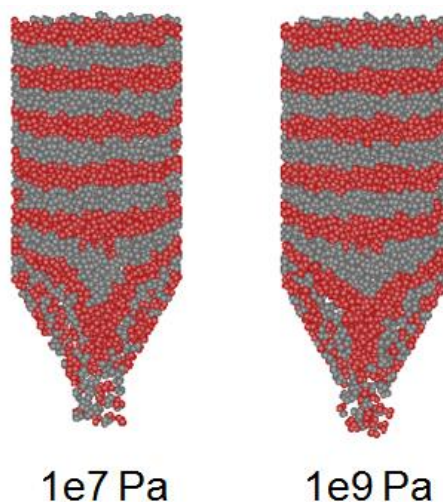


Abbildung 34: Vergleich: Siloleerung bei unterschiedlichem Partikel-Schubmodul [25]

Abbildung 34 stellt zwei Simulationen mit variiertem Partikel-Schubmodul gegenüber. Die Reduktion des Schubmoduls von  $1 \cdot 10^9 Pa$  auf  $1 \cdot 10^7 Pa$  bewirkt eine Verkürzung der Rechenzeit um den Faktor 10 ohne optisch offensichtlicher Änderung des Materialverhaltens beim Entleeren.

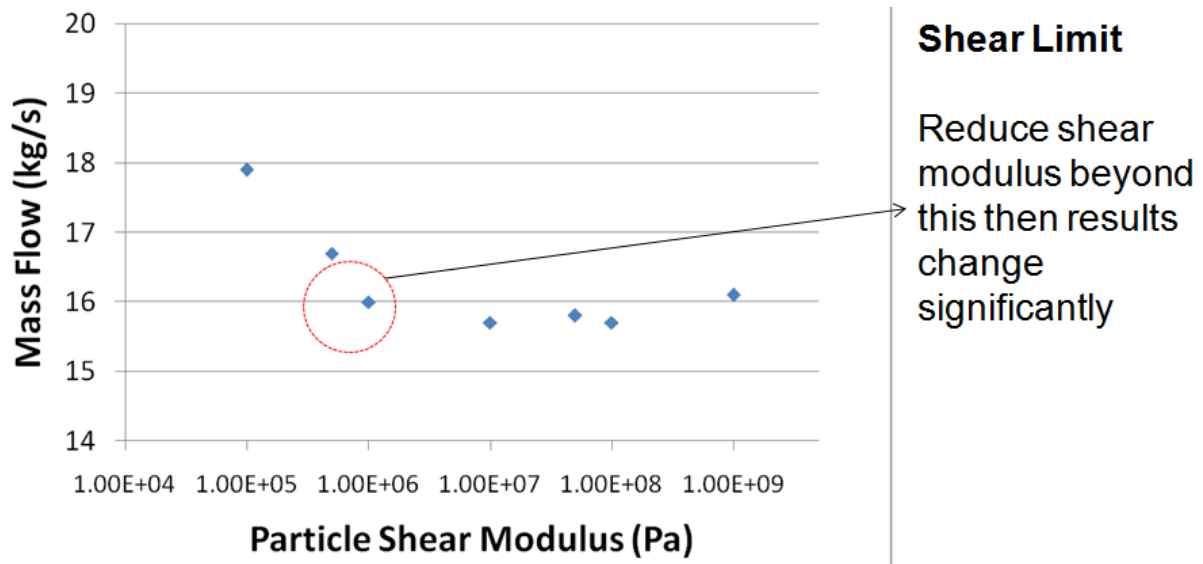


Abbildung 35: Einfluss des Partikel-Schubmoduls auf den Massenstrom [25]

Abbildung 35 zeigt eine zweite Möglichkeit zur Kontrolle des Einflusses einer Schubmodulvariation auf eine relevante Ergebnisgröße, in diesem Fall den Massenstrom. Reduktion bis hin zu einem Wert von  $1 \cdot 10^6 Pa$  haben eine noch zu vernachlässigende Auswirkung. Weiteres unterschreiten dieser Schranke führt jedoch zu einem deutlichen Ansteigen des Massenstromes. Nachdem sich dieser Übergangsbereich je nach Anwendungsfall verschieben kann, verdeutlicht dieses Beispiel sehr anschaulich die Notwendigkeit von Fallstudien, wenn die Rechenzeit minimiert werden soll.

#### 5.3.4.1.2 Anpassung des Partikelradius

Ebenso wie die Variation des Partikel-Schubmoduls  $G$ , wird auch die Variation des Partikelradius  $R$  häufig angewandt um Simulationen zu beschleunigen. Im Gegensatz zum Schubmodul geht dieser jedoch linear in die Gleichung zur Bestimmung der Rayleigh-Zeit ein (siehe Formel 5.2, Seite 40) und nimmt somit auch linearen Einfluss auf die Rechenzeit (siehe Abbildung 36).



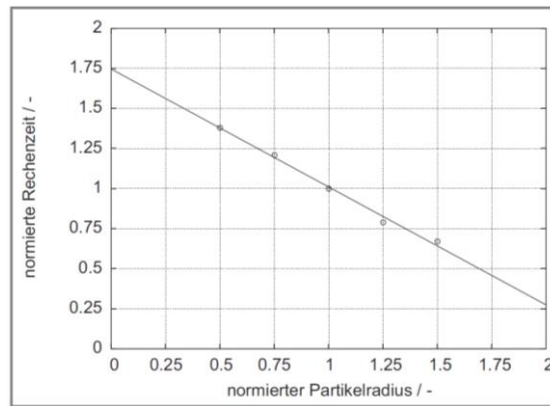


Abbildung 36: Darstellung der Abhängigkeit der normierten Rechenzeit von der normierten Partikelgröße bei konstanter Partikelanzahl [15]

Eine Veränderung des Partikelradius führt in fast allen Fällen zu einem veränderten makroskopischen Verhalten. Um dies zu kompensieren müssen weitere Partikelparameter gezielt angepasst werden, worauf in Abschnitt 5.3.5 näher eingegangen werden wird.

### 5.3.4.2 Fixed Time Step

Um die Stabilität einer Simulation zu gewährleisten muss der Iterationszeitschritt, auch „Fixed Time Step“ genannt, passend gewählt werden. Die meisten Simulationsprogramme, so auch EDEM, ziehen die Rayleigh-Zeit  $T_R$  als Grundlage heran. In [18] werden allgemein, aufgrund empirischer Daten, Werte zwischen 20% und 40% der Rayleigh-Zeit empfohlen.

Bei vorgegebenem Zeitschritt hängt die Stabilität der Simulation vom Betrag der Geschwindigkeitsdifferenz sich berührender Elemente ab. Denn daraus ergibt sich die maximal mögliche Überlappung (siehe auch Abschnitt 3.3.2.1 „Kontakterkennung“; Seite 15), welche in vorgegebenen Grenzen gehalten werden muss, da sonst unnatürlich große Kräfte entstehen würden. Aufgrund dieses Zusammenhangs kann die Rechenzeit einer Simulation auch optimiert werden, indem die Beträge der Geschwindigkeitsdifferenzen sich berührender Elemente für den zu simulierenden Anwendungsfall ermittelt werden und das Verhältnis zwischen Rayleigh-Zeit und Fixed Time Step dementsprechend angepasst wird. Dies wäre sogar in Form einer kontinuierlichen Anpassung im Simulationsverlauf denkbar.

### 5.3.5 Sonstige Parameter

#### 5.3.5.1 Target Save Intervall (TSI)

Das Zielspeicherintervall, auch Target Save Intervall genannt, legt die zeitlichen Abstände fest, in denen die für die Analyse und das Post-Processing notwendigen Informationen gesichert werden. Hierbei handelt es sich um die Partikel-, Geometrie- und Interaktionsdaten, welche in Tabelle 2, Tabelle 3 und Tabelle 4 gelistet sind.

Datengruppe	Attribute
Grundlegende Partikel Daten	ID
	Position
	Orientierung
	Anzahl der Partikel
	Volumen
	Leerraum
	Masse
	Trägheitsmoment
	Potentielle Energie
Geschwindigkeit	Geschwindigkeit
	Kinetische Energie
Winkelgeschwindigkeit	Winkelgeschwindigkeit
	Rotationsenergie
	Gesamtenergie
Kräfte und Drehmomente	Druckkraft
	Gesamtkraft
	Drehmoment
Benutzerspezifische Eigenschaften	Benutzerspezifische Eigenschaften

Tabelle 2: Partikeldaten [18]

Datengruppe	Attribute
Grundlegende Geometrie Daten	ID
	Position
	Oberflächennormale
	Knotenpunkte
	Anzahl an Geometrieelementen
	Geschwindigkeit
	Winkelgeschwindigkeit
Kräfte und Drehmomente	Druckkraft
	Gesamtkraft
	Drehmoment
Benutzerspezifische Eigenschaften	Benutzerspezifische Eigenschaften

Tabelle 3: Geometriedaten [18]

Datengruppe	Attribute
Kontakte (Partikel-Partikel)	Alle Partikel-Partikel-Kontakteigenschaftsdaten
Kontakte (Partikel-Geometrie)	Alle Partikel-Geometrie-Kontakteigenschaftsdaten
Kollisionen (Partikel-Partikel)	Alle Partikel-Partikel-Kollisionseigenschaftsdaten
Kollisionen (Partikel-Geometrie)	Alle Partikel-Geometrie-Kollisionseigenschaftsdaten
Bindungen	Alle Bindungseigenschaftsdaten
Benutzerspezifische Eigenschaften	Benutzerspezifische Eigenschaften

Tabelle 4: Interaktionsdaten [18]

Das Zielspeicherintervall kann deutlich größer als der Fixed Time Step gewählt werden, da für das Post-Processing und die Analyse im Gegensatz zur eigentlichen Simulation keinerlei Stabilitätskriterien beachtet werden müssen.

Die Wahl wirkt sich direkt auf die Berechnungszeit aus. Wird der Differenzenquotient von Rechenzeit über Simulationszeit betrachtet, erkennt man regelmäßig auftretende Spitzen, die auf die im Abstand des Speicherintervalls anfallende Speichertätigkeit zurückzuführen ist. In Abbildung 37 ist eine Auswertung dreier Simulationen mit gleichem Target Save Intervall von 0,01s, aber unterschiedlichen Partikelanzahlen abgebildet. Die blaue Linie beschreibt einen Durchlauf mit 10.000 Partikeln, die rote jenen mit 20.000 und die grüne jenen mit 40.000. Es lässt sich einerseits erkennen, dass die Simulation umso schneller läuft, desto weniger Partikel vorhanden sind, und andererseits dass der Speicheraufwand und damit die dafür notwendige Dauer proportional zur Partikelanzahl ansteigt.

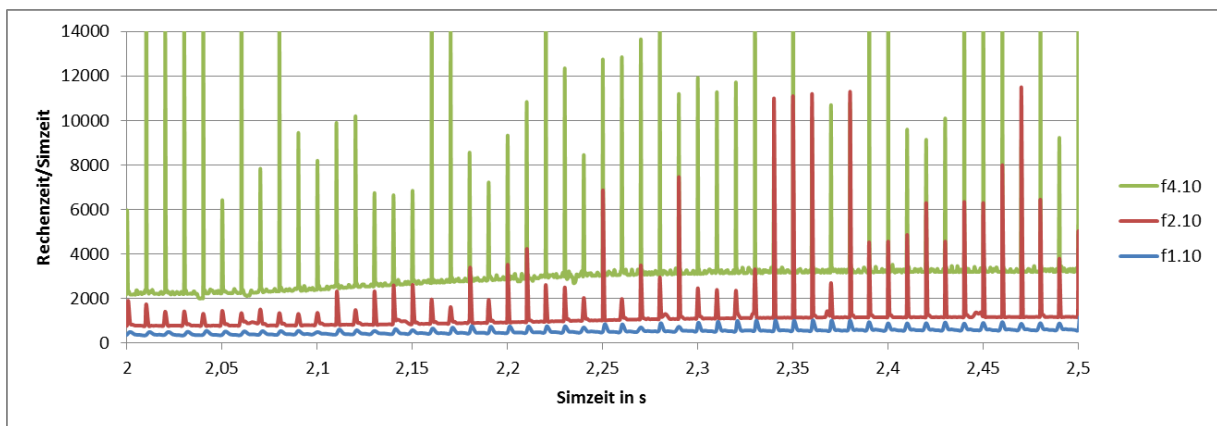


Abbildung 37: Auswirkung des Target Save Intervalls auf die Rechenzeit

Obwohl die Ausschläge beträchtlich scheinen, hat die Auswertung gezeigt, dass sich beispielsweise bei 20.000 Partikeln der Speicheraufwand im Vergleich zur gesamten Rechenzeit lediglich in einem Bereich von 2% - 2,5% bewegt. Dieser Anteil steigt mit der Partikelanzahl kontinuierlich an und erreicht bei 100.000 Partikeln bereits bis zu 4,5%. Nachdem das Zielspeicherintervall sinnvollerweise nicht beliebig groß gewählt werden kann, ist das Potential zur Verkürzung der gesamten Rechendauer relativ gering. Aus diesem Grund wurde beständig für alle Simulationen ein Intervall von 0,02s gewählt.

### *5.3.5.2 Haftreibungs- und Rollwiderstandskoeffizient*

Die Reibkoeffizienten beeinflussen das Verhalten der Elemente auf mikroskopischer Ebene sowie das Verhalten des gesamten Schüttgutes auf makroskopischer. Änderungen haben allerdings keine Auswirkung auf die Rechenzeit, weshalb Parametervariationen der Reibwerte häufig zur Kompensation der Effekte einer Veränderung anderer Eingabeparameter, wie beispielsweise des Partikel-Schubmoduls, eingesetzt werden.

So wird versucht durch Anpassung z.B. des Partikel-Schubmoduls (siehe auch Abschnitt 5.3.4.1.1 „Anpassung des Partikel-Schubmoduls“) die Rechenzeit zu verkürzen und die daraus resultierenden Änderungen im makroskopischen Verhalten gleichzeitig durch gezielte Anpassung der Reibwerte auf ein Minimum zu reduzieren.

Hierfür lässt sich jedoch kein allgemein gültiger Zusammenhang finden, weshalb je nach relevanten Zielgrößen unterschiedliche Kalibrierversuche mit dem Ziel definiert wurden, mögliche Parameterkombinationen schnell ausfindig zu machen. Diesbezüglich sei auf die zur Genüge vorhandene Literatur verwiesen.

## 6 Erstellung der Vorhersageformel

In Kapitel 5 „Abschätzung der Rechenzeit“ wurden die Notwendigkeit der Rechenzeitabschätzung erörtert und die relevantesten Einflussgrößen systematisch betrachtet. Ziel dieses Kapitels ist es nun zu beschreiben, wie anhand obig angeführter Erkenntnisse eine Vorhersageformel aufgestellt werden kann, die eine Genauigkeit von  $\pm 10\%$  einhalten und dabei möglichst Allgemeingültigkeit besitzen soll.

### 6.1 Bisherige Ansätze zur Rechenzeitabschätzung

Trotz ausgiebiger Recherche konnten keinerlei Ansätze oder Literatur im Bereich der Rechenzeitabschätzung von DEM Simulationen gefunden werden. Warum sich scheinbar noch niemand mit diesem Thema ernsthaft auseinander gesetzt hat, ist fragwürdig, da der Nutzen und das Bedürfnis nach einer Vorhersageformel außer Frage steht.

Lediglich DEM-Solutions adressiert dieses Bedürfnis im Rahmen ihres Nutzerforums und stellt ein Excel-Dokument (siehe Abbildung 38) bereit, das eine grobe Abschätzung ermöglichen soll.

	B	C	D	E	F	G
1	<b>Particle Details</b>					
2	Radius (m)	0.01			To be filled in by user	
3	Density (Kg/m <sup>3</sup> )	1500				
4	Poisson's Ratio	0.27				
5	Shear Modulus	1,00E+06				
6						
7	<b>Time Details</b>					
8	Rayleigh Time Step	1,32E-03				
9	Percentage of Rayleigh Time Step Used	20,00%				
10	Time step used (s)	2,64E-04				
11	Run time Required (s)	30				
12	Estimate of Time per iteration per particle (microseconds)	3				
13	Number of time steps	1,13E+05				
14						
15	<b>Simulation Details</b>					
16	No of Particles (surfaces)	100000				
17	Total Time (s)	3,40E+04				
18	Total Time (hours)	9,46				
19	<b>Total Time (days)</b>	<b>0,39</b>				

Abbildung 38: Excel-Berechnung zur Rechenzeitabschätzung von DEM-Solutions

Die Berechnung basiert auf dem simplen Prinzip, dass zuerst die Dauer einer Iteration pro Partikel für eine bestimmte Simulation empirisch getestet wird, welcher Wert dann schlicht mit der Anzahl der zu simulierenden Partikel sowie der Anzahl der gesamten Iterationen, welche sich aus dem verwendeten Zeitschritt und der gesamten Simulationszeit ergibt, multipliziert wird.

In der beigefügten Erklärung wird vorgeschlagen, den Ausgangswert zu ermitteln, indem die ersten Minuten der zu betrachtenden Simulation durchlaufen werden. Nach Ablauf einer bestimmten Zeitspanne, soll die Anzahl der bisher simulierten Zeitschritte betrachtet werden. Dieser Wert dient dann als Grundlage für das obig angeführte Rechenprinzip.

Die Einschränkungen dieser Methodik sind schnell erkennbar. Die für eine Iteration notwendige Rechenzeit ist während der Simulation keineswegs konstant, da sie unter anderem von der Anzahl der Partikelkontakte abhängig ist, welche wiederum, je nachdem was in der Simulation gerade vor sich geht, stark variiert.

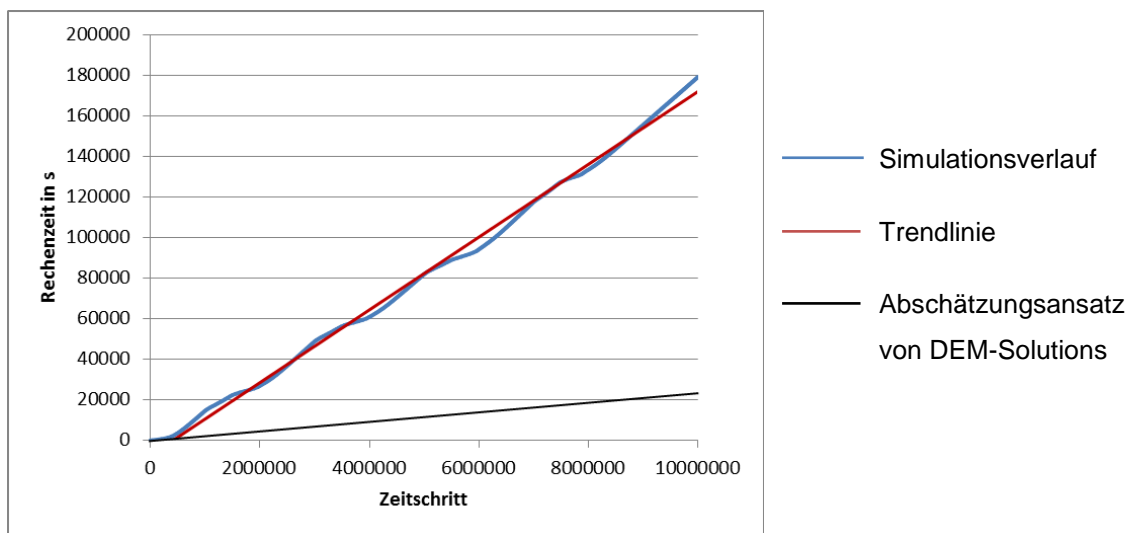


Abbildung 39: Rechenzeit über Zeitschritt

Abbildung 39 zeigt auf der x-Achse den Zeitschritt und auf der y-Achse die kumulierte Rechenzeit in Sekunden. An der gewellten blauen Linie erkennt man den nicht-linearen Verlauf der Simulation. Die rote Linie stellt eine korrekte Trendlinie dar, die schwarze jene Trendlinie, die sich ergeben würde, wenn nach dem von DEM-Solutions empfohlenen Prinzip lediglich die ersten Minuten betrachtet werden würden.

Um nun mit der in Abbildung 38 dargestellten Excel-Berechnung sinnvolle Ergebnisse zu erhalten, müsste es sich entweder um eine sehr gleichmäßige Simulation handeln, die bereits von Anfang an die Eigenschaften aufweist, wie sie während des Großteils der Simulation vorherrschen werden, oder es müsste ein beträchtlicher Teil simuliert werden, der einen repräsentativen Einblick in die

Simulation ermöglichen würde, was wiederum einen beträchtlichen zeitlichen Mehraufwand bedeuten würde.

## 6.2 Aufbau, Vorgehensweise und Einschränkungen

Welche Größen Einfluss auf die Rechenzeit ausüben wurde bereits in Kapitel 5 „Abschätzung der Rechenzeit“ näher betrachtet. Die Herausforderung die im nächsten Schritt zu bewältigen ist, ist jene, den Umfang bzw. die Stärke jedes einzelnen Faktors genau zu bestimmen und etwaige Wechselwirkungen und Abhängigkeiten zu erkennen. Zusätzlich sind nicht alle dieser Faktoren bekannt oder einstellbar, weshalb in diesen Fällen aussagekräftige Ersatzwerte gefunden werden müssen.

Ferner ist es kaum möglich eine Formel zu entwickeln, die anhand vorhandener Eingabeparameter für alle Variationen und unterschiedlichen Simulationen und Versuchsaufbauten gültige Werte liefert. Deshalb wurden einige **Einschränkungen** bzw. ein Gültigkeitsrahmen festgelegt:

1. Simulationszeiten von 0-10s.
2. Partikelanzahlen von 5.000-100.000 Stück.
3. Ein Target Save Intervall von 0,02s.
4. Ein Zellengrößenverhältnis von  $4 \cdot R_{min}$ .
5. Ein Iterationszeitschritt (Fixed Time Step) von  $FTS > 1,5 \cdot 10^{-5}s$
6. Berechnung mit der an der TU Wien zur Verfügung stehenden Hardware und der vorhandenen 8-Kerne-Lizenz.

Der Aufbau der Vorhersageformel wurde wie folgt gewählt:

$$t_{Vorh} = t_{Gen}(N_{Part}, \eta) + t_s \cdot \beta(N_{Part}) \cdot k_{TSI} \cdot k_Z \cdot k_T \cdot k_R(\rho, G, v, R, FTS, N_{Part}) \quad 6.1$$

Die Bedeutungen der gewählten Variablen sind Tabelle 5 zu entnehmen:

$\beta = \frac{t_r}{t_s}$	-	Verhältnis der Rechenzeit zur Simulationszeit
$\eta$	-	Verhältnis des gesamten Partikelvolumens zum Generierungsvolumen
$v$	-	Poissonzahl

$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Feststoffdichte
FTS	s	Iterationszeitschritt (Fixed Time Step)
G	N/mm <sup>2</sup>	Schubmodul
$N_{\text{Part}}$	-	Partikelanzahl
R	mm	Partikelradius
$k_{\text{TSI}}$	-	Korrekturfaktor Target Save Intervall
$k_z$	-	Korrekturfaktor Zellenanzahl
$k_T$	-	Korrekturfaktor Partikeltätigkeit
$k_R$	-	Korrekturfaktor Rayleigh-Zeit
$t_{\text{Gen}}$	s	Generierungszeit
$t_s$	s	Simulationszeit
$t_{\text{Vorh}}$	S	Vorhersagezeit

Tabelle 5: Variablen der Vorhersageformel

Die Generierungszeit  $t_{\text{Gen}}$  ist grau mattiert, da sie aufgrund ihres sehr geringen Beitrags in der finalen Formel keine Berücksichtigung findet. Auch die Korrekturfaktoren, die den Einfluss des Target Save Intervalls ( $k_{\text{TSI}}$ ) und der Zellengröße bzw. –anzahl ( $k_z$ ) beschreiben, sind grau mattiert, da sie aufgrund der obig angeführten Einschränkungen den konstanten Wert von 1 besitzen. Die Berechnungsgrundlagen der verbleibenden Variablen werden in den folgenden Unterkapiteln der Reihe nach ausführlich ausgeführt.

## 6.3 Einflussfaktoren

### 6.3.1 Beta-Faktor

Den größten Einfluss auf die Rechenzeit hat die tatsächlich eintretende Anzahl an Partikelberührungen. Diese kann im Simulationsverlauf jedoch stark variieren und ist im Vorhinein nicht bekannt, weshalb in diesem Fall, wie oben erwähnt, aussagekräftige und vor allem bekannte bzw. vorhandene Ersatzparameter gefunden



werden müssen. In diesem Fall sind für eine sinnvolle Abschätzung zwei Ersatzparameter notwendig:

1. Die Partikelanzahl
2. Die Partikeltätigkeit, die sich aus dem Versuchsaufbau ergibt

Der Beta-Faktor ist jener Faktor, der vorwiegend den Einfluss der Partikelanzahl auf die Rechenzeit beschreibt. An dieser Stelle muss jedoch noch einmal betont sein, dass dieser Faktor nicht ausschließlich den Einfluss der Partikelanzahl beschreibt, sondern indirekt vor allem dazu dienen soll, den Umfang und Einfluss der Partikelkontakte abzuschätzen.

Der Einfluss der Partikelanzahl steht immer in Wechselwirkung mit der Partikeltätigkeit. Um also einen sinnvollen Basiswert zu erhalten wurden alle zugrunde liegenden Versuche an ruhenden Elementen durchgeführt.

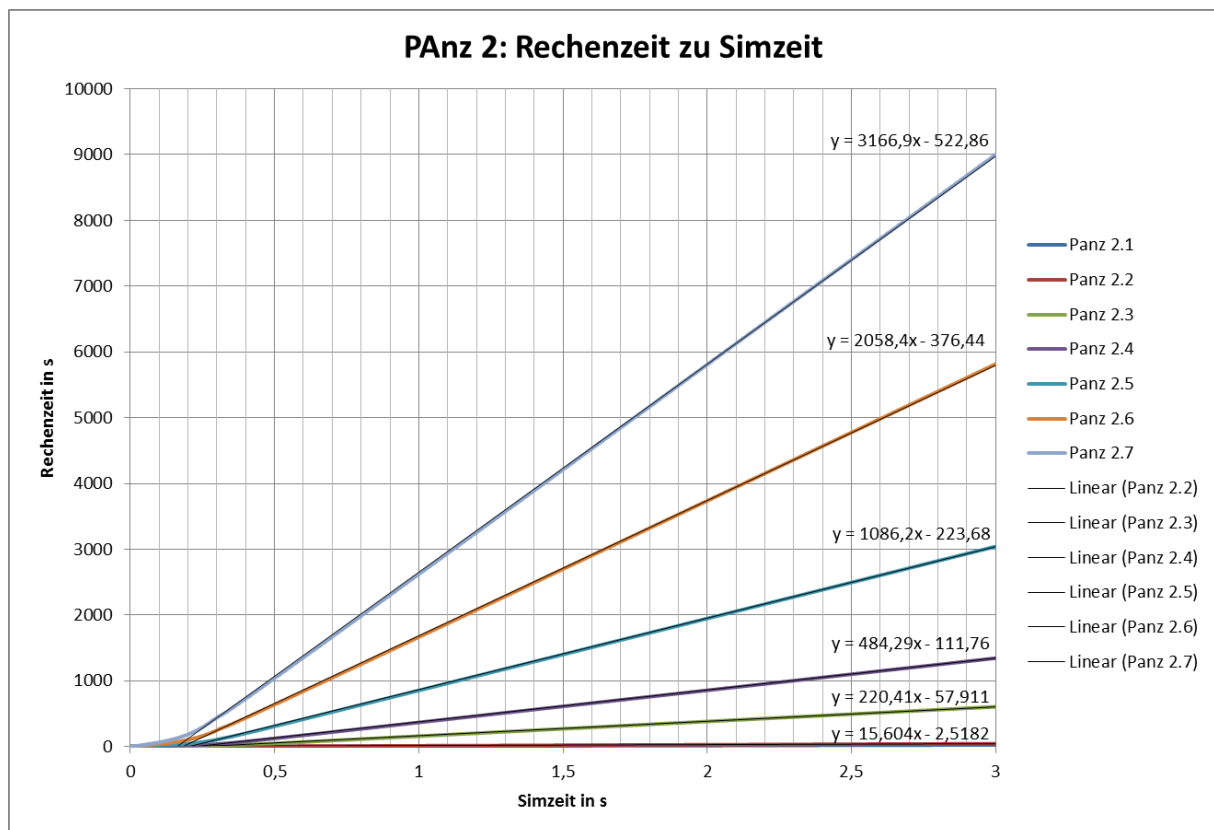


Abbildung 40: Ermittlung des  $\beta$ -Faktors

Abbildung 40 zeigt die Entwicklung der Rechenzeit über der Simulationszeit der gleichen Simulation bei unterschiedlichen Partikelanzahlen. Simuliert wurden jeweils 3 Sekunden, da dies bereits ausreichend ist, um den linearen Verlauf ausreichend gut erkennen und mit Hilfe einer Trendlinien annähern zu können.

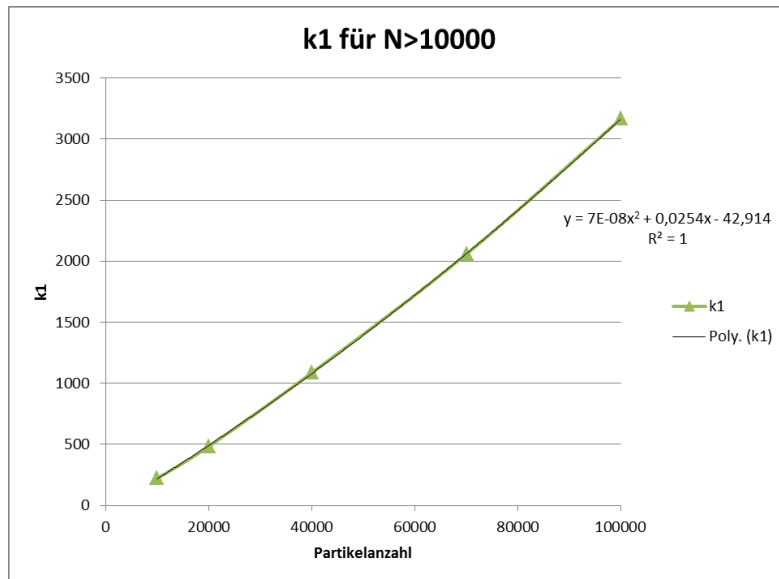


Abbildung 41: Ermittlung von k1 für N>10000

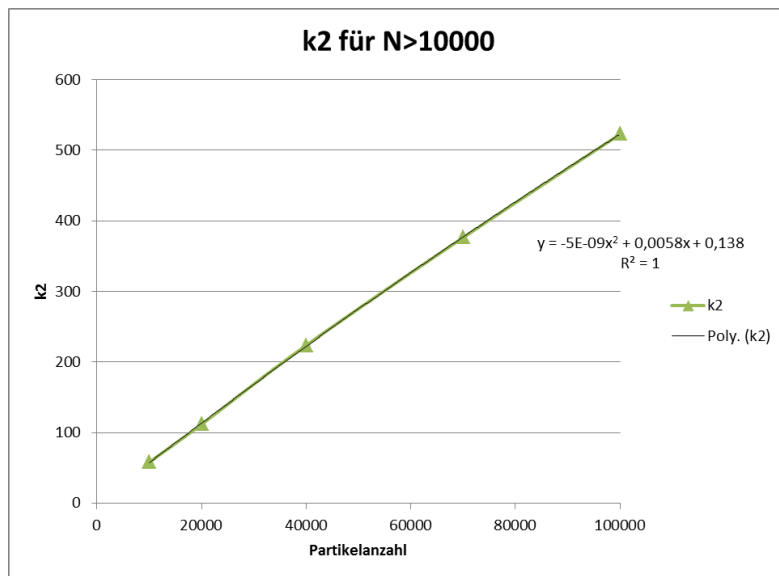


Abbildung 42: Ermittlung von k2 für N>10000

Die Funktionen in Abbildung 40 haben die Form  $y = k_1 \cdot x - k_2$ . Trägt man die verschiedenen Werte  $k_{1i}$  und  $k_{2i}$  über der Partikelanzahl auf, so ergeben sich die Graphen in Abbildung 41 und Abbildung 42, die die Veränderung der Funktion in Abhängigkeit zur Partikelanzahl beschreiben. An den Überschriften dieser Abbildungen ist zu erkennen, dass diese nur einen Bereich von N>10.000 Partikel erfassen bzw. passend beschreiben. Unterhalb dieser Grenze verändert die Kurve ihren Verlauf, weshalb dieser Bereich getrennt betrachtet und mit einer eigenen Funktion angenähert wurde, wie in Abbildung 43 und Abbildung 44 gezeigt.

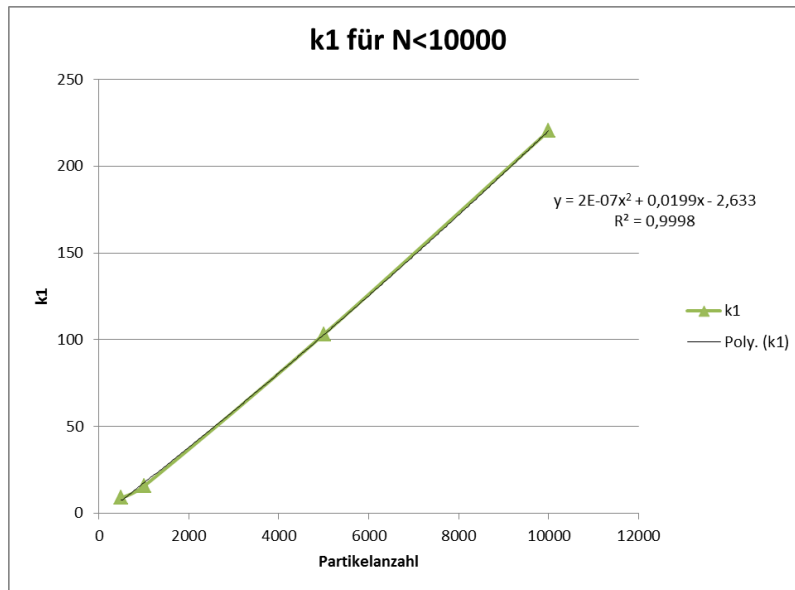


Abbildung 43: Ermittlung von k1 für N<10000

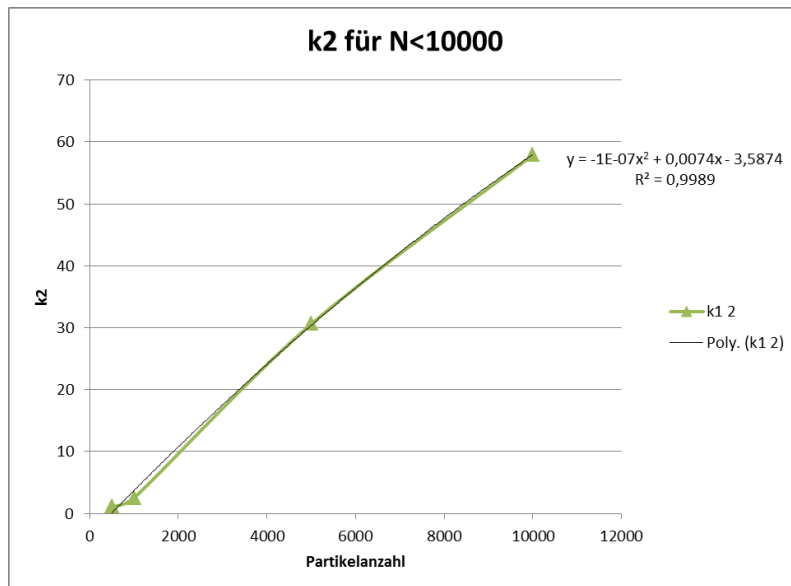


Abbildung 44: Ermittlung von k2 für N<10000

Die Verläufe in Abbildung 41 und Abbildung 42 wurden mit Hilfe einer polynomischen Funktion zweiten Grades angenähert, was es nun erlaubt den  $\beta$ -Faktor mit Abhängigkeit zu nur einer Variablen, der Partikelanzahl  $N_{Part}$ , in einer Formel wie folgt allgemein zu beschreiben.

$$\beta = \left( 7 \cdot 10^{-8} N_{Part}^2 + 0,0254 \cdot N_{Part} - 42,914 \right) \cdot N_{Part} - \left( -5 \cdot 10^{-9} N_{Part}^2 + 0,0058 \cdot N_{Part} - 0,138 \right) \quad 6.2$$

Formel 6.2 ist nur ab einer Partikelanzahl  $N_{Part} > 10.000$  gültig. Aus diesem Grund wurde in MS Excel™, das als Grundlage für alle Berechnungen genutzt wurde, eine

Wenn-Bedingung hinzugefügt, die sofern der genannte Wert unterschritten wird, die obige Funktion durch die für  $N_{\text{Part}} \leq 10.000$  gültige ersetzt.

### 6.3.2 $k_T$ - Korrekturfaktor Partikeltätigkeit

Der Korrekturfaktor Partikeltätigkeit ist der zweite Ersatzparameter, der die Abschätzung der Partikelkontakte ermöglichen soll. Die besondere Herausforderung besteht hierbei darin, charakteristische Tätigkeiten zu finden, deren Kombination möglichst viele, im optimalen Falle sogar alle, Simulationsaufbauten zu beschreiben ermöglicht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden vier Partikeltätigkeiten definiert:

1. Freier Fall
2. Rutschen
3. Ruhe
4. Schieber

Die Vorgänge, die im Zuge einer Simulation von statten gehen, sind sehr vielseitig und könnten auch in weitaus mehr Gruppen unterteilt werden. Je mehr Kategorien geschaffen werden, desto mehr Kenntnis der Simulation ist erforderlich, bevor die Vorhersageformel genutzt werden kann und umso aufwändiger wird es auch, die Eingabemaske zu vervollständigen. Die Bezeichnungen sollten möglichst selbsterklärend und die Tätigkeiten leicht voneinander abzugrenzen sein.

Abbildung 45 zeigt die notwendige Rechenzeit über der Simulationszeit, abhängig von der Partikeltätigkeit. Alle Kurven starten annähernd aus demselben Punkt, weisen aber aufgrund unterschiedlicher Tätigkeiten, verschiedene Steigungen auf. Die unterste und violette Linie beschreibt den „Freien Fall“. Bei diesem treten am wenigsten Partikelkontakte auf, weshalb die Berechnung relativ gesehen am schnellsten von statten geht. In der Legende ist auch eine grüne Funktion eingetragen, welche, gleich der violetten, auch einen „Freien Fall“-Versuch beschreibt. Die Linie ist im Diagramm jedoch nicht ersichtlich, da sie von der violetten verdeckt wird, die trotz kleiner Parameterabweichungen nahezu ident verläuft. Der Anstieg der Linie ab einer Simulationszeit von 2,5s ist darauf zurückzuführen, dass im Versuch zu diesem Zeitpunkt bereits einige Elemente zum Liegen kamen. Solange sich die Partikel jedoch im freien Fall befinden, verbleibt die Steigung konstant.

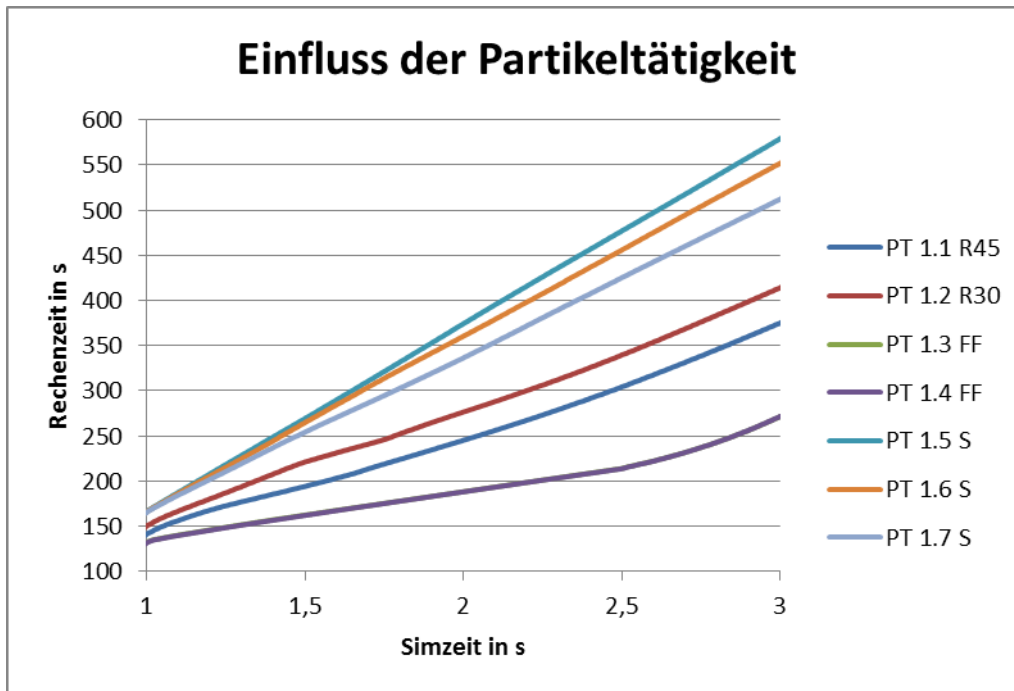


Abbildung 45: Einfluss der Partikeltätigkeit

Die weinrote und die darunter liegende blaue Linie beschreiben den Verlauf der Rechenzeit, wenn die Elemente eine Rutsche, im einen Fall mit 45°, im anderen mit 30° Steigung, hinab rollen bzw. rutschen. Zu Anfang laufen die Kurven auseinander, ab einer Simulationszeit von ca. 1,5s parallel. Weiterführende Versuche haben gezeigt, dass die Steigung der Rutsche kaum Auswirkung auf die Anzahl der auftretenden Kontaktpunkte hat.

Die obersten drei Linien (Türkis, Ocker und Hellblau) sind Schiebeversuchen unterschiedlicher Geschwindigkeit zuordenbar. Bewegungen mit 0,5m/s, 1m/s und 2m/s wurden, mit dem Ergebnis getestet, dass je schneller der Schieber bewegt wird, desto schneller verläuft auch die Berechnung.

Diese Erkenntnis mag es auf den ersten Blick für notwendig erscheinen lassen, den vier Tätigkeitskategorien weitere Spezifikationen oder Einflussgrößen, wie beispielsweise die Bewegungsgeschwindigkeit eines Schiebers zuzuordnen. Die durchgeführten Testsimulationen zur Bestimmung des Tätigkeitfaktors, waren bewusst so aufgebaut, dass alle simulierten Elemente die gleichen Tätigkeiten zum selben Zeitpunkt durchführen, um einen möglichst aussagekräftigen Wert zu erhalten. Dies wird in praktischen Anwendungen jedoch nur in Ausnahmesituationen der Fall sein. Aus diesem Grund kann die Beschreibung der Partikelkontakte durch die Partikeltätigkeiten lediglich als Annäherung und keineswegs als exaktes

Verfahren verstanden werden, weshalb auch eine weitere Verfeinerung der Tätigkeitskategorien unzweckmäßig erscheint.

Nach der Durchführung der Testsimulationen, ging es im nächsten Schritt darum, aus den Ergebnissen korrekte Faktoren zu ermitteln, die in die Vorhersageformel eingebaut werden können. Um Korrekturfaktoren einsetzen zu können, müssen zuerst sinnvolle Bezugsparameter festgelegt werden. Im Falle des Tätigkeitsfaktors fiel die Entscheidung auf die Tätigkeit „Ruhe“, da diese einerseits die rechenaufwändigste und andererseits die am leichtesten zu simulierende ist. Wird das Rechenzeit/Simulationszeit-Verhältnis der anderen Tätigkeiten nun auf diese bezogen, so ergeben sich folgende vier Faktoren:

$$k_{T,FF} = 0,252 \quad \dots \text{Korrekturfaktor Tätigkeit Freier Fall}$$

$$k_{T,Rut} = 0,589 \quad \dots \text{Korrekturfaktor Tätigkeit Rutsche}$$

$$k_{T,R} = 1 \quad \dots \text{Korrekturfaktor Tätigkeit Ruhe}$$

$$k_{T,S} = 0,827 \quad \dots \text{Korrekturfaktor Tätigkeit Schieber}$$

Die Partikeltätigkeitsfaktoren müssen nun der Simulation entsprechend richtig gewichtet werden. Es gilt nun also abzuschätzen, sofern nicht aus der Simulationsplanung oder der praktischen Anwendung bekannt, welche Zeitspannen die Elemente mit welchen Tätigkeiten zubringen. Sind die passenden Zeiten ermittelt werden sie in folgende Formel eingesetzt:

$$k_T = \left( 1 - \frac{t_{T,FF}}{t_S} (1 - k_{T,FF}) - \frac{t_{T,Rut}}{t_S} (1 - k_{T,Rut}) - \frac{t_{T,S}}{t_S} (1 - k_{T,S}) \right) \quad 6.3$$

Die Erklärungen der Formelzeichen finden sich in Kapitel 11 (Seite 80), Anwendungsbeispiele in Kapitel 8 „Validierung der Formel durch Anwendung auf unterschiedliche Versuchsaufbauten“ (ab Seite 64).

### 6.3.3 $k_R$ – Korrekturfaktor Rayleigh-Zeit

Wie bereits erläutert errechnet sich die Rayleigh-Zeit anhand der Formel 5.2 (Seite 40). Um den Iterationszeitschritt (Fixed Time Step = FTS) festzulegen, wird sie mit einem, auf Erfahrungswerten beruhenden, Faktor von rund 0,2-0,4 multipliziert (siehe auch Abschnitt 5.3.4.2, Seite 43). Wird die gesamte Simulationszeit nun durch diesen

dividiert, ergibt sich, wie in Formel 6.4 beschrieben, die Anzahl der gesamten Iterationen.

$$N_I = \frac{t_s}{FTS} \quad 6.4$$

Rein intuitiv wäre davon auszugehen, dass die Anzahl der Iterationen als auch die Rayleigh-Zeit in linearen Zusammenhang mit der gesamten Rechenzeit stehen. Die durchgeführten Versuche haben jedoch gezeigt, dass dies nicht der Fall ist.

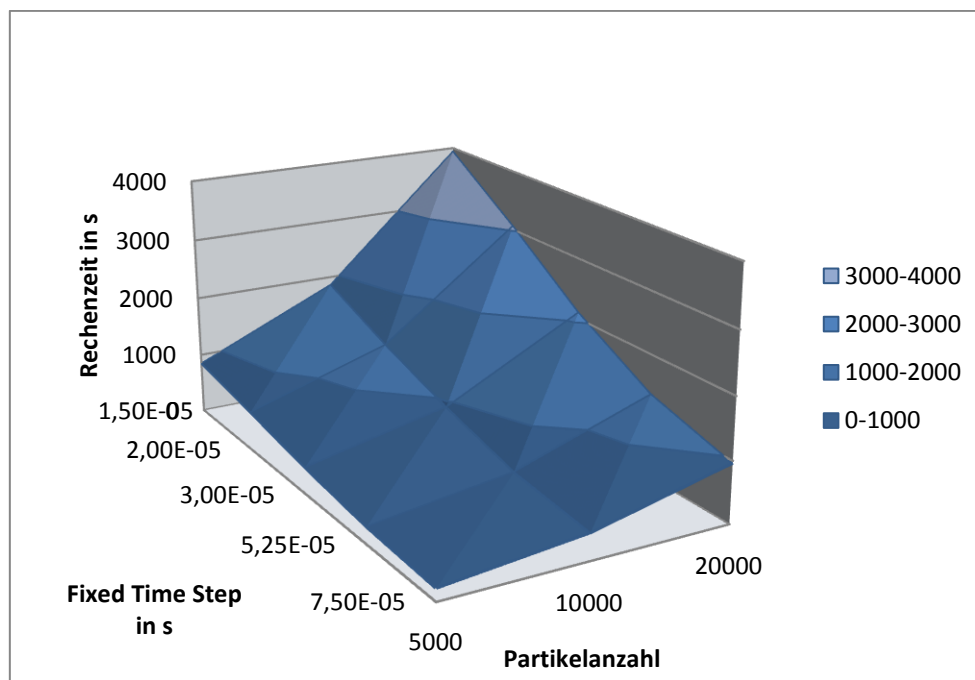


Abbildung 46: Einfluss von Partikelanzahl und FTS auf die Rechenzeit

In Abbildung 46 ist der Einfluss des Iterationszeitschritts (FTS) in Wechselwirkung mit der Partikelanzahl auf die Rechenzeit veranschaulicht. Je mehr Partikel simuliert werden, desto klarer ist der nicht-lineare Zusammenhang zu erkennen. Auch Abbildung 47 verdeutlicht dies.

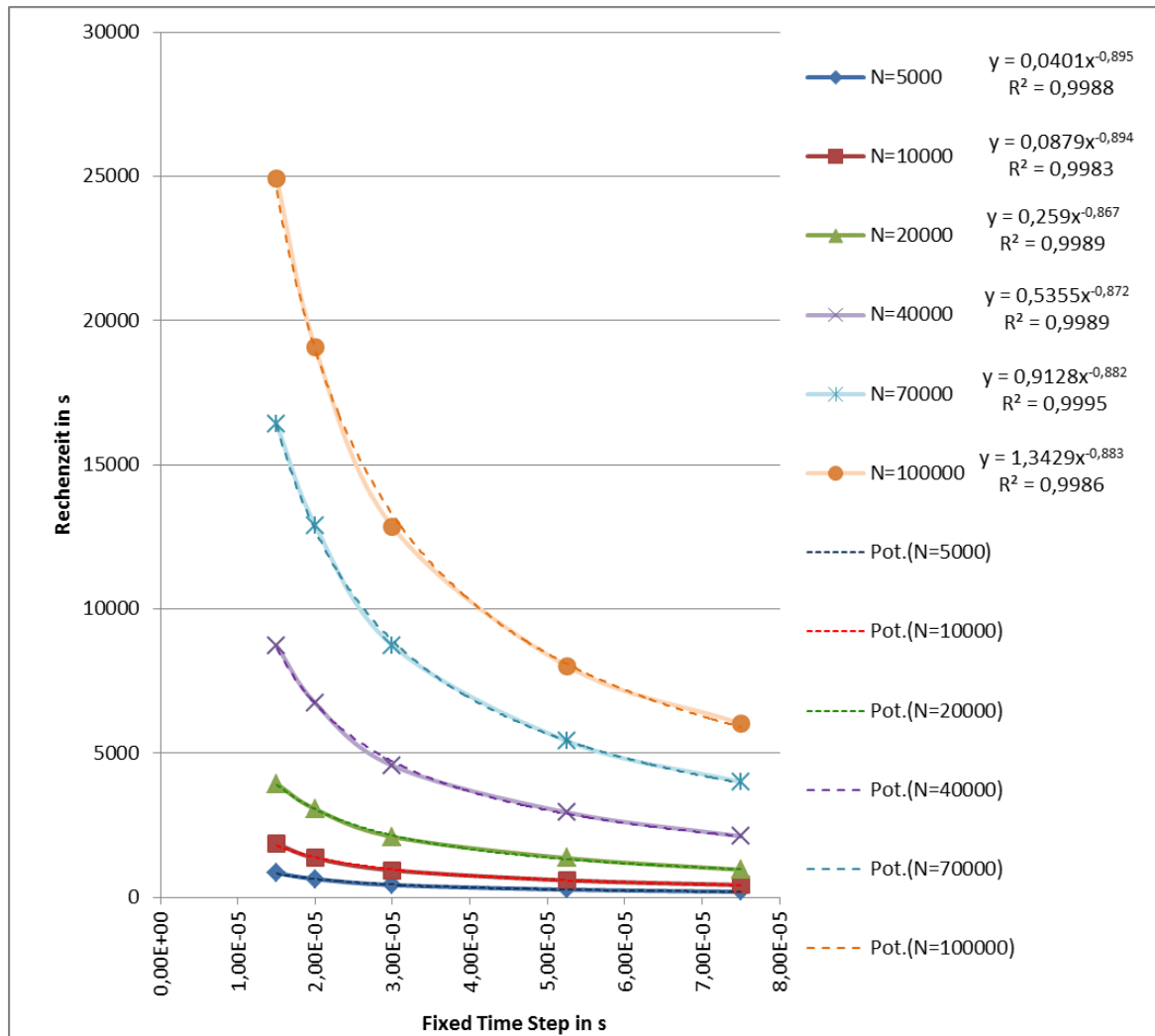


Abbildung 47: Einfluss des FTS auf die Rechenzeit in Abhängigkeit von der Partikelanzahl

Diesem Diagramm hinterlegt, sind die Daten aus 30 Versuchen, bei denen fünf verschiedene Iterationszeitschritte in Kombination mit sechs verschiedenen Partikelanzahlen simuliert wurden. Die durchgehenden Linien entsprechen den von MS Excel™ automatisch durchgeführten Spline-Interpolationen, die strichlierten Linien basieren auf den in der Abbildung oben rechts angeführten Potenzfunktionen, welche den Verlauf mit zufriedenstellender Genauigkeit beschreiben.

Werden die Werte der Konstanten  $p_1$  und  $p_2$  der Funktionen der Form  $y = p_1 x^{p_2}$  über der Partikelanzahl in einem neuen Diagramm aufgetragen, ist der lineare Funktionsverlauf grafisch ersichtlich. Dies ist in Abbildung 48 dargestellt, in welcher ebenfalls die von MS Excel™ durchgeführte Spline-Interpolation mit einer Volllinie, die Näherung durch eine Trendlinie strichliert eingetragen ist.



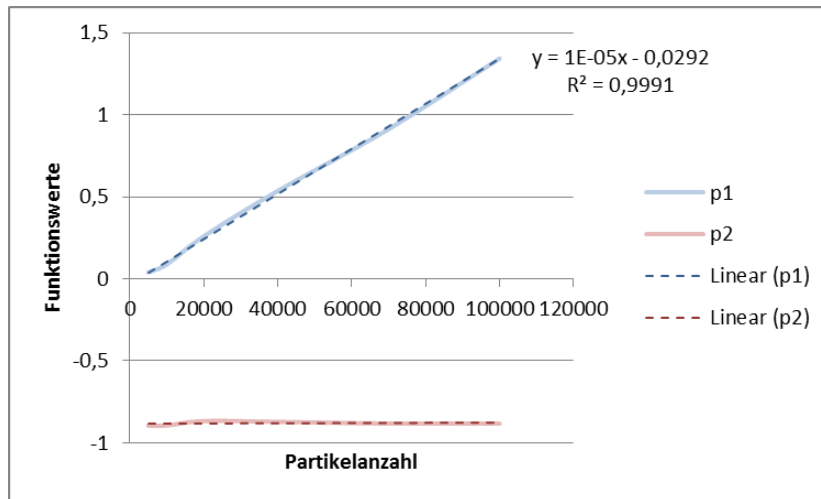


Abbildung 48: Veränderung der Funktionskonstanten in Abhängigkeit zur Partikelanzahl

Nachdem  $p_2$  konstant ist, handelt es sich um ähnliche Potenzfunktionen die sich nur durch den linear-anwachsenden Faktor  $p_1$  unterscheiden. Werden die Funktionen nun auf einen Bezugswert, beispielsweise einen Iterationszeitschritt von 0,00005s, bezogen und die davon abhängige Rechenzeit normiert, werden sie deckungsgleich bzw. ident. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 49 veranschaulicht.

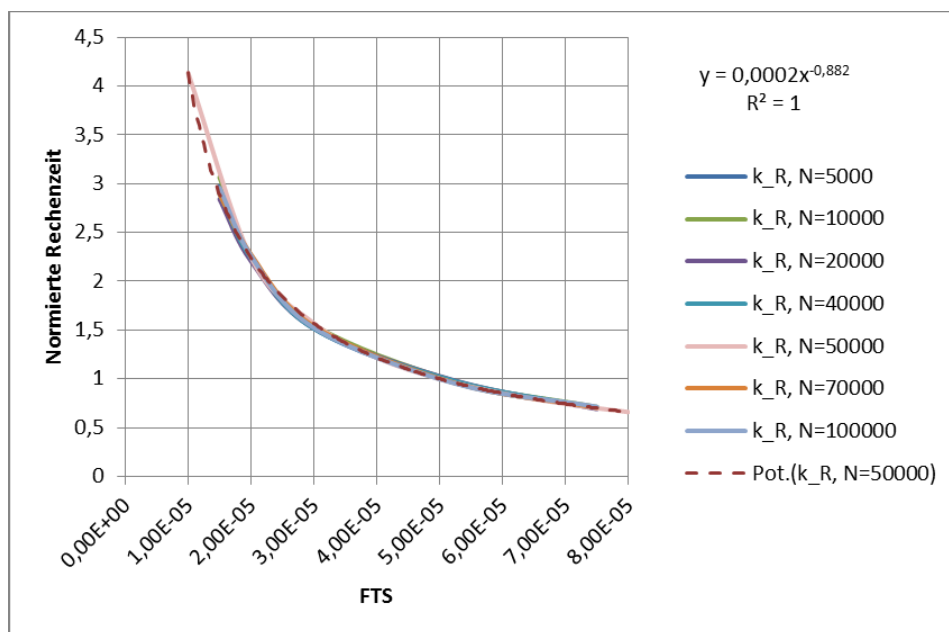


Abbildung 49: Normierte Rechenzeit über dem Iterationszeitschritt

Die Normierung bringt nun den Vorteil, dass der Einfluss der Rayleigh-Zeit bzw. des Fixed Time Steps, der im Korrekturfaktor  $k_R$  Ausdruck finden soll, unabhängig von der Partikelanzahl in folgender Formel ausgedrückt werden kann:

$$k_R = 0,0002 \cdot FTS^{-0,882}$$

6.5

Nach der Ermittlung des Korrekturfaktors der Rayleigh-Zeit  $k_R$  sind nun alle Faktoren (Formeln 6.2, 6.3 und 6.5) der Vorhersageformel festgelegt und brauchen nur mehr in Formel 6.1 eingesetzt werden. Die entstandene Formel ist gegenüber den vorherrschenden komplexen Abläufen, vergleichsweise simpel.

## 7 Eingabemaske

Um die Vorhersageformel optimal nutzen zu können, ist eine benutzerfreundliche und den Bedürfnissen angepasste Eingabemaske notwendig. Um mehreren Anwendungen gerecht zu werden, wurden im Zuge dieser Arbeit zwei verschiedene Masken in MS Excel™ erstellt.

### 7.1 Maske A

Die erste Eingabemaske ist in Abbildung 50 dargestellt. Sie ist in zwei Bereiche unterteilt: Den Eingabebereich, in den die Material- und Simulationseingabewerte eingetragen werden und den Ausgabebereich, in welchem die anhand der hinterlegten Formeln errechneten Ergebnisse ausgegeben werden.

EINGABEBEREICH					
<b>Materialeingabewerte</b>					
Partikelanzahl	Partikeldurchmesser		Feststoffdichte	Poissonzahl	Schubmodul
-	mm		kg/m <sup>3</sup>	-	N/m <sup>2</sup>
100000	10		1302	0,3	6,00E+06
<b>Simulationseingabewerte</b>					
Gesamte Sim.-zeit	Abschätzung der Partikeltätigkeit				Zeitschrittrate
	Freier Fall	Rutschen	Ruhe	Schieber	
s	s	s	s	s	%
5	0	0	0	5	25
AUSGABEBEREICH					
<b>Simulationsergebnisse</b>					
Fixed Time Step	Erwartete Rechenzeit	Erwartete Rechenzeit	Erwartete Rechenzeit		
s	h	min	s		
6,25028E-05	3	11	46		
Gesamte erwartete Rechenzeit in s:				11506	

Abbildung 50: Eingabemaske A

Partikelanzahl, Partikeldurchmesser, Feststoffdichte, Poissonzahl und Schubmodul sind die abgefragten Materialeingabewerte.

Im Bereich der Simulationseingabewerte müssen einerseits die gesamte Simulationszeit und die Zeitschrittrate angegeben und andererseits die Partikeltätigkeiten abgeschätzt werden. Letzteres ist notwendig, um  $k_T$ , den

Korrekturfaktor Partikeltätigkeit, errechnen zu können (eine detaillierte Erklärung zu  $k_T$  findet sich in Abschnitt 6.3.2, ab Seite 54). Um die vier Werte richtig angeben zu können, ist eine gewisse Kenntnis des Versuchsablaufes notwendig, welche in der Praxis jedoch stets gegeben sein sollte. Erwähnt sei, dass es sich hierbei nur um eine geschätzte Näherung handeln kann, da selbst bei sehr genauer Kenntnis der Abläufe nur in den seltensten Fällen auch eine exakte Mengenzuordnung der Elemente zu den Tätigkeiten möglich sein wird. Die Erfahrung hat gezeigt, dass Anwender sehr schnell ein „Gefühl“ für passende Werte entwickeln.

Im Ausgabebereich werden in den fünf hellgelb hinterlegten Feldern, die Ergebnisse der Berechnung dargestellt. Neben dem Iterationszeitschritt (Fixed Time Step) wird auch die prognostizierte Rechendauer auf drei Zellen aufgeteilt angezeigt. Die zusätzliche Ausgabe des fünften Wertes, „Gesamte erwartete Rechenzeit in s“, bringt insofern zusätzlichen Nutzen, dass EDEM die tatsächlich benötigte Rechenzeit ebenfalls in Sekunden angibt und so ein Vergleich zwischen Vorhersage und tatsächlicher Dauer auf einen Blick möglich ist.

## 7.2 Maske B

Die zweite Eingabemaske unterscheidet sich von der ersten in den zur Verfügung stehenden Eingabemöglichkeiten.

Soll ein Schüttgut untersucht werden, ist in der Regel nicht die Anzahl an Partikeln der Probe, sondern lediglich ihr Volumen bekannt. Ebenso ist oft auch kein Wissen über die Feststoffdichte eines Gutes vorhanden, sondern bloß die Schüttgutdichte. Die zweite Eingabemaske (siehe Abbildung 51) bietet die zusätzliche Funktion, die für die Simulation notwendigen Eingabeparameter Feststoffdichte und Partikelanzahl aus den Werten Schüttgutvolumen, Schüttgutdichte und Partikelradius zu errechnen.

# Eingabemaske

EINGABEBEREICH						
Materialeingabewerte						
Schüttgutvolumen m <sup>3</sup>	Partikeldurchmesser mm	Feststoffdichte kg/m <sup>3</sup>	Schüttgutdichte kg/m <sup>3</sup>	Packungsdichte -	Poissonzahl -	Schubmodul N/m <sup>2</sup>
0,003	3	1230		0,68	0,5	70000000
Simulationseingabewerte						
Gesamte Sim.-zeit s	Abschätzung der Partikeltätigkeit				Vorgegebene Rayleigh-Zeit s	Zeitschritt %
	Freier Fall s	Rutschen s	Ruhe s	Schieber s		
2	0,15	0,5	0,85	0,5		40
AUSGABEBEREICH						
Simulationswerte						
Partikelanzahl -	Fixed Time Step s	Erwartete Rechenzeit h	Erwartete Rechenzeit min	Erwartete Rechenzeit s		
18038	8,24653E-06	0	55	59		
Gesamte erwartete Rechenzeit in s:						3360

Abbildung 51: Eingabemaske B

In Abschnitt 4.1.1 „Feststoffdichte  $\rho$ “ auf Seite 24 wurden die zur Berechnung notwendigen Zusammenhänge bereits erklärt.

Falls auch der Schubmodul, welcher nach Formel 5.2 (Seite 40) für die Ermittlung des Rayleigh-Zeitschrittes  $T_R$  notwendig ist, nicht bekannt ist, bietet die zweite Eingabemaske die Möglichkeit einen Wert für  $T_R$  vorzugeben.

Die Eingabe der Simulationsparameter und im Speziellen die Abschätzung der Partikeltätigkeiten verläuft analog zum Vorgehen bei Eingabemaske A. Auch der Ausgabebereich ist ident, mit Ausnahme des zusätzlichen Zellenblocks, welcher die errechnete Partikelanzahl ausgibt.

## 8 Validierung der Formel durch Anwendung auf unterschiedliche Versuchsaufbauten

Ziel dieser Arbeit war es, eine Vorhersageformel zu erstellen, die in der Lage sei, die Rechendauer von DEM Simulationen mit einer Genauigkeit von  $\pm 10\%$  abzuschätzen und dies für möglichst unterschiedliche Aufbauten und unabhängig von den Eingabewerten. Um die Präzision der Formel zu überprüfen und mögliche Einschränkungen zu verifizieren, wurden verschiedene Anwendungen, mit unterschiedlichsten Parametern simuliert und ausgewertet. Die Ergebnisse sollen in diesem Kapitel betrachtet werden.

### 8.1 Bunkeraustragsschnecke

Als erster Versuchsaufbau diente das Simulationsmodell einer Bunkeraustragsschnecke, wie es in Abbildung 52 dargestellt ist. Die Partikel wurden im geöffneten Bunker generiert und fielen gleich in den Trog. Die Schnecken bewegten sich mit einer Winkelgeschwindigkeit von 200 Grad/s. Die genauen Simulationsparameter und Materialkennwerte, wie sie in EDEM™ gepflegt wurden, finden sich in Tabelle 6 und Tabelle 7.

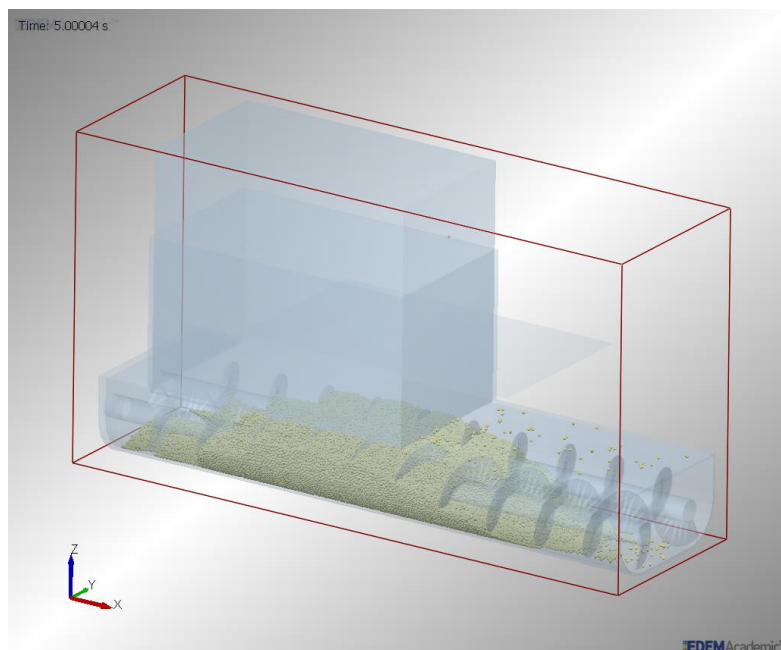


Abbildung 52: Bunkeraustragsschnecke

Materialeingabewerte	Versuch 1	Versuch 2
Partikelanzahl	80.000	100.000
Partikeldurchmesser	10 mm	14 mm
Feststoffdichte	1.302 kg/m <sup>3</sup>	2.600 kg/m <sup>3</sup>
Poissonzahl	0,3	0,3
Schubmodul	6·10 <sup>6</sup> Pa	5·10 <sup>8</sup> Pa

Tabelle 6: Materialeingabewerte Bunkeraustragsschnecke

Simulationseingabewerte	Versuch 1	Versuch 2
Gesamte Simulationszeit	10 s	25 s
Abschätzung der Partikeltätigkeit	Freier Fall	0,5 s
	Rutschen	0 s
	Ruhe	0 s
	Schieber	9,5 s
Zeitschrittrate	20 %	30 %

Tabelle 7: Simulationseingabewerte Bunkeraustragsschnecke

Auswertung der Ergebnisse	Versuch 1	Versuch 2
Rechenzeit nach Vorhersageformel	20.993 s	201.419 s (2T 7h 57min)
Tatsächliche Rechenzeit	20.223 s	183.238 s (2T 2h 54min)
Abweichung	-3,7 %	-9,0 %
	-770 s (~13min)	-18.181 s (-5,05h)

Tabelle 8: Auswertung der Ergebnisse der Bunkeraustragsschnecke

In Tabelle 8: Auswertung der Ergebnisse der Bunkeraustragsschnecke wird die anhand der Vorhersageformel prognostizierte Rechenzeit der tatsächlichen Rechenzeit gegenübergestellt. Bei Versuch 1 ergab sich eine Abweichung von -3,7%. Das negative Vorzeichen deutet an, dass die tatsächliche Rechenzeit 3,7% geringer ist, als die vorhergesagte.

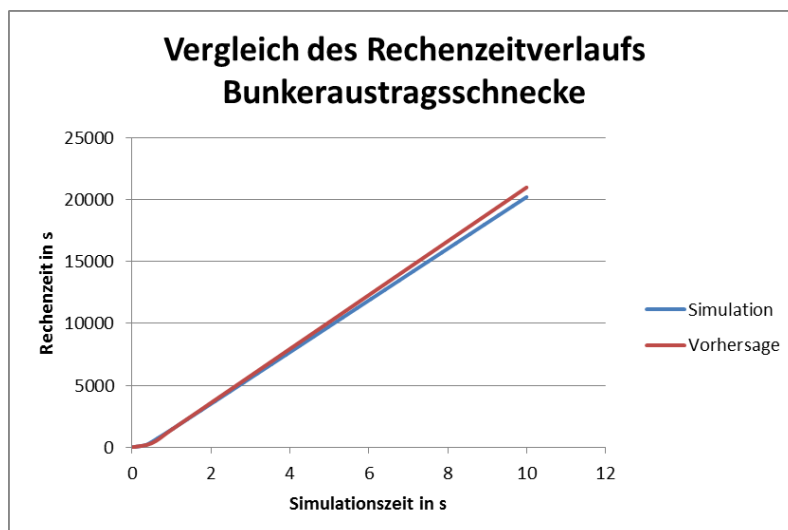


Abbildung 53: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Bunkeraustragsschnecke)

In Abbildung 53 ist der Verlauf der Rechenzeit dargestellt, wobei der tatsächliche Verlauf, wie er in der Simulation eingetreten ist, dem prognostizierten

gegenübergestellt wird. In beiden Fällen (Simulation und Vorhersage) tritt ab einer Simulationszeit von 0,5s ein linearer Verlauf ein, wobei die durch die Formel errechnete Steigung die tatsächliche etwas übersteigt. Bedenkt man, dass die Steigung hauptsächlich von der Anzahl der Partikelkontakte, also einer unbekanntem Größe, die nicht in die Formel einfließen kann, abhängig ist, verdeutlichen die Ergebnisse, dass die in Abschnitt 6.3 gewählten Ersatzparameter in ihrem Geltungsbereich die realen Zusammenhänge ausreichend genau annähern.

In Versuch 2 wurde eine deutlich längere Simulation durchgeführt. In diesem Fall wurde nur eine der beiden Bunkerabzugsschnecken angetrieben, weshalb bei der Abschätzung der Partikelaktivitäten angenommen wurde, dass sich während der Simulation ungefähr ein Drittel der Partikel in Ruhe befindet. Die Prognose weicht um -9,0% von der tatsächlichen Dauer ab und liegt somit zwar näher an der Grenze, aber immer noch im Toleranzbereich. Als Grund für die in diesem Fall größere Ungenauigkeit wird die höhere Partikelanzahl gesehen, da diese mit 100.000 Stück bereits die Gültigkeitsgrenze der Formel darstellt.

## 8.2 Fallrohrversuche

Als zweiter Versuchsaufbau diente ein in fünf Bereiche unterteiltes Fallrohr, wie es in Abbildung 54 dargestellt ist. Im ersten Bereich werden die Partikel zufällig im Raum angeordnet generiert. Nachdem sie zur Ruhe gekommen sind, wird die erste Zwischenklappe der Seite nach entfernt, sodass die Elemente in den zweiten Bereich fallen können. Durch die seitliche Versetzung der Kammern fällt ein Teil der Partikel direkt bis zur nächsten Klappe, der andere Teil rutscht über die abgeschrägte Seitenwand ab. Dieser Ablauf wiederholt sich in Summe vier Mal bis die Partikel schlussendlich im untersten Auffangbehälter zur Ruhe kommen.



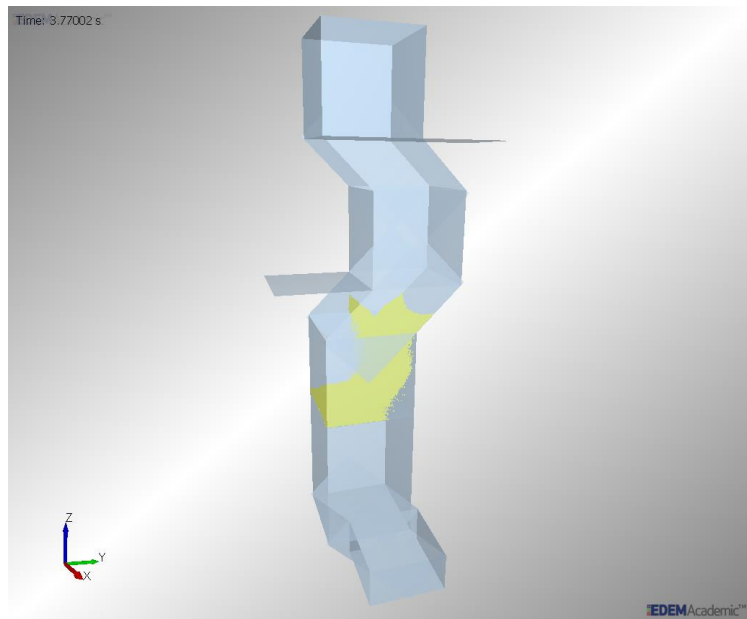


Abbildung 54: Fallrohrversuch

<b>Materialeingabewerte</b>	
Partikelanzahl	100.000
Partikeldurchmesser	10 mm
Feststoffdichte	1.302 kg/m <sup>3</sup>
Poissonzahl	0,3
Schubmodul	6·10 <sup>6</sup> Pa

Tabelle 9: Materialeingabewerte Fallrohrversuch

<b>Simulationseingabewerte</b>		
Gesamte Simulationszeit		10 s
Abschätzung der Partikeltätigkeit	Freier Fall	4,5 s
	Rutschen	0 s
	Ruhe	5,5 s
	Schieber	0 s
Zeitschrittrate		20%

Tabelle 10: Simulationseingabewerte Fallrohrversuch

<b>Auswertung der Ergebnisse</b>	
Rechenzeit nach Vorhersageformel	22.916 s
Tatsächliche Rechenzeit	23.938 s
Abweichung	4,5 %
	1.022 s (~17 min)

Tabelle 11: Auswertung der Ergebnisse Fallrohrversuch

Die Eingabeparameter sind in Tabelle 9 und Tabelle 10 aufgelistet. Bei diesem Versuch ist die richtige Abschätzung der Partikeltätigkeit bereits etwas anspruchsvoller als im vorhergehenden. Vor der Simulation war bekannt zu welchen Zeitpunkten die Zwischenklappen geöffnet werden, also wann die Partikel aus einer Ruhelage wieder in den freien Fall übergehen. Einerseits beginnen nicht alle Elemente gleichzeitig zu fallen, da die Klappen seitlich entfernt werden (ähnlich einer

Lade die geöffnet wird) und andererseits kommen dementsprechend nicht alle Elemente im selben Moment zur Ruhe. Somit liegt die Herausforderung darin, bei der Abschätzung der Partikeltätigkeiten dies soweit als möglich zu berücksichtigen.

In Tabelle 11 sind die Ergebnisse festgehalten.

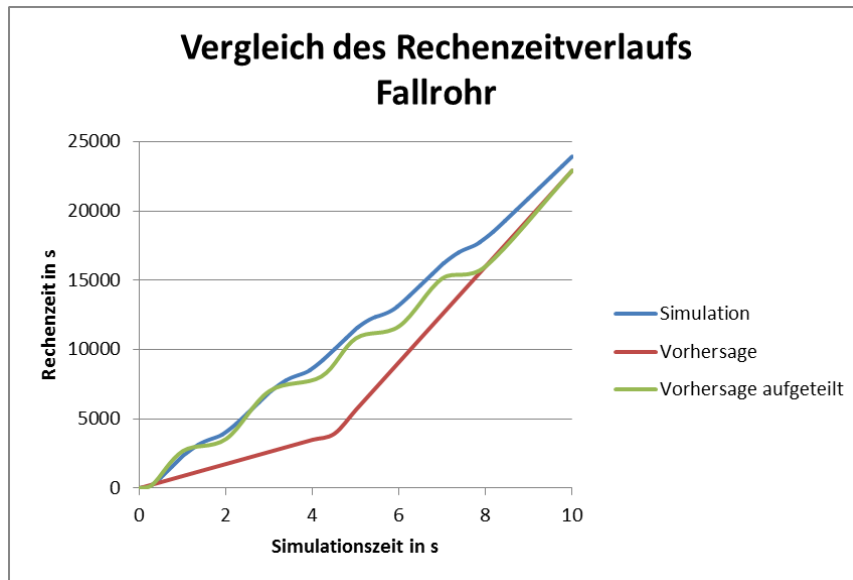


Abbildung 55: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Fallrohr)

Abbildung 55 verdeutlicht anschaulich die Problematik und die Wichtigkeit die Tätigkeiten richtig abzuschätzen. Die blaue Linie beschreibt den tatsächlichen Verlauf der Rechenzeit der Simulation, die rote Linie ist eine Darstellung der Berechnungswerte. Wie in der Tabelle der Simulationseingabewerte (Tabelle 10) ersichtlich ist, wurden zwei Tätigkeiten als gegeben angenommen. Bis zur Knickung bei 4,5s beschreibt die Vorhersagelinie den freien Fall, danach die angegebenen 5,5s die Zeit in der sich die betrachteten Elemente in Ruhe befinden. Um den Vergleich anschaulicher zu gestalten, wurden die zwei Bereiche weiter unterteilt und ähnlich dem realen stufenförmigen Verlauf (blaue Linie) angeordnet. Das Ergebnis ist die grüne Linie. Es lässt sich erkennen, dass einerseits eine andere Aufteilung der Tätigkeiten mit mehr „Ruhe“ und weniger „freiem Fall“, ein genaueres Ergebnis gebracht hätte und andererseits, dass auch in diesem Beispiel (analog zur Bunkeraustragsschnecke) die errechnete Steigung zwar von der tatsächlichen abweicht, dies jedoch in einem in der Toleranz liegendem Maße.

### 8.3 Schneckenförderer mit Becherwerk

Der dritte Versuchsaufbau stellt eine Kombination aus mehreren Schüttgutmanipulationsmöglichkeiten dar und zwar aus einem Schneckenförderer mit einer Neigung von 45°, einem Becherwerk und einem Förderband. Die Anordnung dient keinem in der Praxis vorhandenen Zweck, sondern ist lediglich für die Kontrolle der Vorhersageformel konzipiert. Die Eingabeparameter sind in Tabelle 12 und Tabelle 13 zu finden.

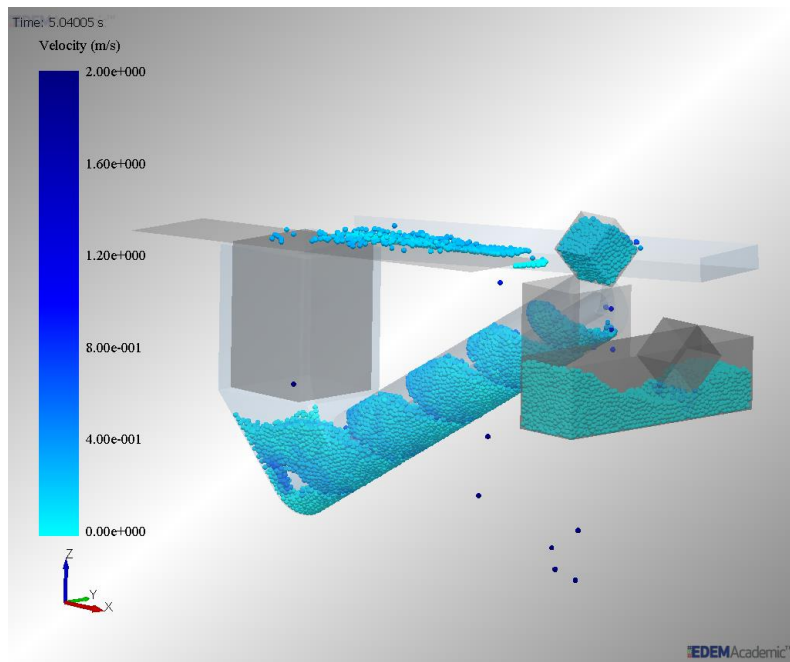


Abbildung 56: Schneckenförderer mit Becherwerk

Materialeingabewerte	
Partikelanzahl	21.500
Partikeldurchmesser	10 mm
Feststoffdichte	2.678 kg/m <sup>3</sup>
Poissonzahl	0,3
Schubmodul	2,3·10 <sup>6</sup> Pa

Tabelle 12: Materialeingabewerte Schneckenförderer mit Becherwerk

Simulationseingabewerte		
Gesamte Simulationszeit		30 s
Abschätzung der Partikeltätigkeit	Freier Fall	0,5 s
	Rutschen	0 s
	Ruhe	24,5 s
	Schieber	5 s
Zeitschrittrate		21 %

Tabelle 13: Simulationseingabewerte Schneckenförderer mit Becherwerk

Auswertung der Ergebnisse	
Rechenzeit nach Vorhersageformel	7.682 s
Tatsächliche Rechenzeit	8.326 s
Abweichung	8,4 %
	644 s (~11 min)

Tabelle 14: Auswertung der Ergebnisse Schneckenförderer mit Becherwerk

Auch in diesem Fall ist die Vorhersage im Toleranzbereich (siehe Tabelle 14), was darauf schließen lässt, dass die Formel für unterschiedlichste Anordnungen genutzt werden kann. Betrachtet man den Vergleich des Rechenzeitverlaufes (Abbildung 57) ist zu erkennen, dass die blaue Linie vom Nullpunkt für ein kurzes Stück sehr steil anwächst, dann knickt und zu den anderen Linien parallel verläuft. Der anfängliche Anstieg von rund 350s Rechenzeit ist auf die Partikelgenerierungsphase zurückzuführen. In der Simulation gibt es drei Bereiche in denen Partikel generiert werden: im Bunker über dem Schneckenförderer, in einem der beiden Becher, sowie im Trog aus dem die Becher schöpfen. Im ersten Bereich wurde das in Abschnitt 5.3.1.1 (Seite 31) empfohlene Verhältnis des gesamten Partikelvolumens zum Generierungsvolumen von  $\eta < 0,25$  unbedacht deutlich überschritten ( $\eta_x = 0,61$ ), was Platzierungsprobleme und eine daraus resultierende Erhöhung der Rechenzeit zur Folge hatte. Die lila Linie („Simulation angepasst“) beschreibt einen korrigierten Verlauf, wie er sich bei passend gewähltem  $\eta$  ergibt.

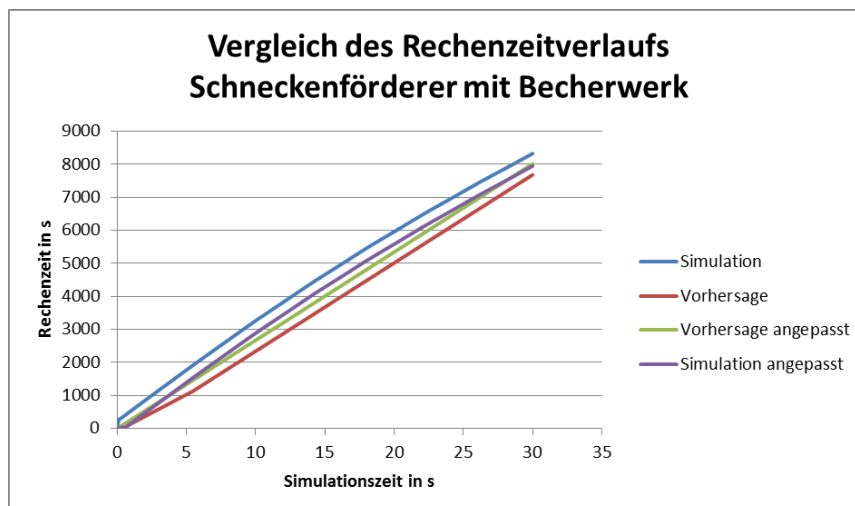


Abbildung 57: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Schneckenförderer mit Becherwerk)

Die leichte Abflachung, bei den die Simulation beschreibenden Linien, die mit fortschreitender Simulationszeit erkennbar ist, ist darin begründet, dass einige Partikel aus den Bechern fallen und die Domäne verlassen, was zu einer Beschleunigung der Berechnung führt.

Die grüne Linie („Vorhersage angepasst“) stellt den durch die Formel errechneten Verlauf dar, der sich bei einer Anpassung der Abschätzung der Partikeltätigkeit ergibt, wenn die 5s, die ursprünglich dem Schieber zugemessen wurden (siehe Tabelle 13), ebenfalls der Tätigkeit „Ruhe“ hinzugefügt werden würden. Die Begründung, warum diese Änderung ein besseres Ergebnis liefert, ist darin zu finden, dass das Partikelverhalten, das sich im Schneckenförderer bei einer Neigung von  $45^\circ$  ergibt, bereits eher dem der Tätigkeit „Ruhe“ gleicht, als dem von einem horizontalen Schieber verursachten. Diese Erkenntnis entstammt der durch mehrfache Anwendung der Formel entstandenen Erfahrung. Es kann davon ausgegangen werden, dass ein ähnlicher Lerneffekt bei allen Nutzern eintritt und ein „Gefühl“ für die Gewichtung der Partikeltätigkeiten entwickelt wird, welches erlaubt die Formel weitreichender anzuwenden und genauere Ergebnisse ermöglicht.

### 8.4 Trichterauslaufversuche

Der vierte Versuchsaufbau, der zur Kontrolle der Formel herangezogen wurde, ist ein Trichterauslaufversuch, bei dem ein Trichter mit 15.000 Stahlkugeln gefüllt wurde. Nach der Generierung wurde der kleine Auslauf des Trichters geöffnet, durch den alle Elemente den Trichter verließen und auf einer runden Stahlscheibe mit erhöhtem Rand aufgefangen wurden (siehe Abbildung 58: Trichterauslaufversuch). In Tabelle 15 und Tabelle 16 sind die Simulations- und Materialeingabewerte zu finden.

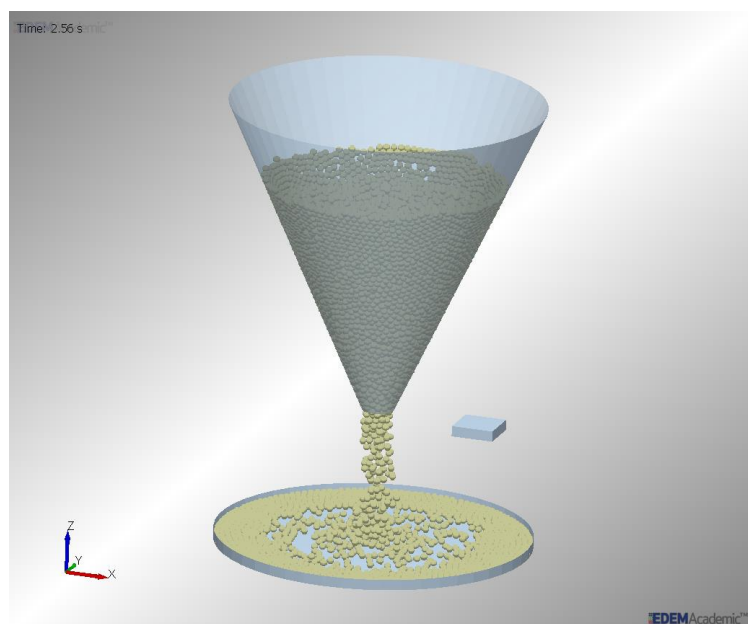


Abbildung 58: Trichterauslaufversuch

<b>Materialeingabewerte</b>	<b>Versuch 1</b>	<b>Versuch 2</b>	<b>Versuch 3</b>
Partikelanzahl	15.000	15.000	15.000
Partikeldurchmesser	6 mm	6 mm	6 mm
Feststoffdichte	7.800 kg/m <sup>3</sup>	7.800 kg/m <sup>3</sup>	7.800 kg/m <sup>3</sup>
Poissonzahl	0,3	0,3	0,3
Schubmodul	8·10 <sup>8</sup> Pa	8·10 <sup>7</sup> Pa	8·10 <sup>10</sup> Pa

Tabelle 15: Materialeingabewerte Trichterauslaufversuche

<b>Simulationseingabewerte</b>		<b>Versuch 1</b>	<b>Versuch 2</b>	<b>Versuch 3</b>
Gesamte Simulationszeit		16 s	16 s	16 s
Abschätzung der Partikeltätigkeit	Freier Fall	0 s	0 s	0 s
	Rutschen	0 s	0 s	0 s
	Ruhe	16 s	16 s	16 s
	Schieber	0 s	0 s	0 s
Zeitschrittrate		50 %	25 %	30 %

Tabelle 16: Simulationseingabewerte Trichterauslaufversuche

<b>Auswertung der Ergebnisse</b>	<b>Versuch 1</b>	<b>Versuch 2</b>	<b>Versuch 3</b>
Rechenzeit nach Vorhersageformel	16.874 s	11.265 s	201.782 s
Tatsächliche Rechenzeit	17.700 s	11.662 s	260.864 s
Abweichung	4,9 %	3,5 %	29,3 %
	Ca. 14 min	Ca. 7 min	Ca. 16,4 h

Tabelle 17: Auswertung der Ergebnisse der Trichterauslaufversuche

In den Tabellen sind drei Versuche angeführt, die sich nur durch die Wahl des Schubmoduls und der Zeitschrittrate unterscheiden. Bei DEM Simulationen wird der Schubmodul in der Regel um den Faktor 100 oder sogar 1000 verringert, um die Rechenzeit zu verkürzen. Abhängig vom Schubmodul  $G$ , dem Partikelradius  $R$ , der Feststoffdichte  $\rho$  und der Poissonzahl  $\nu$  ergibt sich nach Formel 5.2 (Seite 40) die Rayleigh-Zeit  $T_R$  und in weiterer Folge der Iterationszeitschritt  $FTS$ . In Versuch 3 (siehe Tabelle 15) wurde der Schubmodul so hoch gewählt ( $8 \cdot 10^{10}$  Pa), dass der resultierende Iterationszeitschritt den Gültigkeitsbereich der Formel (siehe Einschränkungen auf Seite 49) mit einem Wert von rund  $9,5 \cdot 10^{-7}$  s klar verlässt. Als Konsequenz ergab sich eine deutliche Erhöhung der Ungenauigkeit der Vorhersage von Versuch 1 mit 4,9% und Versuch 2 mit 3,5% auf 29,3% bei Versuch 3.

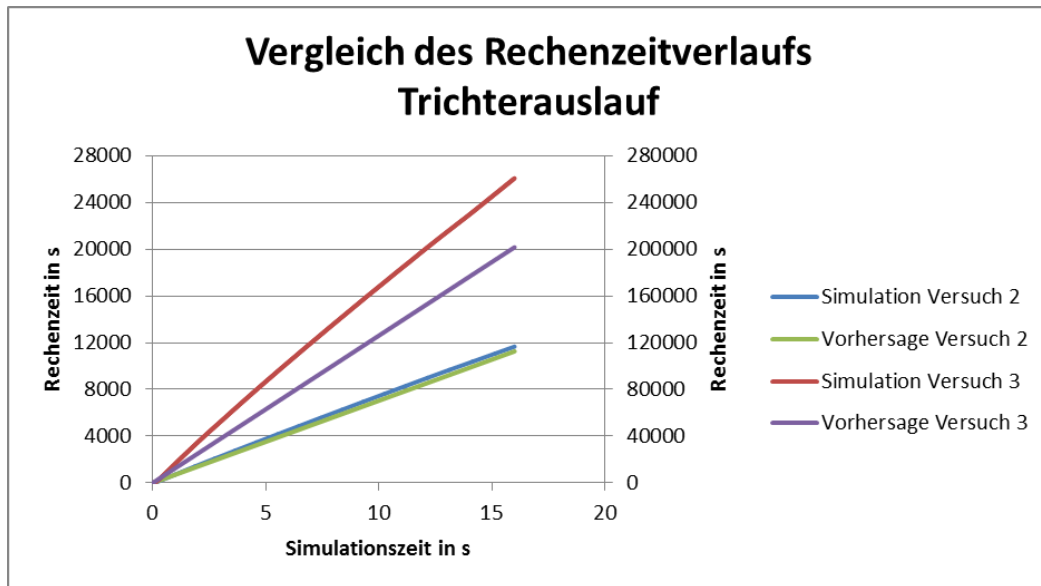


Abbildung 59: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Trichterauslauf)

Die Ergebnisse des zweiten und dritten Versuchs sind in Abbildung 59 grafisch dargestellt. Sie verdeutlichen, dass die Formel nur in jenem Bereich Gültigkeit besitzt, für den sie ausgelegt wurde. Ist die Vorhersage der Rechenzeit für Simulationen mit Parametern außerhalb dieser Grenzen gewünscht, müsste eine Anpassung der Formel vorgenommen werden. Dies stellt jedoch kein Problem dar, da diese ohnehin lediglich auf empirischen Werten beruht.

## 8.5 Ergebnisse

Die vier zur Validierung der Vorhersageformel durchgeführten Versuchsreihen haben unterschiedliche Aufbauten und klar verschiedene Vorgänge. Nichtsdestotrotz bewegte sich die Vorhersage stets im vorgegebenen Toleranzbereich. Die angeführten Versuche sind nur ein repräsentativer Auszug aus den tatsächlich durchgeführten, geben aber einen guten Einblick in die praktische Anwendung der Formel und den gültigen Anwendungsbereich.

Der Fallrohrversuch lässt erkennen, dass die passende Schätzung der Ausmaße der einzelnen Partikeltätigkeiten relevant ist und etwas Erfahrung bedarf. Der Fehler der Vernachlässigung des Generierungsvolumenverhältnisses  $\eta$ , wie er beim Schneckenförderer mit Becherwerk gemacht wurde, erinnert an die Notwendigkeit die zugrundeliegenden Annahmen stets zu beachten, um zu richtigen Ergebnissen zu gelangen. Der dritte Trichterauslaufversuch verdeutlichte, dass die angegebenen Gültigkeitsbereiche der Formel berücksichtigt werden müssen.

Alles in allem sind die Ergebnisse sehr zufriedenstellend. Nichtsdestotrotz bleibt das Bedenken bestehen, dass extreme Abweichungen im Versuchsaufbau von den obig angeführten - vor allem wenn die Proportionen, die die Bewegung der Partikel begrenzenden Geometrien deutlich verschieden sind (beispielsweise sehr dünne Rohre) - die Vorhersagen den Toleranzbereich verlassen könnten. Dieses Bedenken kann jedoch selbst durch eine Reihe weiterer Tests nie ganz ausgeschlossen werden und wird somit wohl durch den Praxiseinsatz Bestätigung oder Widerlegung finden müssen.



## 9 Vorgehen zur Erstellung einer neuen Formel

Die Gültigkeit der Formel ist nicht nur durch die in Abschnitt 6.2 (Seite 49) angeführten Bedingungen beschränkt, sondern ist auch nur mit der zur Erstellung der Formel verwendeten Hard- und Software gewährleistet. Zusätzlich besteht auch die Möglichkeit, dass für besondere Bedingungen und Anordnungen, wie die Verwendung anderer Kontaktmodelle oder beispielsweise die Simulation von grobkörnigem Schüttgut das durch ein Rohr transportiert werden soll, die Formel angepasst bzw. spezifisch kalibriert werden muss.

Um dem Nutzer die Erstellung einer auf die eigenen Umstände und Anforderungen zugeschnittenen Vorhersageformel zu erleichtern, scheint es sinnvoll eine allgemein anwendbare Vorgehensweise detaillierter zu erläutern.

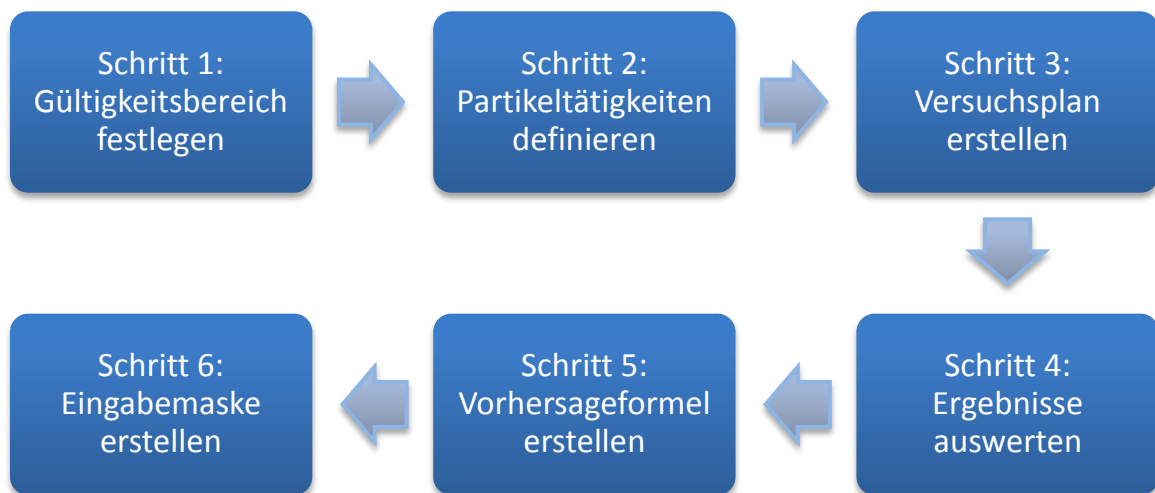


Abbildung 60: Vorgehen zur Erstellung einer neuen Vorhersageformel

Abbildung 60 zeigt die sechs empfohlenen Schritte um zum Ziel einer individuell angepassten Formel zu gelangen.

### 9.1 Schritt 1: Gültigkeitsbereich festlegen

Der erste Schritt zur Erstellung einer Formel ist das Festlegen des zu betrachtenden Gültigkeitsbereiches, welcher für die Variablen Partikelanzahl  $N_{\text{Part}}$ , Zielspeicherintervalle  $t_{\text{TSI}}$ , Zellenverhältnisse und Rayleigh-Zeit  $T_{\text{R}}$  bzw. Iterationszeitschritt FTS festgelegt werden muss. Je enger die jeweiligen Bereiche gewählt werden, desto weniger Versuche werden in weiterer Folge benötigt werden

und desto besser wird die Formel in der Lage sein präzise Abschätzungen zu produzieren.

Bei obiger Aufzählung der Variablen wurde nicht davon ausgegangen, dass ein konstantes Zeitspeicherintervall und ebenso ein konstantes Zellenverhältnis gewählt werden. Die in den Abschnitten 5.3.2.1 „Zellengröße“ (Seite 37) und 5.3.5.1 „Target Save Intervall (TSI)“ (Seite 44) beschriebenen Erfahrungen und Versuche des Verfassers legen aber nahe jene Werte nicht zu variieren, sondern ihnen einen fixen Wert zuzuweisen.

Der Iterationszeitschritt ist eine Funktion der Zeitschrittrate und der Rayleigh-Zeit, welche wiederum von den Parametern Schubmodul  $G$ , Poissonzahl  $\nu$ , der Partikel-Feststoffdichte  $\rho$  und dem (kleinsten) Partikelradius  $R_{(\min)}$  abhängt. Aus dem Zusammenspiel der Extremwerte dieser Größen ergeben sich die Grenzen des Iterationszeitschrittes FTS.

Auch die Form und Größenverteilung der Partikel, nämlich ob Konglomerate bzw. Cluster und unterschiedlich große Elemente simuliert werden sollen, die zu verwendende Soft- und Hardware sowie die Komplexität importierter CAD-Modelle müssen, sofern signifikante Schwankungen gegeben sind, berücksichtigt und als Gültigkeitsbeschränkung sowie Formelparameter definiert werden.

In Abschnitt 5.3.1.1 „Partikelgenerierung“ (Seiten 31ff) wurde auf die Partikelgenerierung eingegangen. Sofern das empfohlene Generierungsverhältnis  $\eta < 0,25$  nicht überschritten wird, kann auch von einer Berücksichtigung der Generierungsphase abgesehen werden.

Zuletzt muss noch das Kontaktmodell gewählt werden. Im Zuge dieser Arbeit wurde nur auf das kohäsionslose Hertz-Mindlin-Kontaktmodell eingegangen. Nachdem je nach Wahl des Modells verschieden viele Rechenschritte notwendig sind, muss auch darauf Rücksicht genommen werden.

## 9.2 Schritt 2: Partikeltätigkeiten definieren

Nach der Eingrenzung des Gültigkeitsbereiches geht es im zweiten Schritt darum, angemessene Partikeltätigkeiten zu definieren. Wie bereits erklärt, ist die Partikeltätigkeit nur ein Hilfsmittel anhand dessen die, für die Rechenzeit relevante, Anzahl der Partikelkontakte näherungsweise bestimmt werden soll. In Abschnitt 6.3.2

„ $k_T$  - Korrekturfaktor Partikeltätigkeit“ (Seiten 54ff) wurden einerseits wichtige Kriterien zur Bestimmung passender Tätigkeiten angeführt und ferner vier Tätigkeiten definiert, die in der Lage sein sollen, möglichst alle Versuchsabläufe ausreichend genau zu beschreiben. Diese waren „Ruhe“, „Freier Fall“, „Rutschen“ und „Schieben“. Die durchgeführten und in Kapitel 8 dokumentierten Versuche bestätigen, dass mit Hilfe der gewählten Tätigkeiten die Rechenzeiten unterschiedlichster Abläufe und Anordnungen ausreichend genau prognostiziert werden können. Allerdings sind die Beispiele nicht erschöpfend und deshalb auch nicht in der Lage die Annahme der Allgemeingültigkeit der Formel zu begründen.

Aus diesem Grund ist es jedenfalls sinnvoll die geplante Anwendung zu betrachten und zu eruieren, ob nicht Tätigkeiten neu definiert, ersetzt oder ergänzt werden sollten. Ist für einen Versuch ein bestimmter Ablauf sehr charakteristisch und/oder häufig vertreten, bietet es sich ohnehin an diesen als eigene Tätigkeitskategorie festzulegen, selbst wenn die vier bereits genannten Tätigkeiten zur Beschreibung ausreichen würden, da so eine genauere Abschätzung ermöglicht wird.

### 9.3 Schritt 3: Versuchsplan erstellen

Nachdem Gültigkeitsbereich und charakteristische Tätigkeiten festgelegt wurden, gilt es im dritten Schritt diese nun in einen Versuchsplan zu verpacken bzw. einen passenden Versuchsplan zu erstellen. Ziel ist es mit möglichst wenigen Versuchen und damit minimalem Zeitaufwand zu bestmöglichen Ergebnissen zu kommen.

Um die Zusammensetzung der Formel möglichst nachvollziehbar zu machen, wurde in dieser Arbeit von der Anwendung komplexer DoE-Versuchspläne abgesehen und jeder Einflussfaktor einzeln getestet und variiert (siehe Kapitel 6, Seite 47ff). Dies ist möglich, da zwischen den Faktoren keine Wechselwirkungen bestehen.

Die Entscheidung zur Nutzung eines optimierten Versuchsplanes sei dem Anwender überlassen. Wird jedoch davon abgesehen, können die Vorgehensweise und die Rechenschritte wie sie in Abschnitt 6.3 „Einflussfaktoren“ (Seite 50ff) dargelegt sind, mit lediglich der Anpassung der Bereichsgrenzen und möglicher Ergänzung der Partikeltätigkeiten übernommen werden. Zur Steigerung der Genauigkeit oder Reduktion der Berechnungsdauer kann die Anzahl der Messpunkte erhöht oder verringert werden.

Zur Durchführung des vierten und fünften Schrittes, nämlich der Auswertung der Ergebnisse und Erstellung der Vorhersageformel, sei ebenfalls auf die ausführlichen Erklärungen in Abschnitt 6.3 (Seite 50ff) verwiesen.

## 9.4 Schritt 6: Eingabemaske erstellen

Bei der Erstellung der Eingabemaske stehen natürlich die Bedürfnisse der Nutzer im Vordergrund und sie sollte diesen entsprechend ausgelegt werden. In Abschnitt 7 „Eingabemaske“ (Seite 61ff) wurden bereits zwei mögliche Eingabemasken dargestellt. Wenn bereits im Vorhinein bekannt ist, welche Eingabeparameter und Materialkennwerte (Schüttgutedichte, Feststoffdichte, Schubmodul usw.) im Unternehmen vorhanden sind bzw. welche sich aus der Kalibrierung des Schüttgutes ergeben, werden voraussichtlich dazu passende Eingabefelder zweckführend sein.

Sollen auch Simulationen mit unterschiedlichen Partikelgrößenverteilungen und Partikelcluster abgeschätzt werden können, müssen auch diese in der Maske spezifiziert werden können.

Im Endeffekt gibt es jedoch zahlreiche Möglichkeiten eine effektive Eingabemaske zu erstellen und es scheint nicht zielführend im Rahmen dieser Arbeit den Versuch zu machen, eine beste Variante zu definieren, da die Ansprüche je nach Anwendung variieren.

## 10 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Diskrete Elemente Methode (DEM) vorgestellt und ihre Notwendigkeit und ihr Nutzen unterstrichen. Rechnerische Abläufe wurden betrachtet und dem Leser wurde ein Überblick über den Aufbau und die mathematischen Grundlagen der Methode ermöglicht. Die Eingabe- und Einflussgrößen der DEM-Simulation wurden am Beispiel der Software EDEM™ von DEM Solutions erläutert und analysiert. Die Auswirkungen einzelner Parameter auf die benötigte Rechenzeit wurden eruiert und anhand gewonnener Erkenntnisse eine Vorhersageformel formuliert, die es ermöglicht Rechenzeiten zu prognostizieren und damit die Voraussetzung für eine sinnvolle Projekt- und Arbeitsplanung schafft. Eine benutzerfreundliche Eingabemaske wurde erstellt, die den einfachen Umgang mit der Formel ermöglichen soll.

Die Gültigkeit der Formel wurde durch eine Reihe an Kontrollversuchen mit dem Ergebnis überprüft, dass der gewünschte Toleranzbereich von  $\pm 10\%$  der Rechenzeit stets eingehalten wird, sofern der festgelegte Gültigkeitsbereich und definierte Einschränkungen beachtet werden. Trotz der vielversprechenden Ergebnisse muss davon ausgegangen werden, dass die Vorhersageformel nicht in der Lage sein wird, die Rechenzeit von Aufbauten, die von den hier untersuchten sehr stark abweichen, richtig abzuschätzen. Mit Hilfe der in dieser Arbeit erlangten Erkenntnisse sollte es jedoch ohne weiteres möglich sein, den Gültigkeitsbereich der Formel entsprechend den Bedürfnissen zu erweitern und/oder auch auf eine andere, als die hier genutzte Hardware/Rechnerlandschaft umzulegen. Um dies zu erleichtern wurde eine Anleitung, die als Leitschnur dienen soll, verfasst.

Nachdem nun eine Methode zur Vorhersage der Rechenzeit gefunden wurde, wäre als nächster Schritt eine Methode zur Optimierung bzw. Verkürzung dieser erstrebenswert. Im Rahmen dieser Arbeit wurde erwähnt, dass eine Anpassung des Schubmoduls und der Partikelgröße die Berechnungen beschleunigen. Über dies hinaus wäre ferner die Formulierung eines Geschwindigkeitsalgorithmus und die Programmierung einer passenden API Schnittstelle zur simulationsabhängigen, dynamischen Optimierung bzw. Anpassung des Iterationszeitschrittes (Fixed Time Step) im Simulationsverlauf denkbar.

## 11 Formelzeichen

$\beta = \frac{t_r}{t_s}$	-	Verhältnis der Rechenzeit zur Simulationszeit
$\delta_n$	mm	Überlappung in Normalrichtung
$\delta_t$	mm	Überlappung in Tangentialrichtung
$\eta$	-	Verhältnis des gesamten Partikelvolumens zum Generierungsvolumen
$\mu_r$	-	Rollreibungskoeffizient
$\mu_s$	-	Haftreibungskoeffizient
$\nu$	-	Poissonzahl
$\pi$	-	Kreiszahl
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Feststoffdichte
$\dot{\omega}$	rad/s <sup>2</sup>	Winkelbeschleunigung
$A$	mm <sup>2</sup>	Kontaktfläche
$E$	N/mm <sup>2</sup>	Elastizitätsmodul
$E'$	N/mm <sup>2</sup>	Äquivalenter Elastizitätsmodul (bei Kontakt zweier Elemente mit unterschiedlichem Elastizitätsmodul)
$F_N$	N	Normalkraft
$F_N^d$	N	Normaldämpfungskraft
$F_p$	N	Partikelkraft
$F_T$	N	Tangentialkraft
$F_T^d$	N	Tangentialdämpfungskraft
$FTS$	s	Iterationszeitschritt (Fixed Time Step)

## Formelzeichen

---

G	N/mm <sup>2</sup>	Schubmodul
J	kgm <sup>2</sup>	Massenträgheitsmoment
M <sub>p</sub>	Nm	Partikelmoment
N <sub>I</sub>	-	Gesamte Anzahl an Iterationen
N <sub>Part</sub>	-	Partikelanzahl
R	mm	Partikelradius
R <sub>min</sub>	mm	Partikelradius des kleinstes Partikels
R'	mm	Äquivalenter Partikelradius (bei Kontakt zweier Elemente mit unterschiedlichem Radius)
S <sub>n</sub>	N/mm	Normalsteifigkeit
S <sub>t</sub>	N/mm	Tangentialsteifigkeit
T <sub>R</sub>	s	Rayleigh-Zeitschritt
V <sub>D</sub>	m <sup>3</sup>	Domänenvolumen
a	m/s <sup>2</sup>	Beschleunigung
e	-	Restitutionskoeffizient
g	m/s <sup>2</sup>	Erdbeschleunigung
k	J/m <sup>3</sup> (bzw. N/m <sup>2</sup> )	Kohäsionsenergiedichte
k <sub>TSI</sub>	-	Korrekturfaktor Target Save Intervall
k <sub>Z</sub>	-	Korrekturfaktor Zellenanzahl
k <sub>T</sub>	-	Korrekturfaktor Partikeltätigkeit
k <sub>R</sub>	-	Korrekturfaktor Rayleigh-Zeit
m	kg	Partikelmasse

## Formelzeichen

---

$m'$	kg	Äquivalente Partikelmasse
$t_{\text{Gen}}$	s	Generierungszeit
$t_s$	s	Simulationszeit
$t_{\text{TSI}}$	s	Target Save Intervall (Zielspeicherintervall)
$t_r$	s	Rechenzeit
$t_{\text{T,FF}}$	s	Partikeltätigkeitszeit Freier Fall
$t_{\text{T,R}}$	s	Partikeltätigkeitszeit Ruhe
$t_{\text{T,Rut}}$	s	Partikeltätigkeitszeit Rutsche
$t_{\text{T,S}}$	s	Partikeltätigkeitszeit Schieber
$t_{\text{Vorh}}$	S	Vorhersagezeit
$v_t^{\text{rel}}$	m/s	Relative Tangentialgeschwindigkeit



## 12 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Beispiele für Schüttgüter [3] .....	2
Abbildung 2: Mögliche Probleme beim Betreiben von Silos [2].....	3
Abbildung 3: Verstopfung und Verschüttung [6].....	5
Abbildung 4: (Förder-)Gurtverschleiß [6] .....	5
Abbildung 5: Schlag- und Stoßschäden [6].....	5
Abbildung 6: Verschüttung [6] .....	5
Abbildung 7: Staubentstehung und Materialzerfall [6].....	6
Abbildung 8: seitlicher Rutschenverschleiß [6].....	6
Abbildung 9: Schematisches Flussdiagramm zum Ablauf der Diskreten Elemente Methode (DEM) [15].....	10
Abbildung 10: In EDEM erzeugtes Becherwerk .....	11
Abbildung 11: 2D-Modellierung eines Sandpartikels mittels überlappenden Kreisen [17].....	12
Abbildung 12: Vergleich des originalen Sandkorns und der Näherung durch Clustering [17].....	12
Abbildung 13: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 1 [15] .....	14
Abbildung 14: Simulationsdomäne .....	15
Abbildung 15: Einteilung der Kugeln in Zellräume für den zweidimensionalen Fall [19] .....	16
Abbildung 16: Partikelkontakt.....	16
Abbildung 17: Kontaktmodell.....	17
Abbildung 18: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 2 [15] .....	19
Abbildung 19: Darstellung eines Partikels in globalen und lokalen Koordinaten [20] .....	20
Abbildung 20: Flussdiagramm zum Ablauf der DEM – Schleife 3 [15] .....	21
Abbildung 21: Mögliche Vorgangsweise zur Parameterbestimmung .....	24
Abbildung 22: Versuchsaufbau Rechenzeitvergleich.....	29
Abbildung 23: Rechenzeit zu Simulationszeit .....	29
Abbildung 24: Rechenzeit pro Simulationszeit zu Simulationszeit .....	29
Abbildung 25: Einflussgrößen auf die Rechenzeit .....	31
Abbildung 26: Generierte Partikel über Simulationszeit in Abhängigkeit zum Generierungsverhältnis .....	33
Abbildung 27: Anzahl generierter Partikel über der Rechenzeit in Abhängigkeit zum Generierungsverhältnis ...	34
Abbildung 28: Einfluss der Geometriedynamik am Beispiel einer Bunkeraustragschnecke .....	35
Abbildung 29: Einfluss der Geometriebewegung ohne Partikelkontakt.....	36
Abbildung 30: Einteilung der Kugeln in Zellräume für den zweidimensionalen Fall [19] .....	37
Abbildung 31: Zusammenhang der Rechenoperationen pro Zelle mit der Anzahl der Elemente pro Zelle .....	38
Abbildung 32: Rechenzeit über Zellengrößenverhältnis.....	39
Abbildung 33: Einfluss des Partikel-Schubmoduls auf die Rechenzeit [25] .....	41
Abbildung 34: Vergleich: Siloleerung bei unterschiedlichem Partikel-Schubmodul [25].....	41
Abbildung 35: Einfluss des Partikel-Schubmoduls auf den Massenstrom [25].....	42

## Abbildungsverzeichnis

---

<i>Abbildung 36: Darstellung der Abhängigkeit der normierten Rechenzeit von der normierten Partikelgröße bei konstanter Partikelanzahl [15].....</i>	<i>43</i>
<i>Abbildung 37: Auswirkung des Target Save Intervalls auf die Rechenzeit .....</i>	<i>45</i>
<i>Abbildung 38: Excel-Berechnung zur Rechenzeitabschätzung von DEM-Solutions.....</i>	<i>47</i>
<i>Abbildung 39: Rechenzeit über Zeitschritt.....</i>	<i>48</i>
<i>Abbildung 40: Ermittlung des <math>\beta</math>-Faktors.....</i>	<i>51</i>
<i>Abbildung 41: Ermittlung von <math>k_1</math> für <math>N &gt; 10000</math>.....</i>	<i>52</i>
<i>Abbildung 42: Ermittlung von <math>k_2</math> für <math>N &gt; 10000</math>.....</i>	<i>52</i>
<i>Abbildung 43: Ermittlung von <math>k_1</math> für <math>N &lt; 10000</math>.....</i>	<i>53</i>
<i>Abbildung 44: Ermittlung von <math>k_2</math> für <math>N &lt; 10000</math>.....</i>	<i>53</i>
<i>Abbildung 45: Einfluss der Partikelaktivität .....</i>	<i>55</i>
<i>Abbildung 46: Einfluss von Partikelanzahl und FTS auf die Rechenzeit.....</i>	<i>57</i>
<i>Abbildung 47: Einfluss des FTS auf die Rechenzeit in Abhängigkeit von der Partikelanzahl .....</i>	<i>58</i>
<i>Abbildung 48: Veränderung der Funktionskonstanten in Abhängigkeit zur Partikelanzahl.....</i>	<i>59</i>
<i>Abbildung 49: Normierte Rechenzeit über dem Iterationszeitschritt .....</i>	<i>59</i>
<i>Abbildung 50: Eingabemaske A.....</i>	<i>61</i>
<i>Abbildung 51: Eingabemaske B.....</i>	<i>63</i>
<i>Abbildung 52: Bunkeraustragsschnecke .....</i>	<i>64</i>
<i>Abbildung 53: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Bunkeraustragsschnecke) .....</i>	<i>65</i>
<i>Abbildung 54: Fallrohrversuch .....</i>	<i>67</i>
<i>Abbildung 55: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Fallrohr) .....</i>	<i>68</i>
<i>Abbildung 56: Schneckenförderer mit Becherwerk .....</i>	<i>69</i>
<i>Abbildung 57: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Schneckenförderer mit Becherwerk) .....</i>	<i>70</i>
<i>Abbildung 58: Trichterauslaufversuch.....</i>	<i>71</i>
<i>Abbildung 59: Vergleich des Rechenzeitverlaufs: Simulation vs. Vorhersage (Trichterauslauf) .....</i>	<i>73</i>
<i>Abbildung 60: Vorgehen zur Erstellung einer neuen Vorhersageformel .....</i>	<i>75</i>

## Literaturverzeichnis

- [1] B. Cramer et al, „Energierohstoffe 2009 - Reserven, Ressource. Verfügbarkeit,“ Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover, 2009.
- [2] D. Schulze, Pulver und Schüttgüter - Fließeigenschaften und Handhabung, Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 2009.
- [3] M. Stieß, Mechanische Verfahrenstechnik - Partikeltechnologie 1, Konstanz: Springer Verlag, 2009.
- [4] T. Gröger und A. Katterfeld, „Kalibrierung von DEM-Simulationsmodellen für die Schüttgutfördertechnik,“ *Baumaschine.de*, 4 (2005).
- [5] A. Katterfeld und F. Krause, „Einsatz der Diskreten Elemente Methode in der Schüttgut-Fördertechnik,“ in *Tagungsband zur Fachtagung "Schüttgutfördertechnik 2003"*, Magdeburg, 2003.
- [6] G. Dewicki, „Bulk Material Handling and Processing - Numerical Techniques and Simulation of Granular Material,“ *Bulk Solids Handling*, Bd. Vol. 23, Nr. No. 2, 2003.
- [7] A. Rahman, „Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon,“ *Physical Review*, 19 October 1964; Volume 136, No. 2A.
- [8] P. A. Cundall und O. D. L. Stack, „A discrete numerical model for granular assemblies,“ *Geotechnique*, pp. 47-65, 1979.
- [9] J. Williams, G. Hocking und G. Mustoe, *The Theoretical Basis of the Discrete Element Method*, Rotterdam: Balkema, 1985.
- [10] G. Shi, „Discontinuous deformation analysis - A new numerical model for the statics and dynamics of deformable block structures,“ in *1st US Conference on Discrete Element Methods*, Golden, CO, 1989.
- [11] „www.wikipedia.com,“ [Online]. Available: [http://en.wikipedia.org/wiki/Discrete\\_element\\_method](http://en.wikipedia.org/wiki/Discrete_element_method). [Zugriff am 20.02.2013].

- [12] Y. Kalkan, Anwendungsmöglichkeiten der Diskreten Elemente Methode (DEM) für Schüttgüter in der Fördertechnik, Wien: Bachelorarbeit, Technische Universität Wien, 2012.
- [13] P. Cundall, *Peter Cundall Curriculum Vitae*, 2013.
- [14] *Getting Started with EDEM*, Edinburgh: DEM-Solutions, 2010.
- [15] R. Weiler, M. Ripp, G. Dau und S. Ripperger, „Anwendung der Diskrete-Elemente-Methode zur Simulation des Verhaltens von Schüttgütern,“ *Chemie Ingenieur Technik*, pp. 749-757, 2009, 81, No. 6.
- [16] A. Wonisch, Entwicklung und Anwendung partikelbasierter Simulationstechniken für die Modellierung von Umordnungseffekten und Anisotropieentwicklung in pulvertechnologischen Prozessen, Aachen: Shaker, 2009.
- [17] N. Das, Modeling Three-Dimensional Shape of Sand Grains Using Discrete Element Method, Florida, University of South Florida: Dissertation, 2007.
- [18] *EDEM User Guide - DEM Solutions*, Edinburgh, 2010.
- [19] D. Zhao, E. Nezami, Y. Hashash und J. Ghaboussi, „Three-dimensional Discrete Element Simulation for Granular Materials,“ *Emeraldinsight*, pp. 749-770, 2006 - Vol. 23 No. 7.
- [20] S. Antonyuk, Deformations- und Bruchverhalten von kugelförmigen Granulaten bei Druck- und Stoßbeanspruchung, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg: Dissertation, 2006.
- [21] D. J. Coetzee und D. N. J. Els, „Calibration of Discrete Element Parameters and the Modelling of Silo Discharge and Bucket Filling,“ *Science Direct*, pp. 198-212, 2009.
- [22] G. Szpiro, Die Keplersche Vermutung, Berlin Heidelberg: Springer Verlag, 2011.
- [23] M. Johnstone, Calibration of DEM models for granular materials using bulk physical tests, Edinburgh: Dissertation, 2010.

- [24] R. Kotov, Modellierung der Formstoffströme beim Vollformgießen, Freiberg: Dissertation, 2008.
- [25] „www.dem-solutions/forum,“ DEM-Solutions, 18 November 2011. [Online]. Available: <http://www.dem-solutions.com/forum/viewtopic.php?f=14&t=257>. [Zugriff am 22 April 2013].

---