

## Vorträge

# Kalibrierung von Messdaten und Simulationen als eine Optimierungsaufgabe mit Signalen

T. Most, R. Niemeier, R. Schlegel, J. Will

# Kalibrierung von Messdaten und Simulationen als eine Optimierungsaufgabe mit Signalen

Dr.-Ing. Stephanie Kunath, Dr. Roland Niemeier, Dr.-Ing. Roger Schlegel, Dr.-Ing. Johannes Will

Dynardo GmbH, Weimar, Deutschland

*[Zusammenfassung:]*

Signale sind charakteristische Systemantworten, welche durch Identifikation der wichtigen Parameter eine entscheidende Hilfe darstellen, um physikalische Modelle eines Systems sowie das Systemdesign selbst zu verstehen, zu validieren und zu verbessern.

Kalibrierung ist hier im Sinne der Verwendung von Feldbeobachtungen und Simulationen zur Abschätzung von Simulationsmodellparametern oder zur Bestimmung der Unsicherheit dieser Parameter zu verstehen. Kalibrierung kann somit als Optimierungsaufgabe formuliert werden, bei der die Ausgangsparameter Signale bilden und die Zielfunktion beispielsweise die Summe der quadrierten Abweichungen zwischen den Signalen des Experiments und denen der Simulation ist.

Die Optimierungsaufgabe zur Identifikation der entscheidenden Eingangsparameter kann beispielsweise so formuliert werden, dass der Wert der Zielfunktion durch Auswahl geeigneter Werte für die Inputparameter minimiert werden soll. Dies kann jedoch zu einer nicht eindeutigen Lösung der Eingangsparameter führen. Daher können zusätzliche Grenzbedingungen (Nebenbedingungen) für die Kalibrierung sinnvoll sein.

Mit dem Wissen über die Signifikanz und Sensitivität der Eingangsparameter aus der Kalibrierung kann die weitere Optimierung durchgeführt werden, um das System- oder Produktdesign zu verbessern. Des Weiteren kann mit der Information von der Kalibrierung der Designraum angepasst und geeignete Ersatzmodelle verwendet werden, die ebenso nichtlineare Systemverhalten berücksichtigen.

Die Technik der Identifikation von Eingangsparametern kann im Zuge der Optimierung mit der Kalibrierung von Messdaten mit Verwendung von gemessenen Signalen und Simulationengenerierten Signalen in allen Industriezweigen Anwendung finden, in denen das virtuelle Prototyping wichtig ist. In diesem Artikel führen wir zunächst einige Methoden und Maßgrößen für Sensitivitätsanalysen und Optimierungen ein und diskutieren diese. Im Anschluss wird die Parameteridentifikation als spezielle Optimierungsaufgabe vorgestellt und mit Hilfe von zwei theoretischen Beispielen, gefolgt von einer industriellen Anwendung veranschaulicht.

## 1 Modellkalibrierung und -validierung mit Parameteridentifikation als Optimierungsaufgabe

Optimierung unter Anwendung numerischer Simulationen kann generell bzgl. der Zielstellung in zwei verschiedene Kategorien unterteilt werden. Wie in Abb. 1 dargestellt, sind die Ziele

- die Funktionalität eines Produktes zu verbessern  
oder
- ein Modell zu testen und so zu optimieren, dass es die Realität besser abbildet.

Während die Optimierung für die Verbesserung von Produktfunktionalitäten bereits weit verbreitet ist, wird das Potential zur Verwendung ähnlicher Optimierungstechniken zur Verbesserung der Qualität des Modells – typischerweise mit Parametrisierung und Kalibrierung – oft noch nicht ausgenutzt. Daher ist das Ziel dieses Artikels dieses Potential aufzuzeigen.

Die Arbeitsabläufe, die für die Kalibrierung eines Modells verwendet werden sind ähnlich zu denen zur Verbesserung der Produktfunktionalität. In beiden Fällen ist es empfehlenswert, mit einer Sensitivitätsanalyse zu beginnen, insbesondere, wenn eine größere Anzahl an Eingangsparametern untersucht wird.

## Mathematische Optimierung mit stochastischer Analyse in zwei Phasen des industriellen virtuellen Entwicklungsprozesses

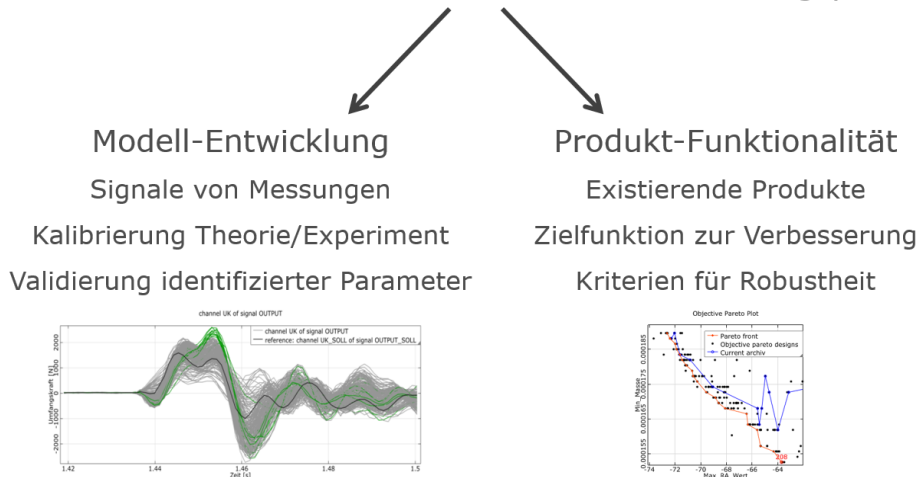


Abb. 1: Überblick über die zwei Hauptzielstellungen der Optimierung unter Nutzung von mathematischen Algorithmen mit stochastischer Analyse.

Eine **Sensitivitätsanalyse** dient der Ermittlung der wesentlichen Abhängigkeiten zwischen den Mess- bzw. Ergebnisgrößen und den Inputparametern. Dieses Vorwissen wird außerdem verwendet, um ein Metamodell zu erstellen, das die Ausgangsparameter als Funktion der Eingangsparameter wiedergibt. Dieser Schritt kann helfen, den Designraum auf die wichtigen Parameter zu minimieren. Als Kriterium zur Klassifizierung der Wichtigkeit der Parameter und der Qualität des Metamodells wurden verschiedene statistische Maßgrößen etabliert [1]. Es ist von großer Bedeutung, dass diese Metamodelle auch nichtlineare Abhängigkeiten der Parameter ermöglichen und dass die Prognosequalität quantifiziert ist. Als Prognosemaß eines solchen Modells wird in [2] der **Prognosekoeffizient (coefficient of prognosis, CoP)** eingeführt. Mit diesen CoPs kann ein nichtlineares Metamodell gewählt werden, welches das beste Modell bzgl. der besten Prognose-Fähigkeit liefert, und nicht nur die beste Anpassung an die Daten. Der Versuch, lediglich ein Modell zu finden, welches am besten an die Daten angepasst ist, kann zu Überanpassung führen. Gleichzeitig ist dieses Modell nicht in der Lage weitere, neue Daten zu erklären. Das Modell, welches auf den besten CoPs basiert, ist das **Metamodell der optimalen Prognosefähigkeit (meta model of optimal prognosis, MOP)**. Dieses erklärt bestmöglich die Variation der Antwortgrößen aus der Variation der Eingangsgrößen.

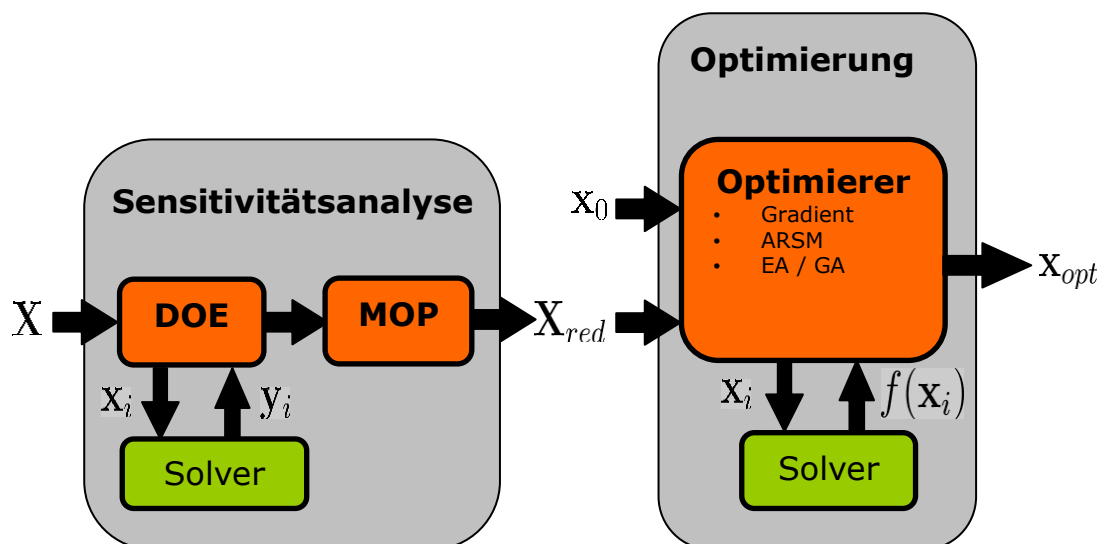


Abb. 2: Ein typischer Ablauf einer Optimierung, beginnend mit einer Sensitivitätsanalyse zur Selektion der wichtigen Parameter, gefolgt von einer Optimierung. DOE = Design of Experiments, MOP = Metamodell der optimalen Prognosefähigkeit, ARSM = adaptive Antwortflächen Modellierung, EA / GA = evolutionäre und genetische Algorithmen.

Ein typischer Ablauf für die Optimierung von Produktfunktionalitäten ist in Abb. 2 dargestellt: Nach der Definition des Designraumes  $X$  (der Parametrisierung) werden mit Hilfe des **Design of Experiment (DOE)** Designs mit verschiedenen Eingangsparametern  $X_i$  erzeugt. Diese unterschiedlichen Designs werden gelöst und somit die Werte der Ausgangsparameter  $Y_i$  generiert. Diese Daten-Sätze können verwendet werden, um das MOP zu erzeugen, womit der Designraum auf die einflussreichsten Variablen  $X_{red}$  reduziert wird, einschließlich nichtlinearer Abhängigkeiten. Von der Sensitivitätsanalyse kann ebenso ein guter Initialparametersatz  $X_0$  zur Optimierung ausgewählt werden. Zur Optimierung ist es notwendig, mindestens eine Optimierungsfunktion  $f(X_i)$  zu definieren. Verschiedene Optimierungsmethoden sind verfügbar, wie gradientenbasierte, adaptive Antwortflächen oder evolutionäre und genetische Methoden [3]. Damit wird schließlich ein optimaler Eingangsparametersatz  $X_{opt}$  gefunden.

Die Kalibrierung kann ähnlich ablaufen, indem als Optimierungsfunktion die Abweichung zu den Messwerten verwendet wird, z.B. die Summe der quadrierten Abweichungen der gemessenen und berechneten Daten für die korrespondierenden Zeitschritte. Der identifizierte Parametersatz, d.h. die für das optimierte Modell gefundenen Parameter und Parameterwerte, ist dann der optimierte Satz an Eingangsparametern  $X_{opt}$ .

## 2 Zwei theoretische Beispiele

Das Potential der Nutzung von Optimierungstools zur Parameteridentifikation wurde bisher kaum erkannt. Dies ist u.a. verbunden mit der Tatsache, dass nur wenige dieser Tools verfügbar sind, welche verschiedene Feldmessungen bewältigen können, z.B. Zeitreihen für einen Druck, oder die generell die Fähigkeit haben, für die Zielfunktion der Optimierung Signale aus realen Testumgebungen einfach zu integrieren. Während der Entwicklung solcher Modelle zur Simulation ist die Parametrisierung der Schlüssel zur Sicherstellung eines realen Modellverhaltens.

### 2.1 Gedämpfter harmonischer Oszillator

Das erste Beispiel ist ein einfacher, gedämpfter harmonischer Oszillator. Er wird verwendet, um zu zeigen, wie Signale behandelt werden können und dass verschiedene Optimierungsläufe zu verschiedenen Werten der Parameter führen können, aufgrund der Tatsache, dass die Lösung mit unterschiedlichen Werten der Eingangsparameter erzeugt werden kann.

Die wesentlichen Eingangsparameter für die Kalibrierung eines gedämpften harmonischen Oszillators sind die Masse  $m$ , die initiale kinetische Energie  $E_{kin}$ , die Dämpfung  $c$  und die Steifigkeit  $k$  (Abb. 3). Das Referenzsignal ist die Verschiebung  $x$  über die Zeit für einige Parameter, die die unbekanntenen Parameter in diesem Beispiel sind (rote Kurve in Abb. 4).

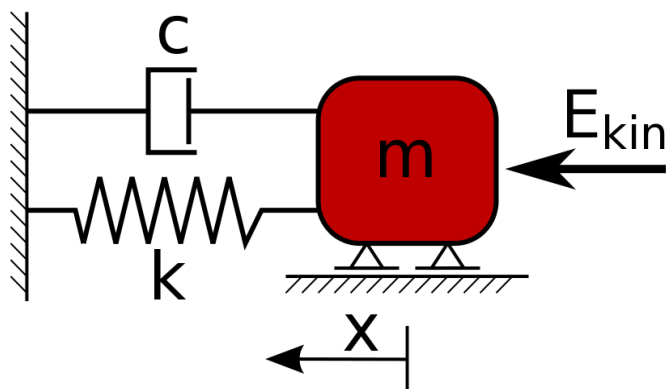


Abb. 3: Darstellung des gedämpften harmonischen Oszillators.

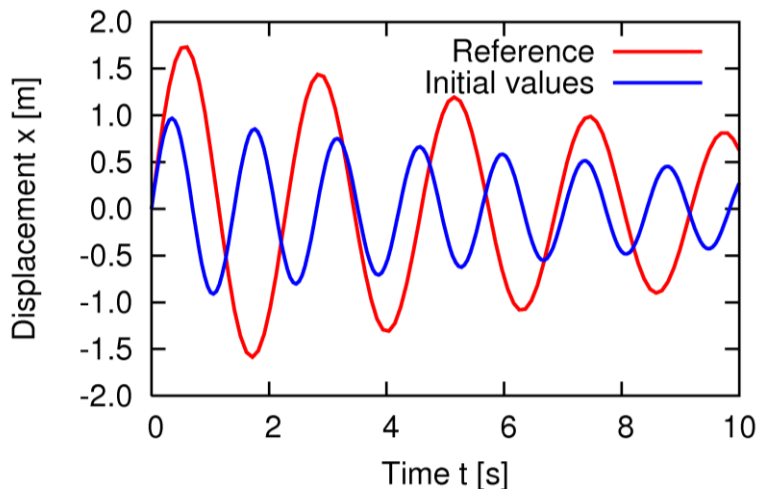


Abb. 4: Das Referenzsignal und ein Signal, welches aus den nicht optimierten Parameterwerten berechnet wurde.

Die Gleichungen für den gedämpften Oszillator sind:

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx = 0$$

$$\ddot{x} + \frac{c}{m}\dot{x} + \frac{k}{m}x = 0$$

$$\ddot{x} + 2D\omega_0\dot{x} + \omega_0^2x = 0$$

und sie haben folgende analytische Lösung für die Verschiebung

$$x(t) = e^{-D\omega_0 t} \sqrt{\frac{2E_{kin}}{m}} \frac{1}{\omega} \sin(\omega t),$$

Mit der ungedämpften Eigenfrequenz  $\omega_0$ :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Lehr's Dämpfungsverhältnis D:

$$2D\omega_0 = \frac{c}{m}$$

und der gedämpften Eigenfrequenz  $\omega$ :

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - D^2}$$

Das Ziel der Optimierung ist, die Eingangsparameter zu identifizieren, die ein Signal erzeugen, welches sehr nahe am Referenzsignal ist. Daher ist die Zielfunktion die Summe der quadrierten Abweichungen zwischen der Verschiebung der Referenz  $x^*$  und der Verschiebung der berechneten Lösung  $x$  bei  $n$  diskreten Zeitschritten (Signale sind in der Regel diskretisiert aufgrund der Messung):

$$f(m, k, D, E_{kin}) = \sum_{i=1}^n (x_i^* - x_i)^2$$

Die Sensitivitätsstudie für diesen Fall zeigt, dass alle Eingangsvariablen signifikant sind. Die Lösungen für alle Eingangsparameter der Sensitivitätsstudie, d.h. alle Lösungen des Design of Experiments (Abb. 5), können bereits Einblicke über die interessanten Parameterbereiche für reale Anwendungen sowie Informationen über die Machbarkeit der Parameteridentifikation selbst liefern.

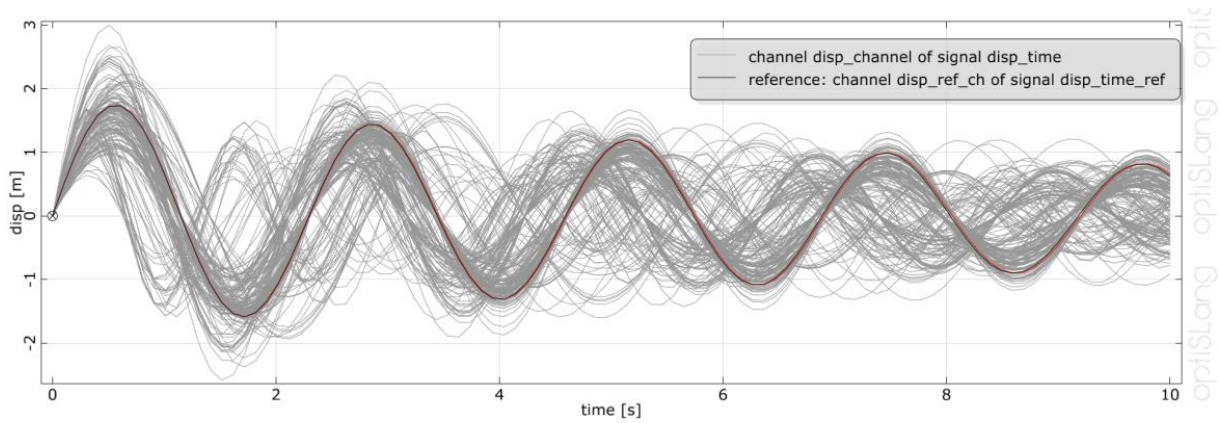


Abb. 5: Das Referenzsignal mit allen Signalen von der Sensitivitätsanalyse bzw. des Design of Experiments.

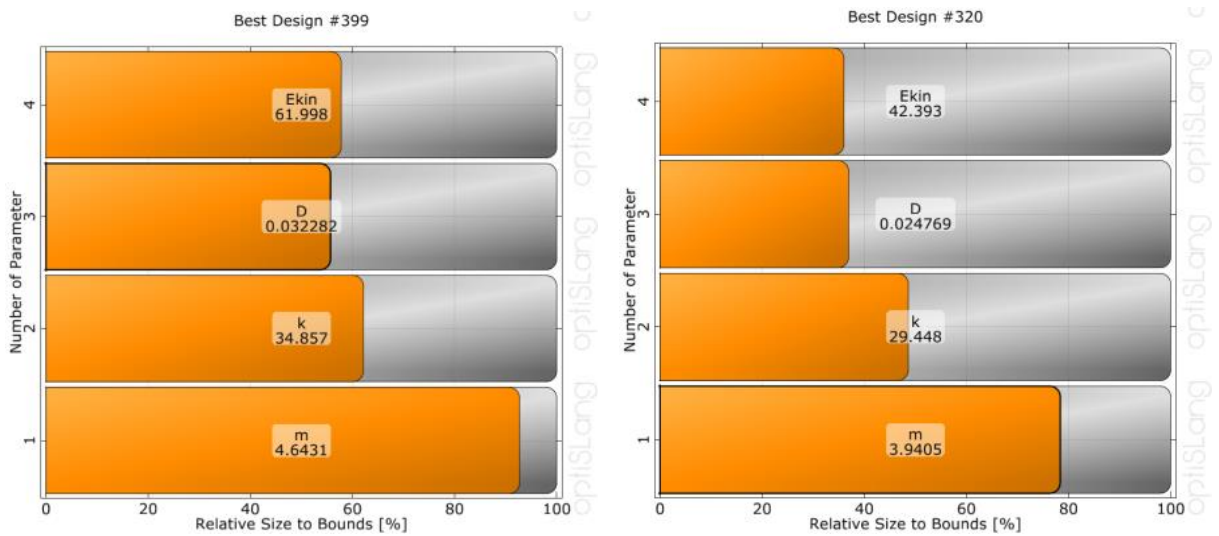


Abb. 6: Zwei verschiedene Optimierungen führen zu ziemlich unterschiedlichen identifizierten Parameterwerten.

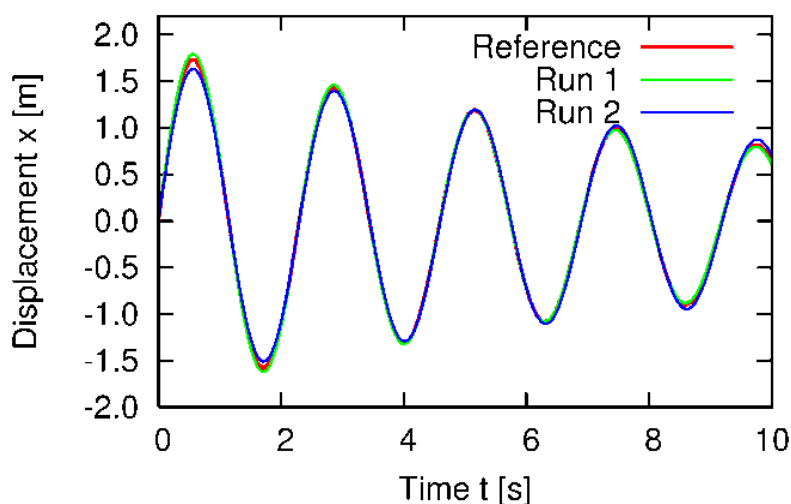


Abb. 7: Die identifizierten Parameterwerte beider Optimierungen führen zu einer guten Näherung des Referenzsignals.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist, dass die Durchführung verschiedener Optimierungen häufig zu unterschiedlichen Werten der identifizierten Parameter führt, d.h. es gibt mehrere Lösungen (Abb. 6). Trotz dieser unterschiedlichen Parameterwerte werden in beiden Fällen gute Resultate mit geringen

Abweichungen zum Referenzsignal erzeugt (Abb. 7). Diese nicht eindeutige Lösung für die identifizierten Parameter ergibt sich aufgrund der Tatsache, dass die Parameter  $E_{kin}$  und  $m$  sowie  $m$  und  $k$  nur paarweise in der Lösung für die Verschiebung auftreten und dass nur ihr Verhältnis für die Lösung von Relevanz ist. Daher kann eine eindeutige Lösung generiert werden, indem beispielsweise ein konstanter Wert für die Masse zum Zweck der Optimierung eingesetzt wird. Dieses Beispiel ist mit detaillierteren Informationen in einem optiSLang® Tutorial zu finden, welches von Dynardo GmbH erhältlich und momentan in der Software von optiSLang® enthalten ist.

## 2.2 CFD Testmodell

Das zweite Beispiel ist ein vereinfachtes CFD Testmodell, bei dem ein Referenzvektor mit 12 Ausflusgeschwindigkeiten existiert. Das Ziel der Optimierung ist, den Satz von 10 Eingangsparametern für den Druck (Press\_1 ... Press\_10) zu finden, womit die Referenz-Ausflusgeschwindigkeiten möglichst nahe erreicht werden (Abb. 8 und Abb. 10 o.l.).

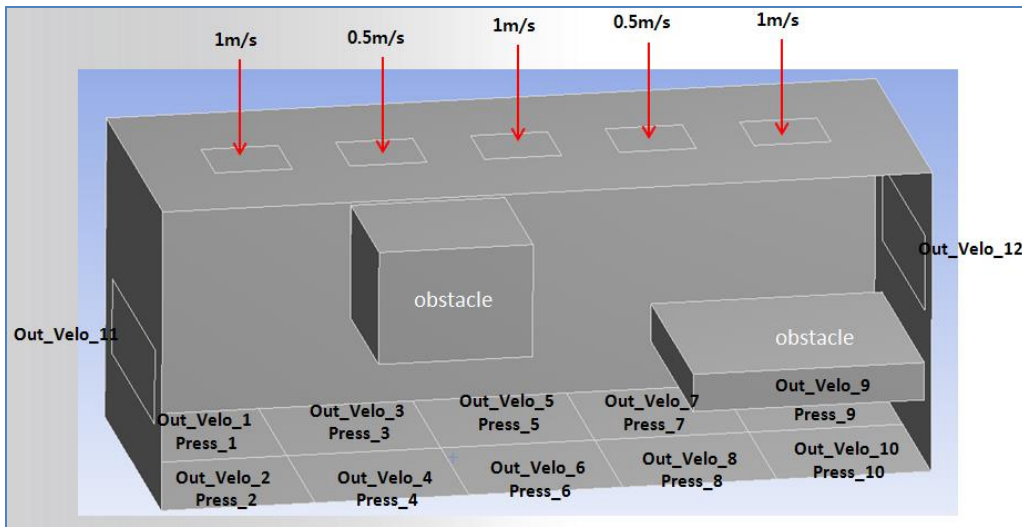


Abb. 8: Ein CFD-Beispiel eines Raumes mit zwei Hindernissen. 12 ausgangsseitige Flussgeschwindigkeiten und 10 Drücke als Eingangsparameter sind die systembeschreibenden Größen.

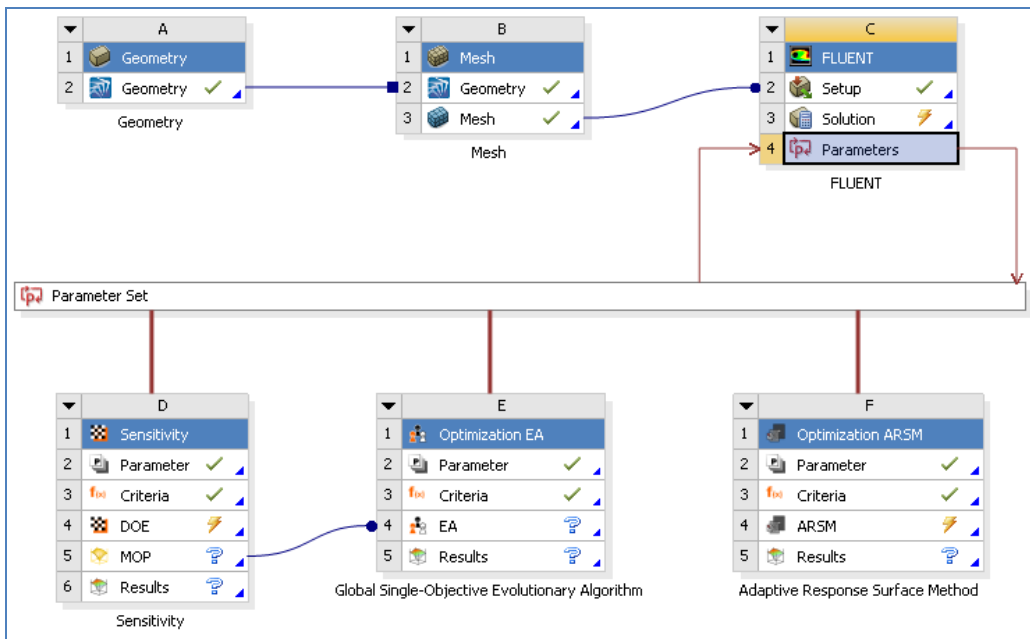


Abb. 9: Die ANSYS® Workbench gekoppelt mit optiSLang® inside ANSYS® Workbench für das CFD-Beispiel des Raumes mit zwei Hindernissen. Anhand der Parameter aus einem CFD-Modell erfolgte nach einer Sensitivitätsanalyse eine globale Optimierung basierend auf evolutionären Algorithmen.

Damit wurden einige gute Designs erzeugt, die noch nicht alle Nebenbedingungen erfüllen. Daher wurde in einem zweiten Schritt mit der Adaptiven Antwortoberflächen-Methode eine weitere, gezieltere Optimierung vorgenommen.

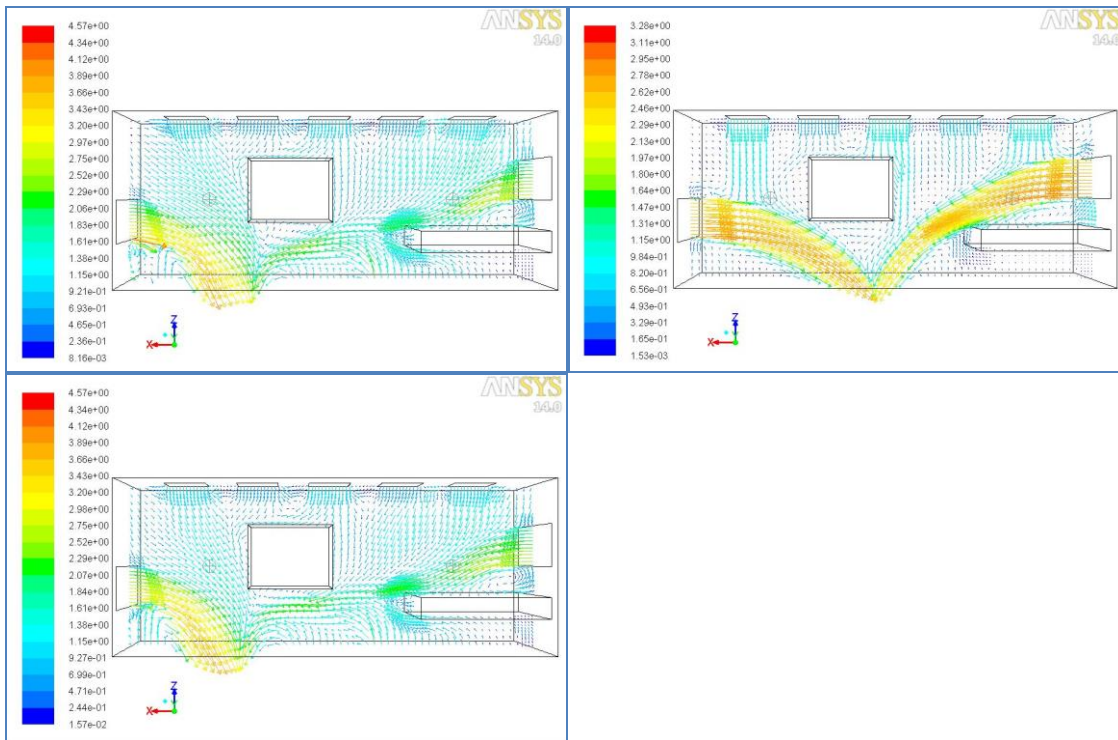


Abb. 10: Flussgeschwindigkeitsvektoren eingefärbt über deren Betragshöhe; Referenzlösung (o. l.), Ausgangslösung (o. r.) und optimierte Lösung (u. l.).

Als Optimierungsfunktion werden – ähnlich dem Beispiel für den gedämpften harmonischen Oszillator – die quadrierten Abweichungen zwischen den Referenzgeschwindigkeiten  $Ref\_Velo_i$  und den Geschwindigkeiten  $Out\_Velo_i$  angesetzt, die minimiert werden sollen:

$$f(Press_1 \dots Press_{10}) = \sum_{i=1}^{12} (Ref\_Velo_i - Out\_Velo_i)^2$$

Auch in diesem Fall ist es wichtig, zusätzliche Nebenbedingungen zu setzen. Dazu soll hier jeder Ausgangsparameter im Bereich von 10% am korrespondierenden Referenzausgangsparameter liegen:

$$abs((Ref\_Velo_i / Out\_Velo_i) * 100 - 100) < 10$$

Dieses Problem wurde mit optiSLang<sup>®</sup> inside ANSYS<sup>®</sup> Workbench gelöst. Der komplette Arbeitsablauf ist in Abb. 9 illustriert. Die Lösung wurde mit der Adaptiven Antwortoberflächen-Methode (Adaptive Response Surface Method, ARSM) gefunden. Generell wird diese Methode für eine kleine Anzahl kontinuierlicher Eingangsparameter empfohlen. Das Optimierungsergebnis der Flussgeschwindigkeiten im Raum ist in Abb. 10 dargestellt.

### 3 Praktische Anwendungen

Die praktischen Einsatzmöglichkeiten zur Modellkalibrierung durch Parameteridentifikation sind in vielen Bereichen zu finden. Einige Publikationen dazu sind in der Online-Bibliothek von Dynardo GmbH zu finden [4]. Es werden Applikationen aus verschiedenen industriellen Gebieten gezeigt, wie aus dem Automobilbau [3], dem Bauingenieurwesen [5] sowie der Öl- und Gasindustrie [6]. In diesem Artikel beziehen wir uns lediglich auf ein Beispiel mit Signalen: eine neue Modellkalibrierung zur Analyse eines nuklearen Endlagers.



### 3.1 Kalibrierung eines Modells für ein nukleares Endlager

Auf dem Gebiet der Sicherheit nuklearer Endlager wurden Erhitzerversuche in Untertagelaboratorien durchgeführt, um thermo-hydraulisch-mechanische (T-H-M) Interaktionen zu verstehen. In diesen Experimenten wurde die Änderung der Temperatur, des Porenwasserdrucks und der Spannungsfelder in Abhängigkeit des Wärmeenergieeintrages gemessen.

Die DBE TECHNOLOGY GmbH entwickelt in Kooperation mit der Dynardo GmbH Simulationsmodelle, die in der Lage sind, diese Interaktionen in Tonstein nachzuvollziehen [7]. Ein wichtiger Bestandteil dieser Entwicklungen ist die Kalibrierung der Modelle bzgl. der Resultate der Messungen.

Das Heizexperiment wurde mit einer T-H-M gekoppelten 3-dimensionalen finite Elemente Methode mit ANSYS® und multiPlas analysiert. Dafür wurden spezielle Routinen aus der Poroelastizitätstheorie, thermo-hydraulischen und thermo-mechanischen Kopplung in isotropen und anisotropen Tonsteinformationen entwickelt und in ANSYS® implementiert.

Für die Sensitivitätsanalyse und die Parameteridentifikation wurde die Optimierungsoftware optiSLang® verwendet. Die Komplexität der thermisch-hydraulisch-mechanischen Phänomene bedingt eine Anzahl von ca. 30 Modellparametern. Entscheidend für den erfolgreichen Abgleich von Messung und Simulation dieser komplexen Aufgabenstellung waren einerseits die in optiSLang® verfügbaren leistungsfähigen Algorithmen und Filterstrategien zur Beherrschung großer Parameterräume und andererseits die mit ANSYS® und multiPlas erreichten kurzen Rechenzeiten.

In der Sensitivitätsanalyse wurden die Materialparameter (incl. der Parameter der Kopplungsbeziehungen) innerhalb physikalisch möglicher Parametergrenzen variiert. Für die Untersuchungen standen Temperatur- und Porenwasserdruckmessungen an insgesamt 17 Messpunkten vor und nach dem Erhitzen zur Verfügung. Aufgrund der vielen Unsicherheiten des Tunnelauffahrens und Einbringens der Messgeräte wurde die Modellkalibrierung und Parameteridentifikation auf den Erhitzerversuch selbst beschränkt.

Für die Bewertung der Sensitivitäten der relativen Porenwasserdrücke wurden diskrete Werte zu bestimmten Zeitpunkten verwendet. Durch die Auswahl dieser Antwortgrößen wurden Aussagen zur Sensitivität jeweils zu Beginn und zum Ende der jeweiligen Heizphasen sowie zum Zeitpunkt des Erreichens des maximalen Porenwasserdrucks möglich. Ohne weiter ins Detail für einzelne Sensitivitäten gehen zu wollen, kann generell ausgesagt werden, dass die Gesamt-CoPs der einzelnen Antwortgrößen hohe Werte von > 85% aufweisen. Dies unterstreicht die hohe Erklärbarkeit der wesentlichen physikalischen Phänomene durch die identifizierten Zusammenhänge (Abb. 11).

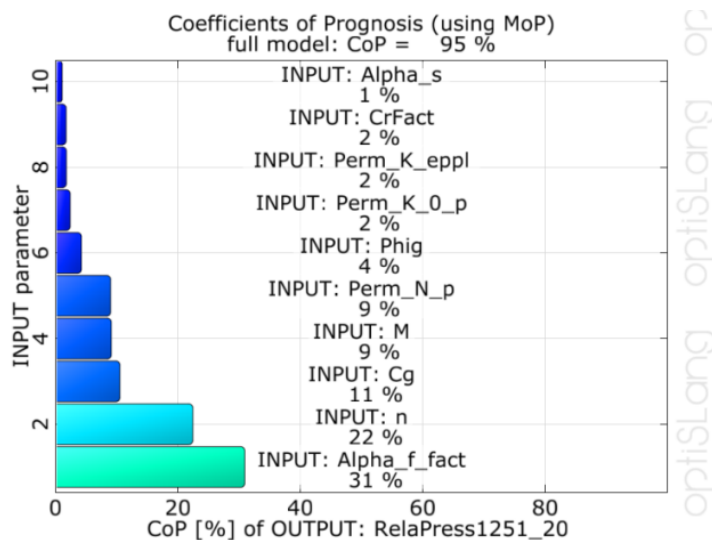


Abb. 11: Hohe CoPs, z.B. des relativen Porenwasserdrucks, sind ein guter Indikator für eine hohe Qualität des Modells.

Durch den Vergleich der Streubereiche der berechneten Größen mit den Zeitverläufen der Messergebnisse (Abb. 12) konnten darüber hinaus Aussagen zur Modellqualität und zur Abgleichbarkeit des numerischen Modells mit den Versuchsergebnissen getroffen werden. Umschließt der Streubereich des Simulationsmodells den gemessenen Verlauf, dann ist ein erfolgreicher Abgleich innerhalb der gewählten Parametergrenzen möglich. Abb. 12 zeigt, dass das ab dem Beginn des Erhitzerversuchs ( $t=0$ ) gegeben ist.

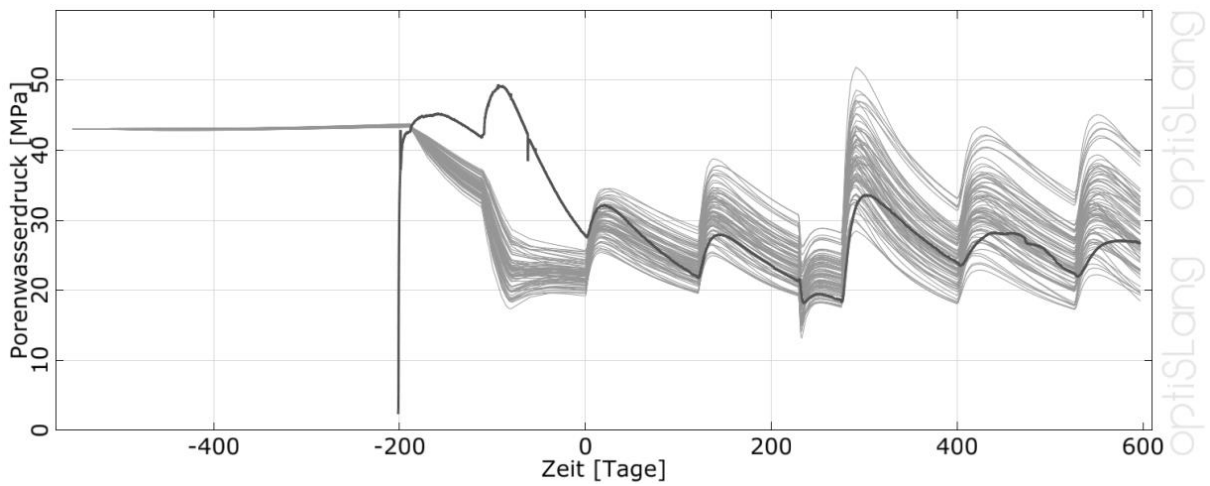


Abb. 12: Porenwasserdruck am Messpunkt 1253 als ein Signal über die Zeit verglichen mit den simulierten Signalen der Sensitivitätsanalyse.

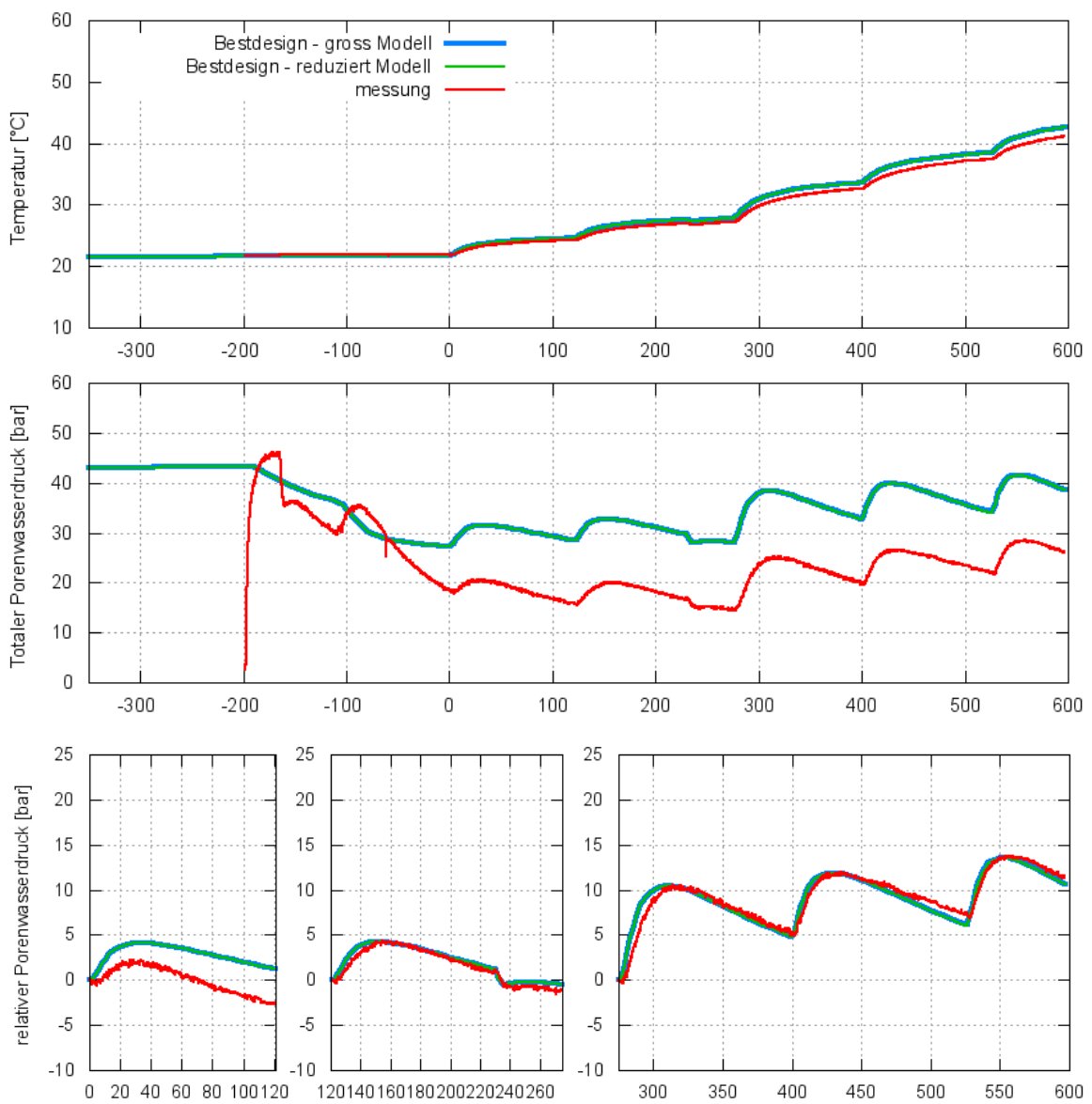


Abb. 13: Vergleich Messung vs. Simulation am Messpunkt 1252 nach der Parameteridentifikation. Oben: Temperaturverlauf, Mitte: totaler Porenwasserdruck, Unten: relativer Porenwasserdruck der drei Heizphasen.

Im Rahmen der Parameteridentifikation wurde ein Set von Inputparametern, welches die Zeitverläufe der gemessenen und berechneten Temperaturen und Porenwasserdrücke sehr gut abgleicht, ermittelt. Parameter, die in der Sensitivitätsanalyse keinen Einfluss auf die Antwortgrößen zeigten, wurden nicht in die Parameteridentifikation einbezogen. Sie wurden mit ihren Referenzwerten berücksichtigt. Der Vergleich der gemessenen und berechneten Zeitsignale der Temperaturen und relativen Porenwasserdrücke (Abb.13) verdeutlicht, dass mit der hier verwendeten Modellbildung die im Erhitzer Versuch zu beobachtenden physikalischen Phänomene (thermohydraulische und thermomechanische bzw. thermoplastische Effekte) sehr plausibel simuliert werden konnten und ein sehr guter Abgleich für Temperaturen und Porenwasserdrücke gefunden werden konnte.

#### 4 Ausblick

In diesem Artikel haben wir mit theoretischen und einem praktischen Beispiel demonstriert, wie die Kalibrierung eines Modells mit Parameteridentifikation als ein Optimierungsproblem unter Nutzung von Signalen behandelt werden kann. Diese Herangehensweise hat das Potential eine wichtige Standardtechnologie für die Entwicklung von akkurateren Modellen für die Simulation zu werden.

#### 5 Referenzen

- [1] T. Most, J. Will. Sensitivity Analysis using the Metamodel of Optimal Prognosis. In Proc. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktag 8.0, Weimar, Deutschland, November 24-25, 2011.
- [2] T. Most, J. Will. Metamodel of Optimal Prognosis - an automatic approach for variable reduction and optimal metamodel selection. In Proc. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktag 5.0, Weimar, Deutschland, November 20-21, 2008.
- [3] J. Will. The Calibration of Measurement und Simulation as Optimization Problem. NAFEMS Seminar Virtual Testing - Simulationsverfahren als integrierter Baustein einer effizienten Produktentwicklung. Wiesbaden, Deutschland, Mai 10-11, 2006. 2006.
- [4] <http://www.dynardo.de/bibliothek.html>
- [5] V. Zabel, M. Brehm. System identification of high-speed railway bridges. In Proc. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktag 5.0, Weimar, Deutschland, November 20-21, 2008.
- [6] J. Will. Optimizing of hydraulic fracturing procedure using numerical simulation. In Proc. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktag 7.0, Weimar, Deutschland, Oktober 21-22, 2010.
- [7] R. Schlegel, P. Vymlatil, J. Will, M. Jobmann, M. Polster, M. Breustedt, Parameteridentifikation von Tonsteinformationen in Untertagelaboratorien. In Proc. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktag 9.0, November 29-30, 2012