

Entwicklung eines Optimierungsalgorithmus für die direkte Reduktion von Eisenoxid

Niklas Füller

01.02.2021-12.03.2021

Während meines Praktikums arbeitete ich an einem Projekt mit, welches die Herstellung von Eisen aus Eisenerz betrachtet. Das Eisenerz (Fe_2O_3) liegt dabei in Form von sogenannten Pellets vor. Dieses wird mit Wasserstoff (H_2) oder Kohlenstoffmonoxid (CO) in mehreren Reaktionen zu Eisen (Fe) reduziert. Das Ziel hierbei ist es, den Mechanismus und die Kinetik der Reaktion möglichst gut abbilden zu können. Bei den Forschungen an denen ich mitarbeitete, wurde stets ein Eisenerzpellet genutzt. Für verschiedene Pellets wurden Experimente mit unterschiedlichen Parametern wie Temperatur und Porosität durchgeführt. Die entstandenen Datensätze stellen die Umsetzung des Eisenerzes zu unterschiedlichen Zeitpunkten dar. Man verwendet ein sogenanntes eindimensionales Modell, da das Pellet kugelförmig angenommen wird und damit aufgrund der Symmetrie für die Umsetzung der einzelnen Teilchen nur die Entfernung vom Pelletmittelpunkt relevant ist. Um das Verhalten der festen und gasförmigen Teilchen in diesem porösen Pellet darzustellen, wurden Differentialgleichungen aufgestellt, die auf der Diffusion des Gases, dem 1. Fickschen Gesetz und der Reaktion der Teilchen beruhen. Durch eine Diskretisierung des Radius erhält man für jeden Radius ein System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen nach der Zeit. Betrachtet man alle diskreten Punkte zusammen, ergibt sich ein System aus Differentialgleichungen. Dieses wird dann gelöst, um eine Funktion für die Umsetzung in Abhängigkeit von der Zeit zu erhalten.

Meine Aufgabe war es, das Programm welches das Modell berechnet weiterzuentwickeln. Das Ziel der Modellierung ist es, die experimentell ermittelten Werte möglichst gut abzubilden. Die Funktion, welche die Umsetzung beschreibt, ist dabei von einer

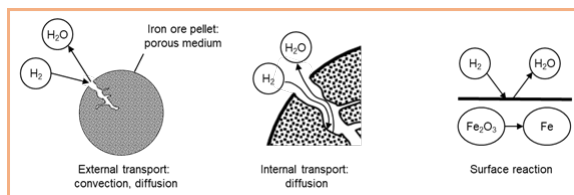


Abbildung 1: Reaktionsmechanismus

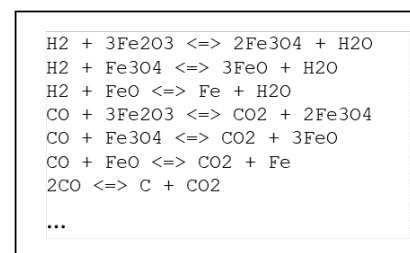


Abbildung 2: mögliche Reaktionen

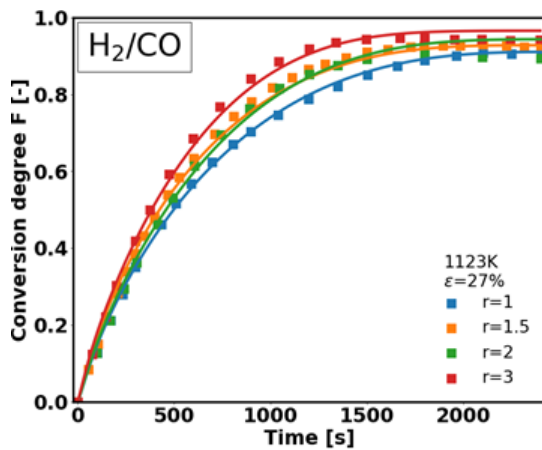


Abbildung 3: Umwandlung in Abhängigkeit von der Zeit. Die Punkte sind die Messwerte und die Kurve ist die berechnete Umwandlung.

Reihe von Parametern abhängig. Die Software gibt dem Nutzer die Möglichkeit unterschiedliche Parameter auszuwählen. Diese werden dann durch das Programm optimiert, indem die quadratischen Fehler zwischen den berechneten und den gemessenen Ergebnissen minimiert werden. Meine Aufgabe war es, diesen Prozess zu beschleunigen. In der Regel betrachtet man mehrere unterschiedliche Experimente gleichzeitig. Dabei gibt es bestimmte Parameter, die experimentspezifisch sind, und nur das spezielle Experiment beeinflussen. Haben mehrere Experimente gemeinsame Einflussgrößen, da sie z.B. das gleiche Pellet nutzen, muss der entsprechende Parameter über alle entsprechenden Experimente optimiert werden. Die Experimente nutzen unterschiedliche Reaktionen (siehe Abbildung 2). Für jede Reaktion gibt es unterschiedliche Reaktionsparameter, die entsprechend über alle Experimente optimiert werden müssen, die diese Reaktionen enthalten. Der laufzeitintensivste Teil ist dabei das System aus Differentialgleichungen, welches pro Experiment und Iteration gelöst werden muss.

Die bisherige Lösung war so konzipiert, dass die gewählten und zu optimierenden Parameter den zulässigen Bereich des Minimierungsproblems bildeten. Um die Laufzeit zu verringern, arbeitete ich an einer alternativen Methode, welche die Parameter trennt. Damit werden nicht mehr alle Parameter gleichzeitig optimiert, sondern es wird hintereinander ein lokales Minimum für eine bestimmte Gruppe an Variablen gesucht. Der von mir entwickelte Mechanismus optimiert zuerst die chemischen Parameter, dann jene, die mehrere Experimente beeinflussen und dann die experimentspezifischen Parameter. Hier wurden gezielt die Unabhängigkeit einzelner Parameter ausgenutzt. Das Ergebnis meiner Arbeit war ein neuer Algorithmus, welcher die gewählten Parameter so optimiert, dass die quadratischen Fehler zwischen den experimentellen Werten und der berechneten Umsetzung minimiert werden. Dabei kann man je nach Anwendung zwischen unterschiedlichen Optimierungsverfahren wählen. Der entscheidende Vorteil ist dabei die verringerte Laufzeit. Somit kann jetzt eine größere Menge an Parametern in weniger Zeit optimiert werden, womit der Algorithmus in der Forschung besser einsetzbar ist.