

# Prozessmodellierung in der metallurgischen Prozesstechnik

J. Wendelstorf

Institut für Metallurgie, Technische Universität Clausthal

`jens.wendelstorf@tu-clausthal.de`

1. Niedersächsisches Symposium Materialtechnik (NSM)  
12./13. Februar 2015

Unter ständig wechselnden Anforderungen erfordert die Gestaltung optimaler Prozesse in der Verfahrenstechnik und der Werkstofftechnik den Einsatz von Prozessmodellen. Dazu werden deren Zweck, Definition, Genese und Qualitätssicherung diskutiert. An Beispielen werden wesentliche Aspekte der Modellgewinnung und des Modelleinsatzes demonstriert. Ein Kühlstreckenmodell zeigt das Zusammenspiel von Labormessungen und mathematischer Modellierung zur Lösung betrieblicher Fragestellungen mit Hilfe von Prozessmodellen. Für die Schalenbildung bei Stranggießen von Stahl wird gezeigt, dass auch für komplexe orts aufgelöste FEM-Modelle eine Sensitivitätsanalyse durchführbar ist. Das letzte Beispiel beschäftigt sich mit der Modellparametrierung von Online-Modellen mit Hilfe von Betriebsdaten.

## 1 Einleitung

Die Modellierung metallurgischer Prozesse ist ebenso alt wie deren wissenschaftliche Untersuchung. Gerade in der metallurgischen Verfahrenstechnik ist die Majorität der praktisch relevanten Prozesse durch langwierige Experimente entstanden und oft auch mit modernsten Mitteln nicht hinreichend vorausberechenbar. Es besteht jedoch keine Notwendigkeit in den Kategorien *high-tech* (=erst berechnet, dann realisiert) und *low-tech* (=durch Probieren entstanden) zu verweilen. Auch die zunächst nicht vorausberechenbaren (sich selbst organisierenden) Teile eines klassischen Prozesses lassen sich mit Modellen beschreiben, auch wenn diese dann unter Umständen auf Labormessungen basieren. Im Folgenden sollen einige Aspekte der in [1] dargestellten Prozessmodellierung behandelt werden.

## 2 Metamodellierung

Da Prozessmodelle nicht Selbstzweck sondern Arbeitsmittel darstellen, wird vor den Beispielen auf einige Aspekte der Modellnutzung und Analyse eingegangen.

## 2.1 Modelldefinition

Als Prozessmodell wird ein Modell bezeichnet, welches das Verhalten eines dynamischen Vorgangs abbildet, ohne das der Vorgang selbst durchgeführt wird. In der Definitionsphase werden die wesentlichen Eingangs- und Ausgangsgrößen des Prozesses festgelegt. Das vorhandene Wissen über den realen Prozess wird umgesetzt in eine formale Schnittstellendefinition, die – unabhängig von einem konkreten Modell – den Prozess charakterisiert und seine konkreten Ausprägungen experimentell und rechnerisch quantifizierbar macht.

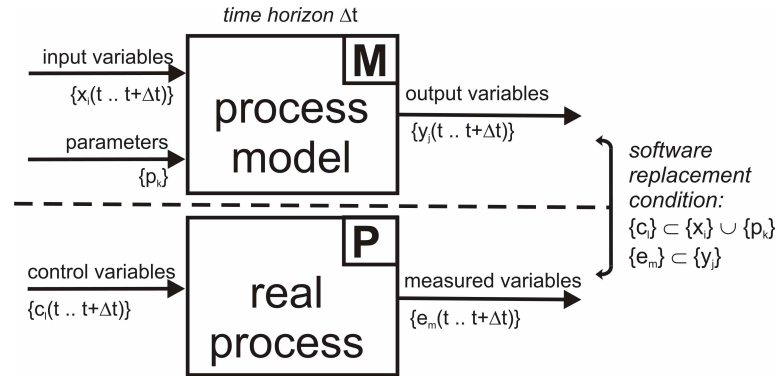


Abb. 1: Definition eines Prozessmodelles nach [2].

Aus regelungstechnischer Sicht wird ein realer Prozess **P** über Eingänge gesteuert und liefert Ergebnisse an den Ausgängen. Aus verfahrenstechnischer Sicht wird ein Prozess über Bilanzgrenzen von seiner Umgebung abgegrenzt und von Einflussgrößen bestimmt. Aus physikalischer Sicht können sich zusätzliche Eingangsgrößen ergeben, die zur Aufstellung von Stoff-, Impuls- und Energiebilanzen erforderlich sind. Aus all diesen Ein- und Ausgangsgrößen kann für jeden Prozess eine Schnittstelle zu einem den Prozess – unter spezifizierten Zielvorgaben – abbildenden Modell definiert werden.

Diese *Modellschnittstelle* ist, wie in Abb. 1 skizziert, eng mit der Definition der Parameter, Mess- und Steuergrößen des realen Prozesses verknüpft. Da Prozessmodelle in Form von Software implementiert sein müssen, werden diejenigen Daten als Eingänge bezeichnet, die dem Modell übergeben werden, die dieses aber nicht ändern kann. Die Ausgänge sind dann diejenigen Daten, die das Modell liefert. Die scharfe Abgrenzung des Prozessmodelles als einer *black box*, die nur über die Eingänge  $x_i(t)$ ,  $p_k$  und die Ausgänge  $y_j(t)$  mit der Außenwelt kommuniziert hat folgende Vorteile:

- Es werden keine Annahmen über die Art des Modells gemacht.
- Die  $x_i(t)$ ,  $p_k$  und  $y_j(t)$  können offen gelegt und standardisiert werden.
- Verschiedene Modelle des gleichen Prozesses werden vergleichbar.
- Die Modelldetails einschließlich der Zustandsgrößen  $z_l(t)$  müssen nicht offen gelegt werden.

Der reale Prozess wird durch die Stellgrößen  $\{c_l(t)\}$  bestimmt und liefert die Messwerte  $\{e_m(t_{m,n})\}$ . Ziel ist es nun, das Prozessmodell an statt des realen Prozesses zu verwenden um für eine konkrete Menge  $\{c_l\}$  die  $\{e_m\}$  rechnerisch zu bestimmen. Das Modell *simuliert* die Realität, zum Beispiel durch die Integration eines Modells im Zustandsraum

$$\frac{d}{dt}z_l(t) = f_l(z_l(t), x_i(t), p_k, t) . \quad (1)$$

Stehen nun Prozessmodelle zur Simulation realer Prozesse in ausführbarer Form zur Verfügung, so lassen sich daraus **Metamodelle** konstruieren, mit denen auch die praktisch relevanteren indirekten Fragestellungen beantwortet werden können.

## 2.2 Systematische Modellerstellung

Die wesentlichen Einzelschritte der Modellerstellung sind:

1. Aufgabenstellung (Pflichtenheft).
2. Problemdefinition.
3. Stand der Technik (Literatur, Anwender des Prozesses, ...).
4. Konstruktion des Prozessmodelles.
5. Untersuchung des Prozessmodelles.
6. Parametrierung und Validierung.
7. Modellinbetriebnahme.

Wichtig ist auch die Quantifizierung von Unsicherheiten in den Ausgangsgrößen (*Genauigkeit*) und die Quantifizierung der Kausalitäten (*Sensitivitätsanalyse*). Wie eine Messung liefert auch ein Modell ein Ergebnis, welches mit einer systematischen Unsicherheit behaftet ist. Über die *Modellparametrierung* können Prozessmodelle auch der *indirekten Messung* dienen.

## 2.3 Sensitivitätsanalyse

Die komplexen Fragen der Genauigkeit und der auftretenden Verzweigungspunkte (Bifurkationen) werden hier ignoriert. Mit den Steuergrößen  $x_i(t)$  und  $p_k$  ändern sich auch die Ergebnisse  $y_j(t)$ . Das Maß für diese Änderungen wird als Sensitivität bezeichnet. Die Bestimmung der Ableitungen der Modellausgänge nach den Modelleingängen wird als lokale Sensitivitätsanalyse bezeichnet. Die Sensitivität des Ausgangswertes  $y_j(t)$  in Bezug auf den Parameter  $p_k$  ist definiert als

$$s_{jk}(t) = \frac{\partial y_j(t)}{\partial p_k} \quad (2)$$

Üblicherweise werden die Sensitivitäten mit typischen Werten  $\tilde{y}_j$  und  $\tilde{p}_k$  normiert:

$$\tilde{s}_{jk}(t) = \frac{\partial y_j(t)}{\partial p_k} \cdot \frac{\tilde{p}_k}{\tilde{y}_j} \quad (3)$$

Ein Wert von  $\tilde{s} = 1 \equiv 100\%$  bedeutet somit, dass eine relative Änderung von  $p_k$  sich in einer gleichartigen relativen Änderung von  $y_j$  niederschlägt. Analog sind die auf die zeitabhängigen Eingänge bezogenen Sensitivitäten definiert [1]. Es sind auch Merkmals sensitivitäten zu betrachten und um einen Maßstab für die Bedeutung der einzelnen Modelleingänge zu bekommen, der nicht nur lokal, das heißt für einen konkreten Modellfall und Zeitpunkt gilt, wurde die globale Sensitivitätsanalyse entwickelt.

## 2.4 Modellkategorien

Prozessmodelle lassen sich nach einer Vielzahl von Kriterien einteilen. Von grundsätzlicher Bedeutung ist jedoch eine Einteilung nach Rechenaufwand und Detaillierungsgrad.

### 2.4.1 Ortsaufgelöste Prozessmodelle

In der Verfahrenstechnik werden zeit- und ortsabhängige Systeme als *distributed parameter systems* (DPS) bezeichnet. Eine mathematische Beschreibung über orts- und zeitabhängige Feldgrößen (Kontinuum) führt zu Systemen von gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Die Lösung dieser Gleichungssysteme erfolgt mit CFD/FEM Methoden, wobei oft kommerzielle Softwarewerkzeuge eingesetzt werden können. In Sinne von [1] sind viele CFD/FEM-Modelle zum Zeitpunkt der ersten Publikation zunächst *singulär*.

### 2.4.2 Zonen basierte Prozessmodelle

Die Zonen basierte Prozessmodellierung versucht durch Vereinfachung in der Modellbildungsphase ein Prozessmodell zu gewinnen, welches die wesentlichen Eigenschaften des Prozesses möglichst effizient wiedergibt. Diese Königsdisziplin der Prozessmodellierung wird in der Regel für den industriellen Einsatz verwendet.

## 2.5 Parameteridentifikation und Schätzung

Mathematisch formuliert liefert ein Prozessmodell  $M$  die abhängigen Variablen  $y_j(t)$  als Funktion der unabhängigen Variablen  $x_i(t)$  und Parameter  $p_k$ :

$$\{y_j(t)\} = M(\{x_i(t)\}, \{p_k\}) \quad (4)$$

Zu jedem Einsatzfall (case, Laufindex  $l$ )  $\{x_i(t)\}_l$  gehört eine Menge von Messdaten  $\{y_j(t_m)\}_l$ . Die Menge der  $\{x_i(t), y_j(t_m)\}_l$  bildet die Menge der experimentellen Datensätze mit den Messzeitpunkten  $t_m$ .

Im allgemeinsten Fall sind nur diese Datensätze bekannt und es soll dasjenige Modell gefunden werden, welches diese Messdaten optimal abbildet, die *Modellstrukturbestimmung*. Dazu werden in der Regel Modellkandidaten ausgewählt und die zu schätzenden Parameter identifiziert. Für jeden dieser Modellkandidaten ist dann die Menge der Modellparameter  $\{p_k\}$  zu schätzen. Dieser Vorgang wird als *Modellkalibrierung* bezeichnet. Eine Parameterschätzung  $\{\hat{p}_k\}$  minimiert die Abweichung zwischen den Modellvorhersagen  $\{y_j\}_l^M$  und den Messdaten  $\{y_j(t_m)\}_l$ . Es handelt sich um ein nicht-triviales Regressionsproblem, das mit gängigen Optimierungsverfahren gelöst werden kann. Analog lassen sich weitere Aufgabenstellungen auf Optimierungsprobleme zurückführen (inverse Modellierung, siehe Abschnitt 3).

## 3 Beispiel Kühlstrecke

An Hand dieses Beispiels soll das Zusammenspiel von Modellierung, Laborexperimenten und Anwendungsorientierung demonstriert werden. Als Prozess wurde eine Bandkühlstrecke mit Spritzkühlung ausgewählt: Nach dem Warmwalzen ist ein Metallband definiert abzukühlen. Mit derartigen maßgeschneiderten Abkühlprozessen können Legierungsmittel eingespart werden („Legierungselement Wasser“). Es wird demonstriert, dass es möglich ist, die optimale Gestaltung des Abkühlprozesses bei der Spritzkühlung vorab rechnerisch zu bestimmen.

### 3.1 Problemstellung

Das in *Abb. 2* skizzierte Schema verdeutlicht die Funktion und die wesentlichen Parameter des kontinuierlichen Abkühlprozesses: Ein Material der Dicke  $d$  läuft mit der Einlauftemperatur

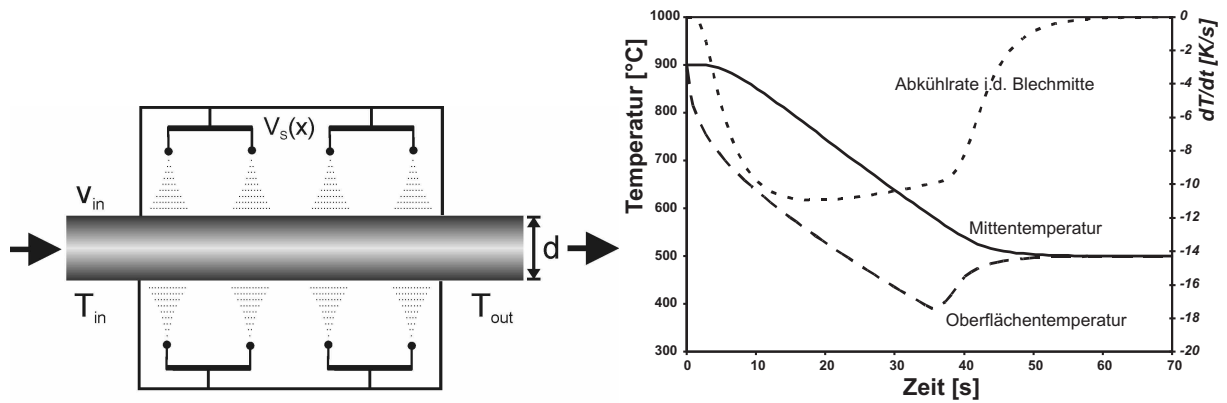


Abb. 2: Schema einer Bandkühlstrecke und Abkühlkurve für ein beidseitig gekühltes 30mm Stahlblech [3].

$T_{in}$  in die Kühlstrecke ein und verlässt diese mit einer (näherungsweise) homogenen Auslauftemperatur  $T_{out}$ . Die letztere Annahme setzt für den Fall größerer Dicken  $d$  voraus, dass dem Material nach der aktiven Kühlung ein Temperaturengleich ohne weitere Abkühlung von außen ermöglicht wird (*self tempering*).

Das Material lässt sich näherungsweise durch seine Dichte  $\rho$ , eine mittlere spezifische Wärmekapazität  $c_p$  und eine mittlere Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  charakterisieren. Der Wärmeübergang vom Material an das Kühlmedium (Wasser) sei charakterisiert durch den lokalen Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$ , der über  $q = \alpha \cdot \Delta T$  definiert ist.  $q$  sei der Wärmestrom weg von der Oberfläche des Materials und  $\Delta T = T_S - T_W$  die Differenz zwischen der lokalen Oberflächentemperatur  $T_S$  und der Wassertemperatur  $T_W$ . In der Regel ist  $\alpha$  eine Funktion der Kühltechnikparameter und der lokalen Oberflächentemperatur.

Im ortsfesten Koordinatensystem (*Euler-Bild*) liefert die Kühlstrecke einen ortsabhängigen Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha(x)$ . Dabei ist  $q(x)$  durch eine Wasserbeaufschlagungsdichte  $V_S(x)$  und eine Oberflächentemperaturverteilung  $T_S(x)$  determiniert.  $V_S(x)$  wird wiederum durch Art, Position und Betriebsparameter der einzelnen Spritzdüsen erzeugt. Im stationären Betrieb wird die Kühlstrecke durch die Parameter

$$p_k = \{T_{in}, v_{in}, d, \rho, \lambda, c_p, V_S(x)\} \quad (5)$$

bestimmt.  $V_S(x)$  sollte mit möglichst wenigen Parametern charakterisiert werden können. Im stationären Betrieb ergibt sich nur die messbare Ausgangsgröße  $y_j = \{T_{out}\}$ , die zudem zeitunabhängig ist.

Dieses Beispiel zeigt, wie bereits in der Definitionsphase eines Prozessmodells Annahmen und Vereinfachungen gemacht werden. Dies vermindert die Anzahl der Ein- und Ausgänge, unter Umständen auf Kosten der Allgemeingültigkeit. Es ist dabei oft sinnvoll, zunächst nur diejenigen Details eines Prozesses zu berücksichtigen, die praktisch oder physikalisch hoch relevant sind. Eine spätere Verfeinerung ist immer einfacher als auf Anhieb ein hoch komplexes Modell realisieren zu wollen. Können – wie in diesem Beispiel – die Modellierziele nur mit einem Metamodell erreicht werden, so ist dieses ebenfalls zu definieren und zu diskutieren.

### 3.2 Physikalische Aufgabenstellung

Die Lösung der *physikalischen Aufgabenstellung*, der Verlauf der Funktion  $T(z, t)$  ist in Abb. 2 dargestellt und kann zum Beispiel durch die Auslauftemperatur  $T_{out}$ , die mittlere Abkühlrate

in Blechmitte  $CR$ , deren Variation  $\Delta CR$  und die minimale Temperatur an der Blechoberfläche  $T_{S,\text{Min}}$  charakterisiert werden, Details finden sich in [1].

Die Aufgabenstellung des physikalischen Prozessmodelles ist somit die Berechnung von  $T(z, t)$  durch Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}T(z, t) = a \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2}T(z, t) \quad (6)$$

mit der Temperaturleitfähigkeit  $a = \lambda/(\rho c_p)$  und den Neumannschen Randbedingungen  $q = 0$  in der Blechmitte ( $z = 0$ ) und

$$q = \lambda \nabla T = \alpha(V_S, \Delta T) \cdot \Delta T \quad (7)$$

an der Blechoberfläche ( $z = d/2$ ). Durch die Funktion  $\alpha(V_S, \Delta T)$  mit der variierenden Temperaturdifferenz  $\Delta T$  werden die Parameter der Kühltechnik eingestellt. Für die Spritzkühlung findet sich der Stand der Technik und die Labormessung dieser Funktion in [1, 4, 5, 6, 7, 8].

### 3.3 Betriebliche Aufgabenstellung

Verglichen mit der im vorangegangenen Abschnitt behandelten direkten physikalischen Aufgabenstellung, ist die *betriebliche Aufgabenstellung* eine andere: Hier muss die Kühlstrecke so dimensioniert werden, das alle Kühlaufgaben möglichst optimal ausgeführt werden können. Die optimale Erfüllung einer einzelnen Kühlaufgabe besteht aus der Realisierung einer – für diese Kühlaufgabe – optimalen Wasserbeaufschlagungsdichte  $V_S(x)$ . Daher lässt sich eine derartige Spritzkühlstrecke aus einzeln ansteuerbaren und gegebenenfalls auch verfahrbaren Düsen mit möglichst großem Regelbereich realisieren. Die notwendige Gesamtlänge der Kühlstrecke ergibt sich aus der Menge der zu realisierenden  $\{v_{\text{in}}, CR, d\}$ .

Für jede Kühlaufgabe ist die jeweils optimale Wasserbeaufschlagungsdichte  $V_S(x)$  zu berechnen und einzustellen (für die Düsen gilt ein Superpositionsprinzip). Damit ergeben sich für das Meta-Prozessmodell zur Lösung der betrieblichen Aufgabenstellung folgende Teilaufgaben:

1. Berechne für einen vorgegebenen Parametersatz  $p_k = \{v_{\text{in}}, d, \lambda, c_p, T_{\text{in}}, T_{\text{out}}, CR, T_{S,\text{Min}}\}$  eine Funktion  $V_S(x)$ , mit der die vorgegebene Auslauftemperatur und die vorgegebene mittlere Abkühlrate erreicht wird, ohne eine minimale Oberflächentemperatur zu unterschreiten, alles bei minimaler Variation der Abkühlrate  $\Delta CR$ . Diese Aufgabe definiert ein Prozessmodell, welches hier als invers bezeichnet wird, da es die Lösung von (6) zur Lösung eines Optimierungsproblems heranzieht.
2. Berechne die Düsenpositionen und Betriebsparameter um  $V_S(x)$  zu realisieren.

Das physikalische Prozessmodell berechnet aus den Eingängen  $v_{\text{in}}, d, \lambda, c_p, T_{\text{in}}$  und  $V_S(x)$  den Temperaturverlauf in der Kühlstrecke und daraus die Ausgangswerte  $T_{\text{out}}, CR, \Delta CR$  und  $T_{S,\text{Min}}$ . Die Kühlstreckenparameter werden hier zunächst über die Funktion  $V_S(x)$  festgelegt, der nach (7) eine Verteilung des Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha(x)$  entspricht. Diese ist mit möglichst wenigen Parametern darzustellen. Aus der Sicht des betrieblichen Prozessmodells ist  $V_S(x)$  somit ein Modellausgang und  $T_{\text{out}}, CR$  und  $T_{S,\text{Min}}$  gehören zu den Modelleingängen.

### 3.4 Prozessmodell

Mit der Wasserbeaufschlagungsdichte und der Fit-Funktion für  $\alpha(V_S, \Delta T)$  wird der Wärmeübergangskoeffizient an der Oberfläche ermittelt, das heißt eine Randbedingung der Fourierschen Differentialgleichung (6). Diese wird numerisch gelöst. Das Ergebnis sind die Abkühlkurven  $T(z, t)$  (siehe zum Beispiel *Abb. 2*). Deren Verlauf wird über  $CR$  und  $\Delta CR$  quantifiziert. Somit löst das Prozessmodell die physikalische Aufgabenstellung. Eine interaktive Schnittstelle findet sich unter [prmc.de](http://prmc.de).

### 3.5 Inverses Prozessmodell

Für die betriebliche Aufgabenstellung ist ein inverses Problem zu lösen. Gesucht sind die Randbedingungen an der Oberfläche, die zu dem gewünschten Temperaturverlauf im Material führen – im Rahmen des physikalisch Möglichen. Als Parameter dienen die gewünschte Auslauftemperatur  $T_{\text{out}}$  und  $CR$  und  $\Delta CR$ . Hinzu kommt die minimal erlaubte Oberflächentemperatur  $T_{S,\text{Min}}$ .

Es sind nun die Verlaufparameter der Wärmeübergangsfunktion  $\alpha(x)$  derart zu bestimmen, dass der zugehörige  $T(z, t)$ -Verlauf die Zielgrößen  $T_{\text{out}}$ ,  $CR$  und  $T_{S,\text{Min}}$  genau trifft und dabei  $\Delta CR$  minimiert. Aus dieser Funktion  $\alpha(x)$  ist dann die Funktion  $V_S(x)$  mittels numerischer Invertierung von  $\alpha(V_S, T_S)$  zu berechnen. Für jeden  $\alpha(x)$ -Verlauf wird das physikalische Prozessmodell gelöst und aus der  $T(z, t)$ -Funktion die Größen  $T_{\text{out}}$ ,  $CR$ ,  $\Delta CR$  und  $T_{S,\text{Min}}$  berechnet. Ein Optimierungsalgorithmus variiert nun  $\alpha(x)$  so lange, bis die Zielgrößen getroffen werden. Aus  $\alpha(x)$  wird dann mittels einer impliziten Gleichung die optimale Wasserbeaufschlagungsdichte  $V_S(x)$  berechnet.

Zur optimalen Abkühlung von 30 mm dickem Grobblech mit 10 K/s in der Blechmitte ist somit bei einer Durchlaufgeschwindigkeit von 1 m/s eine 40 m lange Kühlstrecke mit einer zunächst leicht steigenden und dann fallenden Wasserbeaufschlagungsdichte von ca. 12 kg/(m<sup>2</sup>s) erforderlich. Zu diesem inversen Prozessmodell findet sich ebenfalls unter [prmc.de](http://prmc.de) eine interaktive Schnittstelle.

### 3.6 Optimale Anlagenauslegung

Die optimale Auslegung einer Kühlstrecke hängt von der Menge der zu optimierenden Parametertupel  $p_k$  (bezogen auf das betriebliche Prozessmodell) ab. Für diese können vorab optimale Verläufe des Wärmeüberganges berechnet werden. Die Abkühlgeschwindigkeit kann hier – wie in *Abb. 3* – als Parameter betrachtet werden. Die Auslegungsparameter Anlagenlänge, Düsenzahl, Verfahrbereich und Regelbereich lassen sich für eine dann Kühlstrecke derart festlegen, dass alle Kühlaufgaben möglichst optimal erfüllt werden können.

### 3.7 Fazit und Diskussion

Am Beispiel einer Durchlaufkühlstrecke mit Spritzkühlung wurden wesentlichen Punkte der Prozessmodellierung veranschaulicht:

- Wenn sich nicht alle Details vorausberechnen lassen, führt eine Unterteilung in berechenbare und im Labor experimentell beherrschbare Teilsysteme zum Ziel.
- Ein physikalisch fundiertes Prozessmodell ist dem rein regelungstechnischen Ansatz überlegen.

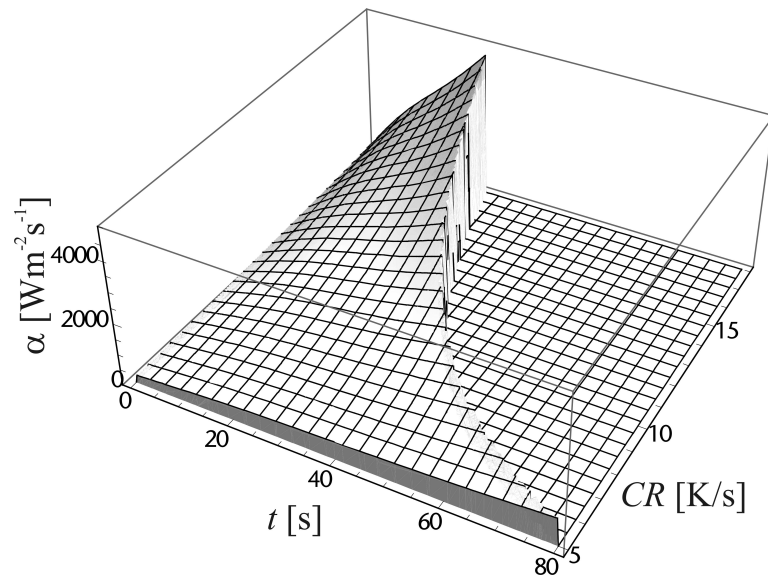


Abb. 3: Wärmeübergangsfunktion  $\alpha(t)$  für 30 mm dickes Blech abgekühlt mit der Rate  $CR$  von 900 auf 500°C ( $CR > 18$  K/s ist hier physikalisch nicht möglich) [3].

- Physikalische Modelle liefern Aussagen in Kausalitätsrichtung – welche Wirkung hat eine bestimmte Ursache? Betriebliche Fragestellungen erfordern in der Regel deren Invertierung – wie ist eine Ursache zu gestalten um eine bestimmte Wirkung zu erzielen?

## 4 Beispiel Schalenbildung beim Stranggießen von Stahl

Orts- und zeitaufgelöste Prozessmodelle ermöglichen eine detaillierte Simulation, ohne das die Relevanz der auftretenden Phänomene vorab bekannt ist. Der Preis ist in der Regel ein hoher Rechenaufwand. Dieser kann über alle Grenzen wachsen, wenn Phänomene auf stark unterschiedlichen Raum- und Zeitskalen berücksichtigt werden müssen. Gerade bei der Simulation von Phänomenen, die auf Selbstorganisationsprozessen beruhen, kann hier eine iterative Kopplung Abhilfe schaffen [9]. Im folgenden Beispiel wurde dazu ein heuristisches Modell des Wärmeüberganges in eine FEM-Simulation integriert [10].

Mit diesem Beispiel soll demonstriert werden, das auch für ein rechenaufwendiges orts- und zeitaufgelöstes Prozessmodell eines hochkomplexen industriellen Schlüsselprozesses eine vollständige lokale Sensitivitätsanalyse durchführbar ist.

Das verwendete Modell (siehe [10] und [1] für eine detaillierte Einführung in die Thematik) zeigt zudem, das sich Rechnungen auf der Basis kommerzieller Simulationsumgebungen auch automatisieren lassen.

### 4.1 Problemstellung und Prozessmodell

Simuliert wird die Strangschalenbildung in der Primärkühlzone, der Kokille. Dieser Prozess kann durch äußere Parameter nur indirekt beeinflusst werden. Die Ausbildung einer festen Strangschale beginnt in der Meniskusebene und wird dort durch die Strömungs- und Wärmeabfuhrbedingungen im flüssigen Stahl und der Gießschlacke bestimmt. Die Triebkraft der Strangschalenbildung in der Kokille ist die lokale Wärmestromdichte für die keine direkte externe Stellschraube existiert, die jedoch gemessen werden kann.



Das hier verwendete Modell [10] modelliert nicht den gesamten Strang, sondern eine im Laufe der Simulation erstarrende Scheibe. Dabei wird die Gießtemperatur  $T_{\text{cast}}$  als Temperaturrandbedingung verwendet. Im Rechengebiet Strangschale werden Kräfte und Energieflüsse bilanziert, das komplexe Materialverhalten wurde unter Verwendung der Datenbank TCFE6 berücksichtigt.

## 4.2 Sensitivitätsanalyse des FEM-Modelles

Die nach Gleichung (3) normierte lokale Sensitivität – als Differenzenquotient – wurde für zwei typische Anwendungsfälle des Modelles berechnet, Knüppelstränge und Brammen [10].

Die Untersuchung der *Sensitivität bezüglich der numerischen Parameter* ergab keine signifikanten Einflüsse auf die experimentell überprüfbareren Modelliererergebnisse.

Die berechneten *Sensitivitäten bezüglich der Prozessparameter* ergab folgendes Bild: Die maximale Wärmestromdichte  $q_{\text{max}}$  findet sich immer im Bereich des Meniskus und ihr Wert reagiert empfindlich auf die Temperaturrandbedingung für den flüssigen Stahl an der Innenseite des Rechengebietes. Erhöht sich diese Gießtemperatur um 1% (18K), so wird  $q_{\text{max}}$  sich um bis zu 1.5% erhöhen, die durchschnittliche Wärmestromdichte wird sich um mindestens 5% erhöhen, was in einer um bis zu 10% verringerten Strangschalendicke resultiert. Eine signifikante Erhöhung des integralen Wärmestroms in Richtung Kokille erscheint auf der Basis dieser Ergebnisse nicht möglich.

Ferner wurden die *Sensitivitäten bezüglich der externen Parameter* (nicht am Prozess einstellbare Eingangsgrößen) untersucht. Dazu gehört die vergossene Stahlgüte ebenso wie die Eigenschaften des Gießpulvers oder Modell spezifische Parameter wie die anfängliche Dicke der Schlackenschicht  $d_{\text{slag}}$  in der Meniskusebene. Die praktisch oft versuchte Prozessbeeinflussung über die Zusammensetzung des Gießpulvers spiegelt sich in den Sensitivitäten der Gießpulvereigenschaften wieder. Der (maximale) Wärmestrom in der Meniskusebene lässt sich durch eine Heraufsetzung der Solidustemperatur des Gießpulvers verringern, eine höhere Liquidustemperatur verringert auch die mittlere Wärmestromdichte. So ergibt sich eine mildere Kühlung und ein langsames Schalenwachstum.

## 4.3 Fazit und kritische Diskussion

Die Sensitivitätsanalyse ergab folgende Parameterreihung:

1. Die Gießtemperatur ist mit Sensitivitäten bis zu 2800% der wichtigste Stellparameter.
2. Die Liquidustemperatur der Gießschlacke beeinflusst mit Sensitivitäten von bis zu 250% besonders die Wärmestromdichte unterhalb des Meniskusbereiches.
3. Die Solidustemperatur der Gießschlacke beeinflusst mit Sensitivitäten von bis zu 280% besonders die Wärmestromdichte im Meniskusbereich.
4. Die Dicke der anfänglichen Schlackenschicht im Meniskusbereich und die Wärmeleitfähigkeit der flüssigen Gießschlacke beeinflusst die dort auftretende maximale Wärmestromdichte.
5. Die Gießgeschwindigkeit beeinflusst die Wärmestromdichte im unteren Bereich der Kokille und damit die Strangschalendicke am Kokillenaustritt signifikant.
6. Der Einfluss der Kokillenkonzentrationen ist signifikant und es ist somit sinnvoll, die jeweils optimale Konzentration zu ermitteln und einzustellen.

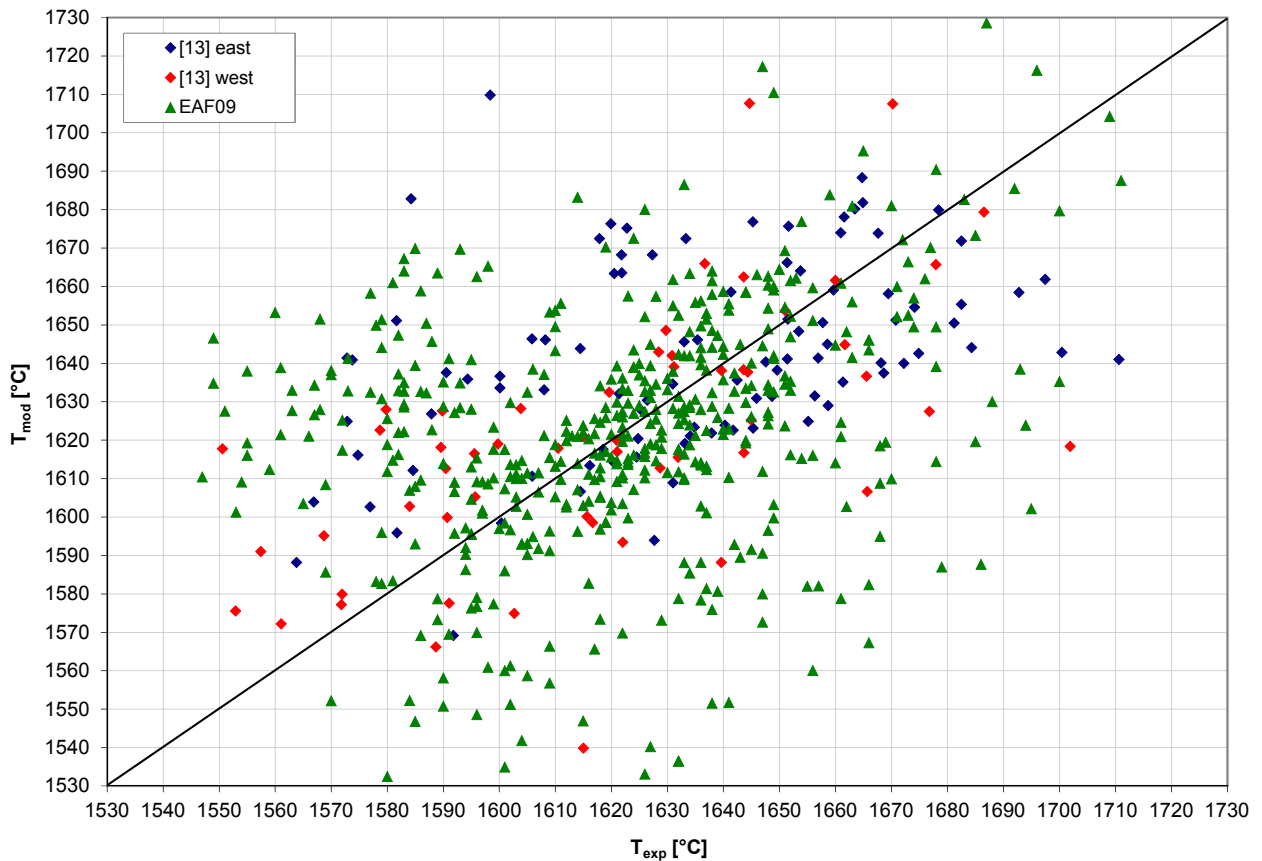


Abb. 4: Ergebniss der Parametrierung von Prozessmodellen ([1], siehe Text).

Ein wesentliches Ergebnis der Sensitivitätsanalyse, die hohe Bedeutung der Gießtemperatur, lässt sich durch folgende Überlegung illustrieren: Um eine Erhöhung der Gießtemperatur um 20K dahingehend zu kompensieren, dass die Schalendicke am Kokillenausgang konstant bleibt, wäre es theoretisch erforderlich die Gießgeschwindigkeit um 20% (Knüppel) beziehungsweise 34% (Bramme) zu verringern.

## 5 Beispiel Elektrostahlerzeugung

In diesem Beispiel soll es um die in der Praxis auftretenden Schwierigkeiten bei der Modellparametrierung gehen. Dazu beschäftigen wir uns mit dem Ausgangspunkt der Elektrostahlerzeugung, dem Einschmelzen von Schrott und anderen Eisenträgern im Elektrolichtbogenofen (EAF) [11, 12].

Zur Parameteridentifikation bei EAF Prozessmodellen lag kein explizites Schrifttum vor. In [13] findet sich jedoch eine grafische Darstellung der Modellvorhersagen an einem dualen-AC-Ofen. Diese Daten sind auch in *Abb. 4* dargestellt. Die 153 Messwerte aus [13] (beide Ofengefäße) zeigen betragsmäßig eine mittlere Abweichung zwischen Modell und Experiment von 19 (Median *west shell*) bis 27 (Mittelwert, *east shell*) Kelvin. Damit ist das Modell circa 10 K *besser* als das triviale Modell, der Mittelwert aller Messwerte (*east*:  $1635 \pm 34^\circ\text{C}$ , *west*:  $1620 \pm 36^\circ\text{C}$ ).

Mit Hilfe umfangreicher Betriebsdaten von einem Gleichstrom-EAF [14] wurde mit einem eigenen Modell (EAF09, eine Verbesserung von EAF08 [12]) ebenfalls eine Parametrierung

versucht. Diese scheiterte jedoch an den fehlenden Messungen der Sumpfmengen. Im Gegensatz zu Wechselstromöfen benötigen Gleichstromöfen zur verschleißarmen Stromabfuhr über die im Gefäß verbaute Anode eine gewisse Restmenge an Schmelze (Sumpf). Die Betriebsdaten wiesen auf eine Fahrweise hin, die zu stark variierenden Sumpfmengen führt. Die Sensitivität der Schmelzentemperatur bezüglich der Sumpfmenge ist jedoch so groß, dass die anderen Parameter nicht ohne weiteres ermittelt werden können. Unter Annahme einer Sumpfmenge von 10t und dem Ausschluß von 10% der mit diesem Wert am schlechtesten berechenbaren Schmelzen ergibt sich zunächst eine Fit-Qualität von 30...40K für 651 Datensätze (Schmelzen). Werden davon 256 Datensätze ausgewählt und die Sumpfmenge mit optimiert (Ergebnis 10.5t), so ergibt sich eine Abweichung von 18 (Median) bis 28 (Mittelwert) K, wiederum etwas besser als das triviale Modell ( $T = 1622 \pm 31^\circ\text{C}$ ). Das in *Abb. 4* dargestellte Streubild ähnelt demjenigen aus [13].

Es sollte davon ausgegangen werden, dass zur Parametrierung eines EAF Prozessmodells umfangreiche Messkampagnen durchgeführt werden müssen, wobei auch die Sumpfmengen, die Schlackenmengen und die Abgasmessungen erforderlich sind. Die Messung der Modellqualität sollten auch Daten herangezogen werden, die die Fähigkeit des Modells zur Beschreibung von Abweichungen vom Normalbetrieb quantifizieren, ansonsten wird eher die Konstanz der Ofenfahrweise qualifiziert.

## 6 Zusammenfassung

Als *wesentliche Gesichtspunkte* der Prozessmodellierung [1] seien genannt:

- Prozessmodelle benötigen eine klare Aufgabenstellung und eine offene Schnittstelle [2].
- Eine wichtige Voraussetzung sind wissenschaftlich fundierte Labordaten.
- Eine zielgerichtete Prozessmodellierung verknüpft Labormessungen, mathematische Modellierung und die Lösung praktisch relevanter Fragestellungen mittels der inversen Modellierung (prmc und [3]).
- Sensitivitätsanalysen sind immer möglich und sinnvoll.
- Zonenmodelle liefern im Online-Betrieb nicht messbare Daten oder verbessern die Prozessregelung [11]. Ihre Parametrierung mit Hilfe von Betriebsdaten ist *mission critical*.
- Prozessmodelle können den *missing link* zwischen Wissenschaft und Anwendung darstellen.

Unter dem Aspekt eines nachhaltigen Umganges mit allen Ressourcen ist es zudem eine hoheitliche Aufgabe, die Rahmenbedingungen für die Produktion von Grundstoffen so zu setzen, dass nicht nur deren Preis minimiert wird. Derartige Vorgaben müssen sich jedoch an den Naturgesetzen und der besten verfügbaren Technologie orientieren. Prozessmodelle können hier für Mehrzieloptimierungen eingesetzt werden und stellen daher eine Schlüsseltechnologie dar. Diese Arbeit und [1] sollen dazu dienen, angehenden Prozessmodellierern den Einstieg in die wissenschaftliche Beschäftigung mit einem konkreten Prozess und dessen Modellierung zu erleichtern.

## Literatur

- [1] J Wendelstorf. Prozessmodellierung in der Hochtemperaturverfahrenstechnik. IMET, TU Clausthal, Jan. 2015.
- [2] J Wendelstorf. Metallurgical Process Modelling. In A Ludwig, editor, *SteelSim 2007, Austria*, pages 433–438, 2007.
- [3] J Wendelstorf, K H Spitzer, and R Wendelstorf. Spray Cooling Heat Transfer and Calculation of Water Impact Density for Cooling of Steel Sheet Materials by Inverse Process Modelling. *Steel Res. Int.*, 80(9):639–644, 2009.
- [4] R Viscorova, R Scholz, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Measurements of spray water cooling heat transfer coefficients under oxide scale formation conditions. In *AISTech 2006, USA*, volume II, pages 519–528, 2006.
- [5] R Viscorova, R Scholz, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Spray water cooling heat transfer under oxide scale formation conditions. In B Sundén and C A Brebbia, editors, *Advanced Computational Methods in Heat Transfer IX*, volume 53, pages 163–172. WIT Press, 2006.
- [6] R Viscorova. Untersuchung des Wärmeübergangs bei der Spritzwasserkühlung unter Berücksichtigung des Einflusses der Verzunderung. Dissertation, TU Clausthal, Jan. 2007.
- [7] J Wendelstorf, K H Spitzer, and R Wendelstorf. Spray water cooling heat transfer at high temperatures and liquid mass fluxes. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 51(19-20):4902–4910, 2008.
- [8] R Wendelstorf, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Effect of oxide layers on spray water cooling heat transfer at high surface temperatures. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 51(19-20):4892–4901, 2008.
- [9] J Wendelstorf. Ab initio modelling of thermal plasma gas discharges. Dissertation, TU Braunschweig, Dez. 2000.
- [10] J Wendelstorf. Sensitivity Analysis of a Thermo Mechanical Process Model for Shell Formation in Continuous Casting. In *METEC, 27.06.2011-01.07.2011*, Proc. STEELSIM 2011, Düsseldorf, 2011. (Paper 93).
- [11] K H Spitzer and J Wendelstorf. A process model for EAF steelmaking. In *AISTech 2006, USA*, volume 2 of *Iron & Steel Technology Conference Proceedings*, pages 435–443, 2006.
- [12] J Wendelstorf. Analysis of the EAF operation by process modelling. *Archives of Metallurgy and Materials (Poland)*, 53(2):385–390, 2008.
- [13] C Ojeda, J C Baumert, M Picco, J C Thibaut, S Sun, S Waterfall, M Ranger, M Lowry, and P Nyssen. Implementation and on-line use of a dynamic process model at the ArcelorMittal-Dofasco Electric Arc Furnace. In *Proceedings STEELSIM 2011*, number Paper 27, Düsseldorf, Juni 2011.
- [14] M Akdesir. Dynamische Prozessmodellierung des Elektrolichtbogenofens. Diplomarbeit, TU Clausthal, Dez. 2008.