

Modelowanie procesu mieszania kąpieli metalowej w oparciu o teorię reaktorów elementarnych

I. Część teoretyczna

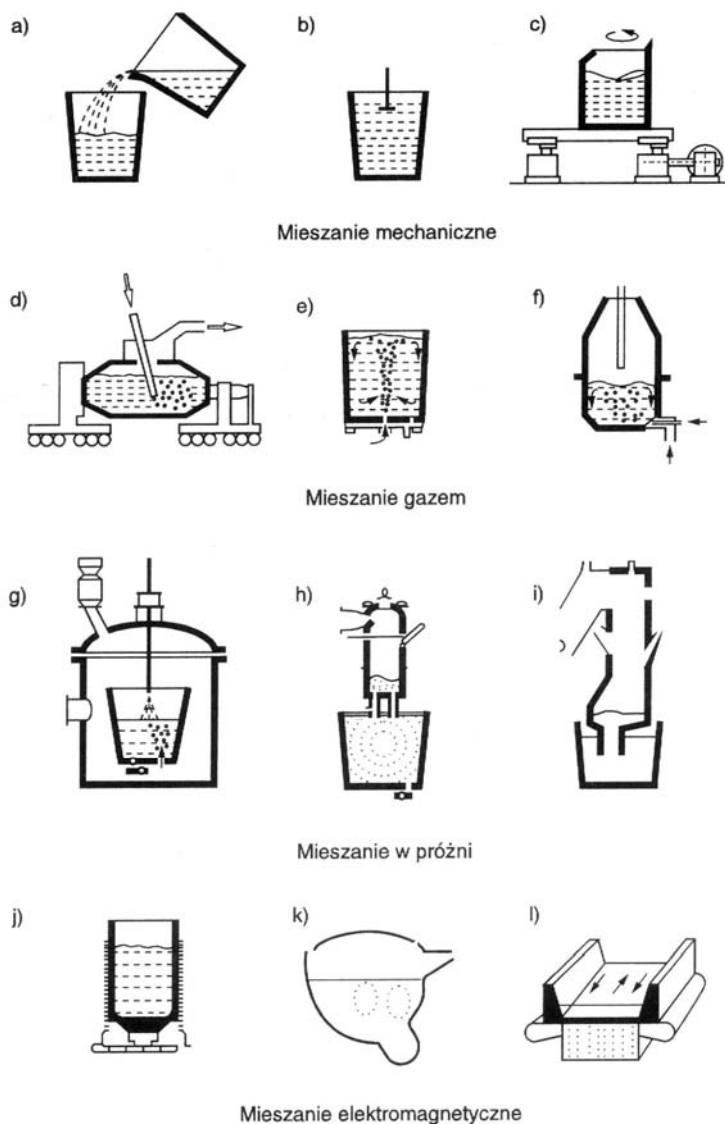
Sposoby matematycznego opisu mieszania kąpieli metalowej

Problem homogenizacji składu chemicznego i temperatury kąpieli metalowej odgrywa w procesach stalowniczych bardzo istotną rolę. Potwierdzają tę hipotezę zarówno doświadczenia praktyki przemysłowej, jak i teoretyczne rozważania dotyczące czynników limitujących szybkość zachodzących w kąpieli reakcji chemicznych. Ze względu na fakt, iż większość z reakcji zachodzi na granicy faz metal-żużel, decydującym czynnikiem regulującym ich szybkość jest transport reagentów.

Zbadanie i matematyczny opis procesu mieszania kąpieli metalowej w reaktorach metalurgicznych ma dla problemu sterowania tymi procesami znaczenie podstawowe. O złożoności powyższego zagadnienia decyduje fakt, że na proces mieszania wpływ mają trzy jakościowo różne zjawiska – konwekcja, turbulencje i dyfuzja. Uwzględnienie wszystkich wymienionych elementów komplikuje rozważany problem, istotnie utrudniając możliwość uzyskania użytecznego opisu matematycznego. Nie bez znaczenia pozostaje również problem czasu obliczeń i potrzebna do tego celu moc obliczeniowa.

Problematyka zjawisk mieszania odgrywa w reaktorach metalurgicznych bardzo istotną rolę. Decydują one o stopniu homogenizacji kąpieli, która ma bezpośredni wpływ na przebieg zachodzących w reaktorze reakcji chemicznych. Tlenowe procesy konwertorowe, odgazowanie próżniowe DH i RH czy mieszanie argonem stali w kadzi to tylko przykłady procesów gdzie turbulentny ruch kąpieli jest warunkiem koniecznym do uzyskania pozytywnego wyniku prowadzonych operacji. Przykłady te wskazują jednocześnie, że motorem wymuszającym ruch kąpieli są różnie wytwarzane siły zewnętrzne. Dokonując przeglądu istniejących współcześnie procesów metalurgicznych można stwierdzić, że metody mieszania dają się sklasyfikować w cztery podstawowe grupy, rys. 1 [1]:

- mieszanie mechaniczne,
- mieszanie strumieniem gazu,
- mieszanie w próżni,
- mieszanie elektromagnetyczne.



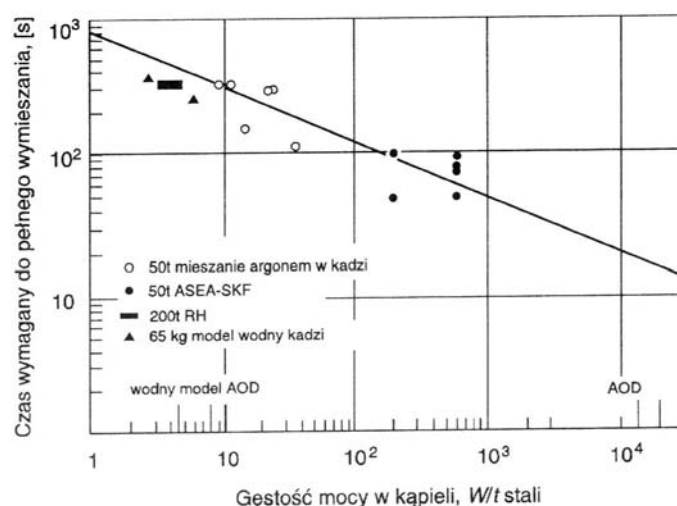
Rys. 1. Przykłady różnych metod mieszania kąpieli metalowej:

- | | |
|---|--|
| a) przelewanie z kadzi do kadzi, | g) urządzenie VOD, |
| b) mieszadło mechaniczne, | h) urządzenie RH, |
| c) stół wibracyjny, | i) urządzenie DH, |
| d) wdmuchiwanie gazu do kadzi torpeda, | j) piec indukcyjny, |
| e) przedmuchiwanie stali argonem w kadzi, | k) mieszalnik z mieszadłem magnetycznym, |
| f) konwertor z dmuchem kombinowanym, | l) rynna transportu magnetycznego. |

Celem wymuszonego czynnikiem zewnętrznym procesu mieszania jest najczęściej jeden lub kilka z wymienionych niżej punktów:

- homogenizacja składu chemicznego kąpieli,
- wyrównanie temperatury kąpieli,
- przyspieszenie szybkości przebiegu reakcji chemicznych,
- przyspieszenie roztapiania wprowadzonych do kąpieli dodatków,
- przyspieszenie procesu koalescencji wtrąceń.

Zwrócenie szczególnej uwagi na praktyczne znaczenie procesu mieszania stało się bezpośrednią przyczyną rozwinięcia badań tego zagadnienia. Pierwsze prace skoncentrowane zostały na wyznaczeniu czasu mieszania i badania wpływu różnych czynników na jego długość [2, 3, 4, 5]. Badania te wykazały m.in. logarytmiczną zależność długości czasu mieszania od gęstości mocy doprowadzonej do układu, rys. 2. Zaznaczone na przedstawionym wykresie punkty eksperymentalne odnoszą się zarówno do agregatów metalurgicznych oraz modeli laboratoryjnych i dlatego można postawić hipotezę, iż przedstawiona zależność ma charakter uniwersalny. Wyznaczenie czasu mieszania reaktora stanowi ważną informację ułatwiającą jego sterowanie lecz jest daleko niewystarczające na etapie konstruowania lub optymalizacji. Dążeniem aktualnie prowadzonych prac badawczych jest tworzenie modeli matematycznych umożliwiających dynamiczny opis strumienia kąpieli w całej objętości reaktora. Istnieją dwa sposoby rozwiązania postawionego problemu. Pierwszy z nich wykorzystuje przy rozwiązaniu równanie Naviera-Stokesa, a drugi teorię reaktorów elementarnych [6].



Rys. 2. Zależność czasu pełnego wymieszania kąpieli od gęstości mocy mieszania

Metoda oparta o równanie Naviera-Stokes'a

Modele typu recyrkulacyjnego rozwijane są na przestrzeni ostatnich lat bardzo intensywnie i różnią się one między sobą stosowanym układem odniesienia oraz rodzajem wprowadzonych założeń upraszczających. Modele oparte o siatkę Lagrange'a opisują trajektorię ruchu objętości elementarnej cieczy w czasie i przestrzeni. Modele oparte o siatkę Eulera opisują przepływ w określonym punkcie układu (najłatwiejszy opis jeśli przepływ jest stacjonarny, czyli niezmienny w czasie). Powyższe modele rozwijane są dalej w dwóch grupach jako modele dwufazowe lub modele quasi-jednofazowe. Te ostatnie znajdują

najczęściej zastosowanie w opisie zjawisk przepływu w metalurgii.

Metoda opisu zjawisk mieszania przy zastosowaniu równań Naviera-Stokesa posiada zarówno zalety i wady. Do niewątpliwych zalet zaliczyć należy możliwość uzyskania dokładnej "mapy" pól prędkości występujących w całej objętości badanego reaktora. "Mapy" te można następnie porównać z wynikami eksperymentalnymi uzyskiwanymi w modelach zimnych poprzez zastosowanie metody przekrojów świetlnych czy techniki pomiarów laserowych. Możliwość bezpośredniej weryfikacji na modelach fizycznych daje dobrą gwarancję dla poprawności oceny formułowanych w ten sposób modeli matematycznych. Do wad zaliczyć trzeba stopień skomplikowania stosowanego opisu matematycznego i dużą liczbę trudnych do wyznaczenia wielkości fizycznych, których znajomość jest niezbędna do realizacji obliczeń.

W reaktorach metalurgicznych obok fizycznej "mapy" pola prędkości elementarnych obszarów kąpieli bardzo istotną informacją jest rozkład stężeń reagentów biorących udział w reakcjach zachodzących w reaktorze. Zastosowanie w tym celu modeli opartych o równanie Naviera-Stokes'a obarczone jest również wspomnianą wadą w postaci złożonych wymogów na przygotowanie i przeprowadzenie obliczeń.

Matematyczny opis zmiany rozkładu stężeń w czasie dają modele innego typu, tzw. modele ze zdefiniowanymi podobszarami objętości (ang. *models of partial volumes* lub *tank models*)

Metoda oparta o teorię reaktorów elementarnych

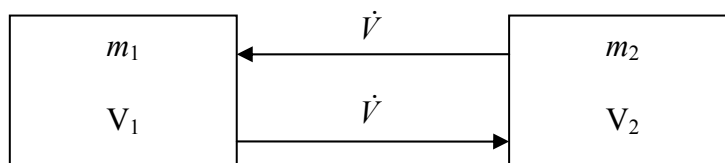
Istotą modeli ze zdefiniowanymi podobszarami objętości reaktora TM (*tank models*), jest przyjęcie założenia, iż możliwy jest podział reaktora na podobszary według kryterium wynikającego z quasi statycznego obrazu występujących w nim przepływów. Innymi słowy metoda ta polega na wydzieleniu tzw. reaktorów elementarnych, które są charakteryzowane przez rodzaj przepływu. Sposób wyboru liczby reaktorów nie jest poza nielicznymi wyjątkami ściśle określony i dlatego parametr ten można wykorzystać na etapie identyfikacji modelu w celu dopasowania charakterystyki modelu do charakterystyki otrzymanej z obiektu rzeczywistego.

Reaktorowi elementarnemu będącemu podstawową jednostką formułowanego modelu przypisano następujące własności:

- w każdej chwili czasu t w obrębie reaktora nie występuje gradient stężeń reagentów (idealne mieszanie),
- zdefiniowane są strumienie mas dopływających i wypływających z reaktora,

- zmiana stężeń reagentów w reaktorze następuje skokowo z częstotliwością wynikającą z przyjętego kroku czasowego obliczeń.

Najprostszym modelem typu TM jest układ izolowany od otoczenia składający się z dwóch reaktorów elementarnych. W literaturze znany jest pod nazwą *two tank model* (TTM) Schemat modelu TTM przedstawiono na rys 3.



Rys. 3. Schemat modelu TTM

gdzie: m_i - masa znacznika w reaktorze „i”, kg

V_i - objętość reaktora „i”, m^3

\dot{V} - objętościowy strumień wymiany masy między reaktorami elementarnymi, m^3/s

Przyjmując oznaczenia podane na rys. 3 można sformułować układ równań opisujących przepływ masy w podanym modelu w sposób następujący:

$$dm_1 = -\frac{m_1}{V_1} \dot{V} dt + \frac{m_2}{V_2} \dot{V} dt \quad (1)$$

$$dm_2 = \frac{m_1}{V_1} \dot{V} dt - \frac{m_2}{V_2} \dot{V} dt \quad (2)$$

$$m_1 + m_2 = m_0 \quad (3)$$

W zapisie powyższym przyjęto zgodnie z obowiązującą zasadą, że strumień masy wypływający z reaktora ma wartość ujemną a dopływający dodatnią. Przedstawiony układ ze względu na swoją prostotę można bez trudu rozwiązać analitycznie. Do rozwiązania przyjęto następujące warunki początkowe:

$$t = 0 \rightarrow m_1 = m_0 \quad (4)$$

$$m_2 = 0 \quad (5)$$

Fizycznie oznaczają one, iż w chwili $t = 0$ całkowita masa reagenta (znacznika) została wprowadzona do reaktora elementarnego nr I.

Przyjmując dalej oznaczenia:

$$c_0 = \frac{m_0}{V_1}, \quad c_1 = \frac{m_1}{V_1}, \quad c_\infty = \frac{m_0}{V_1 + V_2}, \quad c_2 = \frac{m_2}{V_2} \quad (6 \text{ a, b, c, d})$$

równanie (1) można przepisać w postaci:

$$dm_1 = -c_1 \dot{V} dt + \frac{m_0 - m_1}{V_2} \dot{V} dt \quad (7)$$

Dzieląc dalej (7) przez V_1 i porządkując składniki otrzymano :

$$dc_1 = -\dot{V} \left(\frac{c_1(V_1 + V_2) - m_0}{V_1 V_2} \right) dt \quad (8)$$

Wykorzystując zależność (6 c) oraz wprowadzając oznaczenie:

$$\dot{V} \left(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{V_2} \right) = k \quad (9)$$

sprowadzono równanie (1) do postaci:

$$\frac{dc_1}{c_1 - c_\infty} = -k dt \quad (10)$$

Całkując (10) w granicach odpowiednio od c_0 do $c_1(t)$ i od 0 do t otrzymano :

$$\ln \frac{c_1(t) - c_\infty}{c_0 - c_\infty} = -kt \quad (11)$$

Rozwiązanie dla reaktora elementarnego nr II przyjmuje następującą postać :

$$\frac{c_2}{c_\infty} = 1 - \exp(-kt) \quad (12)$$

Rozwiązanie analityczne bardziej skomplikowanych układów składających się z większej liczby różnorodnie połączonych reaktorów elementarnych jest dużo bardziej skomplikowane lub wręcz niemożliwe. Nie stanowi jednak problemu rozwiązanie powyższych układów metodami numerycznymi i dlatego w dalszej części pracy uwaga skoncentrowana zostanie na zastosowaniu metod różnicowych.

W celu uporządkowania prowadzonych dalej rozważań zaproponowano podział modeli typu TM na dwie grupy:

- modele TM zamknięte,
- modele TM otwarte.

Do pierwszej grupy zaliczono wszystkie te układy, w których nie zachodzi wymiana masy z otoczeniem. Grupa druga to układy, w których wymiana masy zachodzi i może prowadzić do ciągłej zmiany masy całkowitej układu.

Wpływ założeń matematycznych na jakość modeli typu TM

Z czysto formalnego punktu widzenia każdy model typu TM spełniający przedstawione kryteria daje jednoznaczne rozwiązanie, tj. określa w czasie przebieg zmian koncentracji składnika w poszczególnych reaktorach elementarnych. Należy zwrócić jednak uwagę, iż teoretycznie bardzo szerokie granice wartości parametrów modelu są zawężane analizą przeprowadzaną na gruncie fizyki. Pierwszy problem to liczba reaktorów elementarnych, na które można podzielić obiekt rzeczywisty. Teoretycznie liczba ta ma się zawierać w przedziale $(2, \infty)$. Istnieje jednak niebezpieczeństwo, iż brak analogii pomiędzy liczbą reaktorów elementarnych, a liczbą charakterystycznych obszarów obiektu rzeczywistego może doprowadzić do stworzenia modelu, którego struktura nie ma żadnego związku z opisywanym obiektem. Uzyskanie w takim wypadku formalnej zgodności pomiędzy charakterystykami rzeczywistymi i obliczeniami modelowymi nie ma wartości poznawczej. Istnieje przy tym niebezpieczeństwo, iż nawet mała zmiana warunków prowadzenia procesu może doprowadzić do dużych błędów obliczeń modelowych. Wynika stąd wniosek, że znajomość opisywanego obiektu ma w przypadku modelu TM niezwykle istotne znaczenie. Jeśli w początkowej fazie formułowania modelu uznać można, iż jest to dużym utrudnieniem, to w konsekwencji prowadzi jednak do uzyskania modelu, który bardzo dobrze oddaje przebieg procesu rzeczywistego. Ważne jest, iż model taki można stosować zarówno do bieżącego sterowania procesem jak również do poszukiwania optymalnych parametrów pracy urządzenia.

Drugim parametrem modelu TM, który decyduje o dopuszczeniu konkretnego modelu do zastosowań praktycznych jest macierz strumieni przepływów pomiędzy reaktorami elementarnymi. Zagadnienie to stanowi szeroki problem dla odrębnie prowadzonej analizy. Jako warunek brzegowy należy przyjąć, iż suma wartości strumieni wpływających z danego reaktora elementarnego przemnożona przez czasowy krok obliczeń nie może przekroczyć objętości tegoż reaktora. W przeciwnym wypadku obliczenia tracą sens fizyczny. Biorąc pod uwagę stabilność tworzonego modelu wskazane jest aby wspomniany wyżej iloczyn był istotnie mniejszy od objętości reaktora. Podanie w tym wypadku konkretnej wartości liczbowej dla ograniczenia tego iloczynu jest na obecnym etapie znajomości problemu dość trudne.

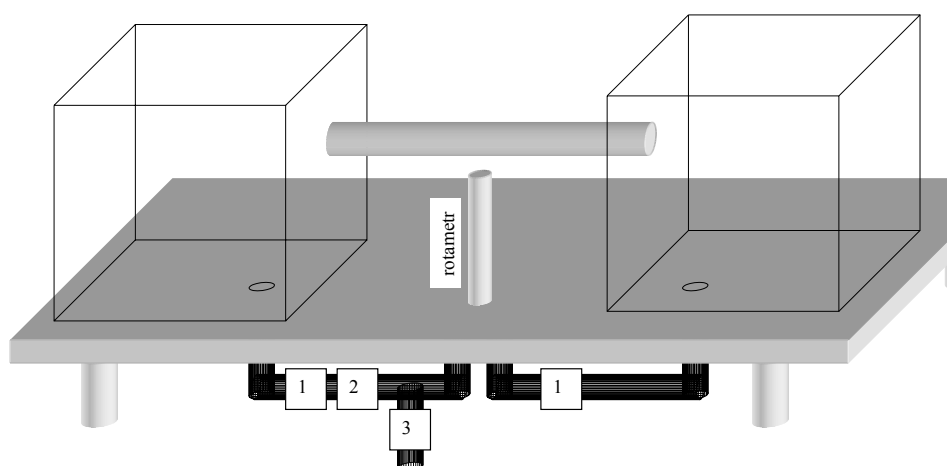
Kolejnym parametrem, który decyduje o jakości otrzymanego wyniku jest krok czasowy obliczeń. Jest sprawą oczywistą, iż wraz z dążeniem wartości kroku czasowego do zera rozwiązanie numeryczne powinno być zbieżne do rozwiązania dokładnego. W przypadku

symulacji procesów przepływu kąpieli w reaktorach metalurgicznych krok czasowy obliczeń waha się najczęściej w granicach od 0,1 do 5 s.

II. Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia jest określenie wpływu natężenia przepływu pomiędzy reaktorami o określonej objętości na czas uzyskania przez układ pełnej homogenizacji.

III. Stanowisko badawcze



Rys. 4. Schemat stanowiska laboratoryjnego TTM

1 – zawór regulacyjny 2 – pompa 3 – zawór odpływowy

IV. Przebieg ćwiczenia

Ćwiczenie polega na wykonaniu obliczeń w arkuszu kalkulacyjnym Excel dla modelu mieszania kąpieli w układzie izolowanym od otoczenia składającym się z „ n ” reaktorów elementarnych TM.

Warunkiem koniecznym do przeprowadzenia symulacji zgodnie z zaproponowanym modelem jest znajomość następujących wielkości:

- liczba reaktorów elementarnych n , [-];
- całkowity czas symulacji t_c , [s];
- krok czasowy obliczeń Δt , [s];
- wektor objętości reaktorów elementarnych $[V_1, V_2, \dots, V_n]$, [m^3];
- macierz objętościowego przepływu kąpieli z reaktora „ i ” do „ j ” $[\dot{V}_{ij}]$, [m^3/s];
- wektor mas początkowych reagenta w każdym z reaktorów elementarnych $[m_1, m_2, \dots, m_n]$, [kg].

Poszczególne wielkości określa każdorazowo prowadzący ćwiczenia.

W obliczeniach modelowych, przy ustalaniu wartości początkowych i brzegowych najistotniejsza rola przypada macierzy kwadratowej strumieni objętości $[\dot{V}_{ij}]_{n \times n}$ przedstawionej równaniem (13).

$$[\dot{V}_{ij}]_{n \times n} = \begin{bmatrix} 0 & \dot{V}_{12} & \dots & \dot{V}_{1n} \\ \dot{V}_{21} & 0 & \dots & \dot{V}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \dot{V}_{n1} & \dot{V}_{n2} & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

Każdy element macierzy $[\dot{V}_{ij}]_{n \times n}$ oznacza objętościowy przepływ kąpieli w m³/s z reaktora „i” do reaktora „j”. Z oczywistych względów macierz ta przyjmuje na głównej przekątnej wartości równe zero. W ogólnej postaci macierz ta nie jest symetryczna, to znaczy $\dot{V}_{ij} \neq \dot{V}_{ji}$, jednakże nie wszystkie wartości jej poszczególnych elementów są niezależne. Dla każdego reaktora „i” zawsze musi być spełniony następujący warunek.

$$\sum_{j=1}^n \dot{V}_{ij} = \sum_{j=1}^n \dot{V}_{ji} \quad (14)$$

Zmiana masy badanego reagenta w dowolnym reaktorze elementarnym jest różnicą masy wpływającej do reaktora i wypływającej z niego.

$$dm_i = dm_i^{\text{wpływ}} - dm_i^{\text{wypływ}} \quad (15)$$

Sumę masy reagenta, która wypływa w czasie Δt do reaktora „i” wylicza się wg równania

$$dm_i^{\text{wpływ}} = \sum_{j=1}^n \frac{(\dot{V}_{ji} \cdot \Delta t \cdot m_j)}{V_j} \quad (16)$$

Sumę masy reagenta, która wpływa z reaktora „i” wylicza się według następującego równania

$$dm_i^{\text{wypływ}} = \sum_{j=1}^n \frac{(\dot{V}_{ij} \cdot \Delta t \cdot m_i)}{V_i} \quad (17)$$

Zmianę masy reagenta w reaktorze „i” w chwili $t + \Delta t$ wylicza się w oparciu o znajomość jego masy w chwili t oraz o znajomość $dm_i(t)$

$$m_i(t + \Delta t) = m_i(t) + dm_i(t) \quad (18)$$

Znając wartości początkowe $m_i(0)$ dla każdego reaktora elementarnego, procedura obliczeń przeprowadzana według schematu podanego wzorami od (15) do (18) pozwala

symulować proces dowolnie długo aż do uzyskania stanu równowagi.

W celu uzyskania możliwości porównywania wyników pomiaru otrzymanych np. przy różnej wartości początkowej masy znacznika, wprowadzono do modelu opcję standaryzującą otrzymane wyniki. Jeżeli M oznacza całkowitą masę reagenta w reaktorze przy założeniu idealnego wymieszania kąpieli, standaryzację przeprowadza się zawsze według wzoru

$$c_i = \frac{m_i}{V_i} \cdot \frac{V_c}{M} \quad (19)$$

gdzie:

V_c – całkowita objętość kąpieli w reaktorach elementarnych, m^3 ,

M – całkowita masa znacznika w reaktorach elementarnych, kg.

Reasumując można stwierdzić, iż w reaktorach zamkniętych stan równowagi osiągany jest zawsze przy uzyskaniu wartości stężenia równej 1.

V. Opracowanie wyników

1. Sporządzić wykres zależności standaryzowanej wartości stężenia znacznika w poszczególnych reaktorach od czasu symulacji.
2. Określić czas po którym stężenie znacznika wyrównało się we wszystkich reaktorach.
3. Określić wpływ natężenia przepływu na czas dojścia układu do stanu równowagi.
4. Przeprowadzić analizę wyników.

Literatura

- [1] F. Oeters, W. Pluschkell, E. Steinmetz, H. Wilhelmi: Fluid flow and mixing in secondary metallurgy, steel research 59, 1988, nr 5, s. 192/201
- [2] J. Mietz, F. Oeters: Model experiments on mixing phenomena in gas-stirred melts, steel research 59, 1988, nr 2, s. 52/59
- [3] S. C. Koria, K. Lange: Mixing-time correlation in top gas stirred melts, Arch. Eisenhüttenwes. 55, 1984, nr 3, s. 97/100
- [4] S. C. Koria, S. Pal: Experimental study of the effect of gas injection parameters on the bath mixing intensity induced during steelmaking, steel research 62, 1991, nr 2, s. 47/53
- [5] S.-H. Kim, R. J. Fruehan: Physical Modeling of Liquid/Liquid Mass Transfer in Gas Stirred Ladles, Metallurgical Transactions 18B, 1987, nr 6, s. 381/390
- [6] O. Levenspiel: Chemical Reaction Engineering John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sidney, Toronto, 1972