

高等学校规划教材
GAODENG XUEXIAO GUIHUA JIAOCAI

冶金过程 数值模拟基础

陈建斌 编著

```
Private Sub KLZY(A() As Double, B() As Double, K As Integer, EQN_Number As Integer)
    Dim I As Integer, J As Integer
    A_max = Abs(A(K, K)): Temp_L = K
    For I = K + 1 To EQN_Number
        If A_max < Abs(A(I, K)) Then A_max = Abs(A(I, K)): Temp_L = I
    Next I
    If Temp_L <> K Then
        For J = K To EQN_Number
            Temp = A(K, J)
            A(K, J) = A(Temp_L, J)
            A(Temp_L, J) = Temp
        Next J
        Temp = B(K)
        B(K) = B(Temp_L)
        B(Temp_L) = Temp
    Else
        If A_max = 0 Then
            Picture1.Print
            Exit Sub
        End If
    End If
End Sub
```



冶金工业出版社

<http://www.cnmp.com.cn>

要 容 内

高等学校规划教材

冶金过程数值模拟基础

陈建斌 编著

图 书 在 版 编 目 (CIP) 数 据

冶金过程数值模拟基础/陈建斌编著. —北京:冶金工业出版社, 2008.3

ISBN 978-7-302-44463-1

冶金工业出版社

ISBN 978-7-302-44463-1

I. 冶… II. 陈… III. 冶金-过程-数值模拟-高等学校-教材 IV. TP01

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第017252号

出版人 曹胜利

地址 北京河北大街高碑店北街39号 邮编 100003

电话 (010) 64027036 电子邮箱 postmaster@cnmip.com.cn

责任编辑 宋 勇 李林林 宋 勇 李林林 宋 勇 李林林

责任校对 王永庆 责任印制 丁小晶

ISBN 978-7-302-44463-1

北京兴华印刷厂印刷 冶金工业出版社发行 各地新华书店经销

2008年3月第1版 2008年3月第1次印刷

787mm×1092mm 1/16 14印张:372千字:213页:1-3000册

28.00元

北 京

冶金工业出版社

(本社印务部负责校对, 本厂负责印刷)

内 容 提 要

本书是关于冶金过程数值模拟的教材。全书主要包括数学模型方法基础、冶金过程热力学与动力学的数学模拟及冶金传输过程数值模拟三大部分。其中,冶金过程热力学部分主要介绍化学反应化学计量的矩阵表示、化学反应自由能和平衡常数的计算、平衡体系组成的计算等;动力学部分主要介绍气-固、气-液及液-液三大类型反应的过程动力学模拟方法,还介绍了反应体系耦合反应动力学模型;冶金传输过程数值模拟部分主要介绍传输过程数值模拟方法基础、导热问题的数值方法、对流与扩散问题的数值方法,以及流场计算简介。附录中列出了9个有关冶金过程中几个常见数学问题的数值方法计算程序、5个有关热力学和导热问题数值方法的计算程序和3个实用的VB小程序。

本书不仅注重冶金过程模拟方法的贯彻,而且对于较难理解的算法部分,给出较多例题,并力求通过“笔算”让读者了解有关算法的真正含义、方法和步骤,以便于读者读懂附录给出的相应的计算程序,并有助于读者在此基础上自行编写其他的计算程序。

本书可作为冶金工程专业本科生教材,也可供从事冶金工程的研究生和科技、工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

冶金过程数值模拟基础/陈建斌编著. —北京:冶金工业出版社,2008.3

高等学校规划教材

ISBN 978-7-5024-4463-1

I. 冶… II. 陈… III. 冶金-过程-数值模拟-高等学校-教材 IV. TF01

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 017557 号

出 版 人 曹胜利

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 postmaster@cnmip.com.cn

责任编辑 宋 良 李枝梅 美术编辑 李 心 版式设计 张 青

责任校对 王永欣 责任印制 丁小晶

ISBN 978-7-5024-4463-1

北京兴华印刷厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

2008 年 3 月第 1 版,2008 年 3 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16; 14 印张;372 千字;213 页;1-3000 册

28.00 元

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街 46 号(100711) 电话:(010)65289081

(本书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

前 言

随着以电子技术尤其是微电子技术为基础、计算机技术为核心、通信技术为支柱、信息应用技术为目标的现代信息技术的迅速发展,用现代信息技术改造传统行业已成为近三十年来各工业部门进行行业改造的一个重要课题之一。应用电子计算机技术已成为现代冶金生产技术的一个重要特征,冶金设备、冶金工艺、冶金生产、冶金企业管理中应用计算机的水平已成为衡量当代冶金企业现代化水平的重要标志。应用电子计算机的能力已成为当前冶金工作者的一项十分重要的、必不可少的技能。因此,这些都必须高等学校专业教育中给予充分的体现。

我国冶金行业各生产企业经过从 20 世纪 80 年代末陆续开始的十几年“技术改造及结构调整、产品升级换代”之后,“钢铁生产工艺、产品和技术装备由于计算机技术的广泛应用,生产技术装备向大型化、现代化、连续化迈进;检测和执行设备取代了传统的人工操作;计算机技术的应用已深入各个领域……”^①,在这样的形势下,从 90 年代中期开始,我们在专业教学中摸索增设“计算机在冶金过程中的应用”课程。经过几年的探索,初步形成了在本科生教学中设置“热工仪表及自动化”、“冶金过程数学数值计算”和“冶金过程计算机模拟”必修课程及相配套的独立设置的“冶金过程数学实验”和“冶金过程计算机模拟实践”等大型实验课程的模式。经过几年的实践,取得了较好的效果。

严格地说,计算机在冶金工业中的应用只是现代信息技术应用的一个方面。但由于无论是检测仪表、过程控制、电力传动,还是数据通信等都离不开计算机技术;同时从我国信息技术在冶金工业中的应用发展来看,信息技术的应用首先是从计算机的应用开始的。因此,通常所说的计算机在冶金工业中的应用,往往就是指现代信息技术在冶金工业中的应用。计算机在冶金工业中的应用范围包括自动化检测及仪表、计算机控制、计算机过程控制和计算机管理系统等方面。而计算机在冶金理论研究方面的应用,目前主要包括冶金过程数值模拟、冶金过

① 参见:2000 年冶金行业信息化发展概况. 中国信息年鉴-2001,应用推广篇。

程的优化、实验数据的处理等方面。为此,本书选择“冶金过程数值模拟”为主要内容来体现计算机在冶金理论研究方面的应用。选材包括数学模型方法基础、冶金过程热力学与动力学的数学模拟及冶金传输过程数值模拟三大部分。其中,冶金过程热力学部分主要介绍化学反应化学计量的矩阵表示、化学反应自由能和平衡常数的计算、平衡体系组成的计算等;动力学部分主要介绍气-固、气-液及液-液三大类型反应的过程动力学模拟方法,还介绍了反应体系耦合反应动力学模型;冶金传输过程数值模拟部分主要介绍传输过程数值模拟方法基础、导热问题的数值方法、对流与扩散问题的数值方法,以及流场计算简介。附录中列出了9个有关冶金过程中几个常见数学问题的数值方法计算程序、5个有关热力学和导热问题数值方法的计算程序和3个实用的VB小程序。这些程序均已在Windows 98~XP及Visual Basic 5.0~6.0环境下测试通过。

本书可作为冶金工程专业本科生教材,也可供研究生和从事冶金工程专业的科技、工程技术人员参考。本书特点不仅注重冶金过程模拟方法的贯彻,而且对于较难理解的算法部分,给出较多例题,并力求通过“笔算”让读者了解有关算法的真正含义、方法和步骤,以便于读者读懂附录给出的相应的计算程序,并有助于读者在此基础上自行编写其他的计算程序。作者认为,通过这样的编排,读者能够真正理解和掌握有关知识的内涵,达到“易懂、易学、易用”的目标。

在编写过程中,得到了冶金工业出版社的鼓励和帮助,同时一直以来,也得到了家人的全力支持,在此一并表示诚挚的谢意。

本书初稿曾作为讲义在为本科生开设的“冶金过程数值模拟”必修课及“冶金过程数值模拟实践”实践课程中使用,而且在使用过程中根据学生的意见不断地进行修改补充,但由于作者的学识及水平有限,书中仍难免有不妥之处,恳请同行与读者不吝赐教,并提出宝贵的批评意见。作者的E-mail地址是jianbin_chen63@163.com。

陈建斌

2007年10月

目 录

1 数学模型方法基础	1
1.1 数学模型的分类	1
1.1.1 按对现象认识程度的数学模型分类	1
1.1.2 按其他特征的数学模型分类	2
1.2 建立数学模型的方法和步骤	3
1.2.1 初步研究	3
1.2.2 建立数学模型	3
1.2.3 模型参数的估算	4
1.2.4 编制程序和计算	4
1.2.5 模型适用性检验	5
1.2.6 模型的应用	5
1.3 数学模型的选择	5
1.4 数学物理模拟研究方法的作用	6
2 冶金热力学和动力学的数学模拟	8
2.1 化学反应化学计量的矩阵表示	8
2.1.1 反应体系内物种的表示——原子矩阵	8
2.1.2 化学反应的表示——化学计量数矩阵	10
2.1.3 体系独立反应数和独立反应方程的确定	11
2.1.4 由原子系数矩阵确定化学计量数矩阵	12
2.1.5 反应过程中物质的量的变化	15
2.2 化学反应的自由能和平衡常数	16
2.2.1 化学反应的吉布斯自由能和平衡常数的矩阵表示	16
2.2.2 由物质的热性质计算反应物质的标准生成吉布斯自由能	18
2.2.3 化学反应的吉布斯自由能和平衡常数的计算	19
2.3 平衡体系组成的计算	20
2.3.1 单一反应的平衡体系	20
2.3.2 同时平衡体系组成的计算	23
2.4 组分活度的计算	26
2.4.1 铁液中组分活度的计算	26
2.4.2 熔渣中组分活度的计算	26
2.5 冶金过程动力学的数学模拟	27

2.5.1 冶金气-固反应过程数学模拟	28
2.5.2 冶金气-液反应过程数学模拟	32
2.5.3 冶金液-液反应过程数学模拟	37
2.5.4 冶金同时反应体系的耦合反应动力学模型	40
3 传输过程数值模拟方法基础	45
3.1 传输过程的基本方程	45
3.1.1 流体力学的基本方程	45
3.1.2 能量守恒方程	47
3.1.3 质量传递方程	48
3.1.4 传输过程的通用方程	49
3.1.5 湍流的控制方程	50
3.1.6 控制方程的守恒性	50
3.1.7 传输过程数值方法的计算过程	51
3.2 偏微分方程的数学分类及其特性	51
3.2.1 椭圆型偏微分方程	52
3.2.2 抛物型偏微分方程	52
3.2.3 双曲型偏微分方程	53
3.2.4 通用标量传输方程的特征	54
3.3 离散化方法	54
3.3.1 求解区域的离散化	55
3.3.2 微分方程的离散化和差分格式	57
3.4 离散化方程的求解	65
3.4.1 直接方法	65
3.4.2 迭代法	65
3.5 差分方程的精度、相容性、稳定性和收敛性	66
3.5.1 精度	66
3.5.2 相容性	66
3.5.3 稳定性	67
3.5.4 收敛性	67
3.6 差分方程的四个基本准则	68
4 导热问题的数值方法	70
4.1 一维稳态导热问题的数值方法	72
4.1.1 用有限差分法求解	72
4.1.2 用元体平衡法求解	78
4.1.3 用有限体积法求解	79
4.1.4 几个重要问题	84
4.2 一维非稳态导热问题的数值方法	92

4.2.1 区域离散化	92
4.2.2 有限差分法建立差分方程	92
4.2.3 有限体积法建立差分方程	96
4.2.4 一维非稳态问题的求解	98
4.2.5 差分格式的稳定性条件	99
4.3 二维导热问题的数值方法	108
4.3.1 求解区域离散化	109
4.3.2 有限差分法建立节点差分方程	110
4.3.3 有限体积法建立节点差分方程	113
4.3.4 边界条件和附加源项	114
4.3.5 不规则形状边界的处理	120
4.3.6 二维导热离散化方程组的求解	121
4.3.7 元体平衡法推导导热离散化方程	127
4.4 极坐标系下的导热问题	131
4.5 柱坐标系下的导热问题	132
4.6 三维导热的离散化方程	134
5 对流与扩散问题的数值方法	136
5.1 一维稳态对流与扩散	137
5.1.1 区域离散化	137
5.1.2 控制方程离散化	137
5.2 对流项的其他离散格式	138
5.2.1 对流扩散问题的严格解	138
5.2.2 上风格式	139
5.2.3 指数格式	140
5.2.4 混合格式	141
5.2.5 几种格式的比较	142
5.3 多维对流和扩散问题	148
5.3.1 二维对流和扩散问题	148
5.3.2 三维对流和扩散问题	150
5.4 虚假扩散	150
5.4.1 虚假扩散的含义	150
5.4.2 QUICK 格式	151
6 流场计算简介	155
6.1 交错网格的原始变量法	155
6.1.1 交错网格的提出	155
6.1.2 动量方程的离散化	157
6.1.3 连续方程的离散	161

6.2 SIMPLE 算法	161
6.2.1 速度修正方程	162
6.2.2 压力修正方程	163
6.2.3 SIMPLE 算法的计算步骤	165
6.2.4 关于 SIMPLE 算法的讨论	166
6.2.5 SIMPLE 算法的改进	167
6.3 湍流流动与换热的数值模拟	170
6.3.1 湍流流动的数学描述	170
6.3.2 湍流模型	172
6.3.3 标准 $k-\epsilon$ 方程的解法及其适用性	175
附 录	176
附录 A 线性方程组数值方法计算程序	176
A1 高斯-赛德尔迭代法和逐次超松弛迭代(SOR)法	176
A2 解三对角线性方程组的追赶(TDMA)法	180
附录 B 牛顿迭代法求非线性方程的根	182
附录 C 解非线性方程组的牛顿-拉弗森迭代法	183
附录 D 数值积分——用定步长辛普森(Simpson)求积公式计算积分	186
附录 E 线性回归分析程序	187
E1 一元线性回归分析程序	187
E2 多元线性回归(VB 调用 Matlab 程序)	188
E3 多元线性回归	190
附录 F 四阶龙格-库塔法求解常微分方程程序	193
附录 G 一维非稳态导热问题显式和隐式方法计算程序	197
附录 H 例 4-7 一维非稳态导热问题计算程序	202
附录 I 二维稳态导热问题计算程序	204
附录 J 计算铁液中组元活度的通用程序	206
附录 K 用完全离子溶液热力学模型计算渣中 FeO 的活度程序	208
附录 L VB 的几个实用程序	210
L1 窗体、图片框居中显示及写文件操作程序	210
L2 画坐标轴及作函数曲线图	211
L3 坐标不从零开始的画图程序	211
参考文献	213

1 数学模型方法基础

数学是研究现实世界数量关系和空间、时间形式的科学。它具有概念抽象,逻辑严密,结论明确,体系完整,应用广泛的特点。随着科学技术的迅速发展,特别是电子计算机的日益普及,使得数学的应用越来越广泛和深入。应用数学去解决各类问题是科技工作者追求的目标,如今,已成为现代科技工作者的重要能力之一。

数学模型(mathematical model)可简单地定义为用数学语言描述的实际现象,是用数学语言描述现象特征的数学关系式(包括完整的方程组及全部单值条件),是实际现象的一种数学简化。数学模拟(mathematical modeling)是利用数学方法解决实际问题的一种实践活动,即通过抽象、简化、假设、引进变量等处理过程后将实际问题用数学方式表达,建立起数学模型,然后用先进的数学方法及计算机技术进行求解。数值模拟(numerical modeling, numerical simulation)的含义与数学模拟基本相同,只是要求数学模型的求解必须采用数值计算方法,而计算过程往往要在电子计算机上进行。冶金过程数学模型往往都需要用数值方法进行求解。因此,狭义地说,数学模拟主要指数值模拟,即不仅把所研究的现象用数学方程式表示出来,而且要在计算机上进行数值解析。

过程是指实际生产中的一个相对独立的物质处理单元。过程模拟是对某一过程的全部或部分现象以某种方式所作的再现。再现的目的是为了研究其原理、规律性及控制该过程的方法等。冶金过程数学模拟就是以数学模型方法来再现钢铁冶金过程中的各种现象,反映冶金过程的真实特征和本质。数学模拟和数学模型的开发已成为当前冶金工程学科的重要研究领域之一。

物理模拟是指在不同尺寸规模的某种实物及介质上以物理方法再现所研究过程的某些特性。对某一冶金过程进行的水模型实验研究就是冶金过程中应用物理模拟的一个典型的例子。建立数学模型必须以足够的物理知识为基础,对过程参数间的相互作用关系要有明确的定性(概念)和定量(数据)的理解,而且数学模型要靠物理模型来验证其适用性。而物理模型也需要数学模型对其结果进行规律化和系统化。数学模拟和物理模拟是过程模拟的两大类,两者可以相互补充。将两种方法结合使用,称为数学物理模拟。

1.1 数学模型的分类

由于对现实现象的观察方法或认识程度不同,数学模型的数学特征和应用范围也不同,从而产生对数学模型的不同分类方式。

1.1.1 按对现象认识程度的数学模型分类

如果将建立和求解数学模型的过程看成是由已知现象(输入)求出另一现象(输出)的过程,那么可以把控制对象看作是输入和输出之间的一个“箱子”。若箱子内机理完全清楚就称为“白箱”模型。若箱子内的机理全然不清则称为“黑箱”模型。介于二者之间的,称为“灰箱”模型。

“白箱”模型又称机理模型,是根据物理的和(或)化学的基本原理直接建立的模型。这类模型往往是以冶金过程的传输机理和反应机理等为基础,依据冶金热力学和动力学,传热、传质、流

体流动、应变等的基本原理建立起来的。描述现象的数学关系多为常微分或偏微分方程(组),与相应的边界或(和)初始条件一起用数值法求解。模型中的某些参数或系数可能是未知的,但可从系统的数据中计算出来,或通过实测,或通过物理模拟获得。例如,热传导问题、电磁场的计算及层流流动问题等属于这个范畴。

“灰箱”模型是以物理和化学的定律为基础,同时包含一定的经验假定或参数的模型,故又称半经验模型。由于冶金体系复杂,过程涉及因素多,又多为高温体系,求解所建立的方程时,形状复杂的边界条件和变化不定的某些物性参数难以确定,为此不得不提出简化假定或使用一些经验测定参数。因此,多数冶金过程问题模型都属于这种类型。

“黑箱”模型是在分析一些复杂的体系时,如果缺乏有关的过程性质和内部构造的信息,不了解过程的机理,则可将体系看成一个“黑箱”,并设法用数学公式描述体系的输入和输出参数之间的关系,这就是“黑箱”模型。由于这类模型不是以基本的物理或化学定律为基础,而是过程的关键参数之间的经验表达,故又称经验模型。经验模型通常采用统计回归的方式得到,因此缺乏模型应用的可移植性。由于它不能揭示过程的机理和本质,因此只适用于在过程本质不详的情况下作为一种变通的研究手段。这类模型又可分为回归方程和以行为分析为基础的两类,如统计模型,基于神经网络模型、专家系统、遗传算法、模糊控制等智能信息处理系统的人工智能等,主要用于过程的控制和调节技术中。

前两类模型都是考虑了被模拟对象的主要规律而建立的,即使有时在模型的定量关系方面不够精确,在定性方面还是正确表示了对象,因此,模拟的规律和结果具有典型性,应用它们可以研究一定类型的模拟对象的共性。而经验模型,其数学表达简单,计算迅速,但不能反映被模拟对象的实质,参数变化范围窄,通常不能外推使用。

1.1.2 按其他特征的数学模型分类

按过程的状态分,可分为静态模型、动态模型。静态模型不考虑参数在冶金过程进行中的情况,而只考虑过程的初值与终值之间的关系。由于冶金过程的复杂,静态模型的误差较大。动态模型则考虑参数在冶金过程中的变化,能够比较准确地确定初始、终了和冶金过程任一时刻的过程状态参数值。

按空间变量随时间的变化与否分,可分为稳态和非稳态模型。稳定(定常)状态是指过程参数在空间上的分布不随时间而发生变化;而非稳定状态下各点的变量值则是时间的函数。工程中绝对稳态是不存在的,但为了简化问题,对于分布相对于时间变化较小时,可以忽略时间的变化而作为稳态来处理;而对于一般连续作用的过程,即使参数有某些波动,也可以采用对变量做时间平均的方法,将过程近似为一个稳态来处理。

按变量随机变化的属性分,可分为确定性和非确定性模型。确定性模型是指在数学描述中没有变量和参量的随机性变化,模型解是确切的值。非确定性模型中的变量随机变化,其解是不确定的,因此它给出的只是一个概率。非确定性模型还可分为时间不是变量的统计模型和时间作为自变量的随机模型两类。

按变量在空间分布均匀与否又可将模型分为集中参数模型和分布参数模型。集中参数模型忽略参数的空间变化,即系统中的性质和状态都是均匀的,仅随时间变化,因而模型的基本方程是常微分方程。分布参数模型同时考虑性质和状态的空间差异,模型的基本方程通常是偏微分方程。

还可从其他角度对数学模型进行分类,如可分为线性和非线性模型,连续变量和离散变量模型等。

1.2 建立数学模型的方法和步骤

数学建模指建立所研究对象的数学模型的全过程,它没有一般的固定法则可循。即使同一现象或过程,若观察的方法或角度不同,也可能得到不同的模型。当实际问题需要对所研究的现实对象提供分析、预报、决策、控制等方面的定量结果时,往往都离不开建立数学模型。“分析”系指定量研究现实对象的某种现象,或定量描述某种特性。“预报”是根据对象的固有特性预测当时间或环境变化时对象的发展规律。“决策”的含义很广,譬如根据对象满足的规律做出使某个数量指标达到最优的决策,使经济效益最大的价格策略,使总费用最少的设备维修方案都是这类决策。“控制”系指根据对象的特征和某些指标给出尽可能满意的控制方案。

建立一个实际问题的数学模型的方法大致有两种:一种是实验归纳的方法,也称为测试分析方法,所研究的对象为一个“黑箱”系统,内部机理无法直接获得,但可根据测试系统的输入输出数据,按照一定的数学方法,归纳出一个与所研究问题的数据拟合得最好的数学模型,这种方法称为系统识别(system identification)。另一种是理论分析的方法,也称为机理分析方法,即根据客观事物本身的性质,分析因果关系,找出反映内部机理的规律,在适当的假设下用数学工具去描述其数量特征。这种方法所建立的模型往往有明确的物理或现实意义。实际应用中,常将这两种方法结合起来使用,即用机理分析方法建立模型的结构,用系统识别来确定模型的参数。

建立数学模型的全过程一般可分为表述、求解、解释、验证几个阶段,并通过这些阶段完成从现实对象到数学模型,再从数学模型回到现实对象的循环。“表述”(formulation)是指根据建模的目的和掌握的信息(如数据、现象)将实际问题翻译成数学问题,用数学语言确切地表述出来。“求解”(solution)即选择适当的数学方法求得数学模型的解。“解释”(interpretation)是指把数学语言表述的解翻译回现实对象,给出实际问题的解析。“验证”(verification)是指用现实对象的信息检验得到的解,以确认结果的正确性。具体地讲,对冶金过程建立数学模型一般包括初步研究、建立数学模型、模型参数的估算、编制程序和计算、模型的适用性验证、模型的应用等步骤。

1.2.1 初步研究

初步研究阶段也称为模型准备阶段。根据实际生产过程中需要提出的问题,在初步研究阶段,首先要了解问题的实际背景,弄清问题的主次,抓住问题的本质,明确已知和要达到的目标,明确建模的目的和模型类型及可能的建模方法。作为目标,可以是开发一个新的过程,或设计一个反应器,或针对现有生产操作的解析和优化等。

确定了目标,也就限定了所要描述的过程现象,据此可以进行参量分析、确定问题的有关变量和参数、搜集各种必要的信息,明确已知量和未知量、自变量和因变量、主要量和次要量,弄清这些量之间的关系和所属的基础理论范畴。为了便于建立模型,求得结果,只要误差在允许的范围内,通常还要合理地舍弃一些次要的量,以使模型简化和便于求解。

对一些基本过程的描述,要选择合适的理论依据,同时要收集文献资料,对已有的类似过程数学模型进行仔细分析比较。然后,通过实验测定或利用从文献得到的可靠数据,结合对过程规律的了解,提出一个初级数学模型,以便做一些必要的估算。

如果初步研究范围内所得结果已能满足要求,则可不必建立更详细的数学模型。否则,就必须对过程现象做进一步分析,对初级数学模型进行补充修改或重新建立数学模型。

1.2.2 建立数学模型

建立或选取数学模型是数学模拟的核心,数学模型的正确性及边界条件的合理性是模拟成

功的关键。当然,对于冶金高温体系,有关物性系数或反应动力学常数等的确定常常成为模拟成功的关键。

为了建立数学模型,首先可把冶金反应器内发生的复杂过程分解为流体流动、传热、传质和化学反应等基本单元过程,并正确选择描述这些单元过程现象的合适的理论依据,建立相应的数学表达式。值得注意的是,由于对所有单元现象还不能完全了解,同时它们对反应器内的过程并不一定有决定性影响,再加上计算方法上的限制以及计算精度上的原因,在列出描述这些现象的方程时,把一切因素都考虑进去是难以做到的。因此,在建立具体的数学模型之前,往往先要进行模型的假设,对所研究的问题进行一些合理的简化:分辨各个因素的主次,忽略那些对过程影响甚小的因素;尽量将问题线性化、均匀化、稳态化。根据对象的特征和建模的目的,对问题进行必要的、合理的简化,用精确的语言做出假设,有时是建模的关键。模型“合理简化”的原则是:简化仍能抓住过程的主要矛盾而不失其真实性;简化必须满足应用的精度要求;简化能适应当前的实验条件,以便进行模型识别和参数估算;简化能适应现有计算机能力。

可见,建立复杂过程的数学模型,最基本的做法就是对过程进行分解和简化,提出合理的模型假设。这二者是密切相关,互为基础,互为前提的。分解是把复杂的实际过程变为几个单纯的问题,便于用相应的学科理论研究其规律性,为简化创造条件。简化才能使数学描述成为可能。从某种意义上说,没有简化,就没有数学模型,过程分解也就失去了意义。

经过模型假设后,就可以根据所作的假设分析对象的因果关系,利用对象的内在规律(如冶金热力学和动力学原理,冶金传输原理)和适当的数学工具,构造各个量(常量和变量)之间的数学表达式。所建立的数学关系,可以是一个方程,也可以是多个方程所组成的联立的方程组;可以是非线性方程或线性方程;可以是常微分方程或偏微分方程等。有些情况下,按对过程机理认识的不同,对同一过程可能有一个以上的模型。例如,在反应动力学研究中,事先并不知道模型的形式,由不同的反应机理和速度控制步骤可以导出多个速度方程。因此,一般是在实验研究基础上,把模型识别和参数估算结合在一起进行研究。但在达到预期目的的前提下,通常要求所用数学工具越简单越好。

1.2.3 模型参数的估算

在大多数冶金过程数学模型中,都包含至少一个可调性模型参数,其数值不同,将对计算结果产生很大影响。因此,数学模型建立之后,模型参数的估算也是重要环节。

模型参数的估算主要有两种方法。一种是实验测定,如反应速度常数、流动模型参数及有效导热系数等可通过实验测定。另一种是对那些难以直接测定的参数,如在反应器的两相模型中,气泡相和乳化相间的物质交换系数,各种搅拌钢包内钢水的循环流量等,其数值通常是通过实际过程的拟合计算确定的。

1.2.4 编制程序和计算

数学模型及其初始、边界条件确定之后,就可以对数学模型进行求解。反应工程研究中,大多数问题都需采用计算机数值法求解。在采用数值方法求解时,要根据所建立的数学模型的数学类型,合理地选用一种有效的数值计算方法进行求解。求解时,往往要根据所选用的数值算法用计算机进行计算。而采用计算机进行计算,可以采用 Fortran、Turbo C、Visual C++、Visual Basic 等目前流行的编程软件自行编制程序,然后在计算机上运行来求解的方法;也可以采用现成的数值计算软件如 Mathematica、Matlab 等进行简单的编程计算的方法;还可以采用专用软件进行求解的方法,如进行流场计算可采用流场计算的专用软件如 Fluent、CFX 等进行计算,进行

结构分析时采用专用的有限元分析软件如 Ansys 等进行计算。

因此,当确定了适当算法并编制出计算程序后,数学模型就成了实际被研究的对象,改变参数和变量的输入值,通过数值计算就可达到对实际过程研究的目的。这种研究又称“计算机实验”。它能排除实际操作中的各种外界干扰因素,更能反应过程的本质和规律性。它又能方便地研究设备尺寸和操作参数对过程结果的影响。因此,无论在新型反应器和新工艺的开发中实现最优化设计,还是对现有反应器和工艺,寻找其中的薄弱环节,挖掘潜力或优化操作条件,这种“计算机实验”都发挥了越来越重要的作用。由于这些实验均在计算机上进行,可以节省人力、物力、财力,加快研究进程,因此,其优越性是显而易见的。

在许多情况下,还需根据建模的目的要求,对模型求得的结果进行数学上的分析,利用相关知识结合研究对象的特点进行合理分析;根据问题的性质分析变量间的依赖关系或稳定状况,有时是根据所得结果给出数学上的预报,有时则可能要给出数学上的最优决策或控制。不论哪种情况,常常都需要进行误差分析、模型对数据的稳定性或灵敏性分析等。

1.2.5 模型适用性检验

模型适用性检验是指把模型计算的结果与实际反应器或模拟实验的实际现象的操作结果数据进行比较,检验模型的合理性和适用性,也称为模型的验证。这一步骤对建模的成败非常重要,它是考验所建立模型的合理性和适用性的重要步骤。

如果两者的偏差在要求的精度范围内,就说明计算结果和实际数据是吻合的,数学模型能用来描述所研究的过程,模型能反映实际过程的规律,检验结果是正确的或基本正确的。这样,所建立的模型就可以用来指导实际。

在模型计算中可以排除实际操作中难以避免的各种外界干扰因素。因此,模型计算结果与实际反应器或模拟实验的实测值间存在一定误差是正常的。但是,如果存在规律性偏差或较大误差,则必须详细分析其原因。它们可能来自程序错误、参数估算不准确或模型本身的问题,也可能是由于测定结果有问题。可根据原因,进行修改程序,重新估算参数或审查和修改模型,甚至有必要重新进行实验。总之,这是一个使数学模型符合实际情况的“理论、实践,再理论、再实践”的循环往复的过程,一般要经过多次反复,直至达到要求的误差范围,才能证明模型是适用的。

1.2.6 模型的应用

数学建模的目的就是为了应用。一方面,通过应用可以对模型进行进一步的客观公正的检验,从而使模型在实践的检验中不断改进、发展和完善;另一方面,可以充分体现建模的目的,充分挖掘模型用于分析、研究和解决实际问题的作用。

在模型正确的基础上,就可以做进一步的实验,如改变原料条件、设备参数、工艺参数或一些操作参数,然后在计算机上进行各种对比实验,通过对比实验的结果实现对所研究的设备或工艺提出相应的优化建议、措施和方案。

应该指出的是,并非所有建模过程都要经过上述这些步骤,有时各个步骤之间的界限也不那么明显。因此,在建模过程中不要局限于形式上的按部就班,重要的是根据对象的特点和建模的目的,去粗取精,去伪存真,从简到繁,不断完善。

1.3 数学模型的选择

对于同一现象和过程可能提出不同的模型。事实上,随着冶金过程理论的发展及计算机的

普及,对于一些典型的冶金反应器已经建立了各种复杂程度不同的数学模型。因此,不仅要学会建立模型,而且要能够按问题的要求合理地选择模型。

对于任何有物体流动的过程,其数学模型结构首先是由流动特性所决定的。因此,选择模型时必须考虑下列情况:

- (1) 模型应充分反映物流和能流的性质,而且数学描述应尽可能简化。
- (2) 模型参数应能由实验或其他方法确定。
- (3) 对于非均相体系,应对每个相选择模型。

在过程分析中,最多可遇到 4 个自变量,即 1 个时间变量和 3 个空间变量。因此,自变量的合理选取是一个重要问题。随着对过程分析的详细程度增加,数学处理的难度也增大,建立和选择数学模型的“艺术”取决于以正确的方法来观察问题的能力,同时在精度要求、有关经验参数的有效性、数学工具的固有限制及所需要的计算时间等因素间做出适当的妥协。

1.4 数学物理模拟研究方法的作用

数学物理模拟研究方法被引入冶金过程的研究以前,冶金工艺和速率过程的研究主要依靠实验室研究和现场观测,这些方法至今仍具有重要的意义。但由于高温过程实验研究的困难和研究结果的准确性等原因,实验研究方法的可靠性受到很大的考验。随着冶金工艺技术和相关科技的发展,对工艺优化要求的日益提高,以及计算机技术的迅速发展及其应用的日益普及,数学模拟方法已成为冶金过程研究的重要手段之一,已逐渐成为工程装置优化、仿真设计和实现过程最佳控制的有力工具。

数学模拟的作用主要表现在以下几方面:

(1) 对现有工艺,可起到加深对过程的基本现象、反应机理的认识,为改善工艺过程和操作提供依据;探索设备、工艺过程和操作参数的变化对冶金效果的影响和变化规律及它们之间的定量关系,为优化工艺、改进设备、改善操作提供必要的数据和依据;实现对工艺过程的诊断和过程的自动控制;指导中间厂和现场实物试验的设计和规划,以节省开支等。

(2) 对开发新工艺,可起到对新设计工艺的可行性和灵活性做出准确的估计;对规划和设计实验室、中间厂或实物规模的实验提供指导;帮助评估中间厂或实物试验结果和进行比例放大;在一定条件下,可替代中间厂或现场实物进行开发性实验,以节省费用等。

图 1-1 概要说明了数学模拟在工程中的作用。但在对冶金过程进行数学模拟时,往往要结合物理模拟来获得过程数学模拟所需的合理的边界条件,或获得一些重要的物理参数,或用来验证数学模拟的适用性,这种模拟称为数学物理模拟研究,或数理模拟。

采用物理模拟可以对冶金中气泡的行为、循环流和熔池的混合等过程,甚至对升温过程的传热规律进行观测,从而获得从现场无法获取的信息。在连铸中间包、结晶器等反应器的研究中,还可借助物理模型进行相关参数和现象的研究。物理模拟中,由于可缩小装置的比例,实验费用可以大大降低。物理模拟还可以起到下列重要作用:物理模型中定量测定的结果可按一定关系用于真实体系

的描述,直接为优化工艺过程或为开发新流程提供依据;帮助数学模拟研究人员正确了解所研究过程的物理特征,以正确处理数学模拟中的简化及源项和边界等条件的设定;验证数学模拟的结果,使数学模型不断完善,使之尽可能逼真地描述真实体系。

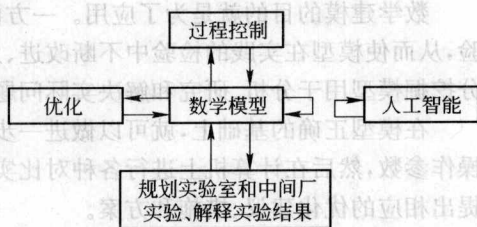


图 1-1 数学模拟在工程中的作用

冶金过程往往是一个同时包含有流体流动、传热和传质的高温、多相化学反应的复杂过程,尚存在大量机理未知的现象。近二三十年来,数学物理模拟的研究不仅较好地揭示了许多冶金过程的基本现象及内在规律,而且在冶金生产的系统优化、新工艺的开发中起着越来越重要的,甚至是不可替代的作用。可以预计,掌握和利用数学物理模拟研究方法必将是今后冶金学科的重要技能之一。

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

1.5 数学物理模拟研究方法的作用

1.5.1 数学物理模拟研究方法的作用

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

$$(1.5-2) \quad \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_n \end{pmatrix}$$

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

数学物理模拟研究方法的产生,是随着科学技术的进步而发展的。在冶金工业中,随着生产规模的扩大,对冶金过程的模拟研究,越来越显示出其重要性。

2 冶金热力学和动力学的数学模拟

在用计算机进行冶金过程模拟时,为了在计算机内将冶金过程中的所有物理化学特征简洁而统一地表示出来,就要求将所有的物理化学特征进行数字化。最简洁的办法就是用一个个数表——矩阵来表示。

2.1 化学反应化学计量的矩阵表示

2.1.1 反应体系内物种的表示——原子矩阵

把所研究的化学物质的总和看作是一种集合或一类集合,其中的原子、分子、离子、络合物及其生成物,以及电荷等都可看作是该集合中的元素。基于这种概念,物质的所有可能的物理化学特性都可看成是这些集合在数字向量、张量等集合上的反映,就可以实现物质的物理化学特征的数字化。

现假定每种单个化合物的分子(原子、离子等)都由其化学分子式决定,如 CO 、 CO_2 、 H_2O 等。每种化学分子式按其本质来说,又都看成是按照某种方式排列的数的总和。假设在第一个位置上表示氢原子的个数,在第二个位置上表示碳原子的个数,在第三个位置上表示氧原子的个数,则 CO 可表示为 $(0, 1, 1)$, CO_2 表示为 $(0, 1, 2)$, H_2O 表示为 $(2, 0, 1)$ 。在这种数字序列中可以指定每一个位置,使得元素周期表中的每个元素和它的原子序号在这个位置上相对应,并可以用符号标明正的或负的离子电荷。因此,所有物质或分子都可用一种完全确定的数字序列——数字向量来表征。这种化合物的序列化表示方法,非常便于利用线性代数作为解决问题的工具,也十分方便地用计算机作为工具来处理各种物理化学问题。

设某封闭体系由 E 种元素、 S 种物质(物种)构成。用 A_i 表示其中第 i 种物种($i = 1, 2, \dots, S$), B_j 表示第 j 种元素的原子($j = 1, 2, \dots, E$), η_{ij} 表示第 i 种物种分子中的第 j 种原子的个数,则第 i 种物种可表示为

$$A_i = \sum_{j=1}^E \eta_{ij} B_j \quad (i = 1, 2, \dots, S; j = 1, 2, \dots, E) \quad (2-1)$$

式中, η_{ij} 称为原子系数或物种系数,表示物种 A_i 的分子中元素 B_j 的原子的个数(如 CO_2 中氧原子的个数为 2,则 CO_2 中 $\eta_{ij} = 2$)。物种系数或原子系数 η_{ij} 必是非负的整数。式(2-1)可写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} & \cdots & \eta_{1E} \\ \eta_{21} & \eta_{22} & \cdots & \eta_{2E} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \eta_{S1} & \eta_{S2} & \cdots & \eta_{SE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_E \end{pmatrix} \quad (2-2)$$

若用列向量 B 代表元素 B_j 的集合,称为元素向量。用列向量 A 代表物种 A_i 的集合,称为物种向量。即