

中国金属学会



冶金过程 数学模型概论

赫冀成 编著

1988年12月

《冶金继续工程教育丛书》

冶金过程数学模型概论

赫 冀 成 编著

中国  冶金学会

序

中国金属学会组织编写了《冶金继续工程教育丛书》，为大家办了一件好事。积极开展继续教育，对于提高冶金科技人员水平，促进冶金工业的发展，具有重要意义。希望冶金战线各级领导重视这项工作，努力创造条件，为科技人员在职学习提供方便；同时也殷切希望广大冶金科技工作者坚持学习，不断吸收新知识，学习新技术，为实现四化，振兴中华做出更大贡献。

中国继续工程教育协会理事
冶金工业部副部长

徐大铨

一九八八年十二月

前 言

几乎所有的冶金过程都伴随有流动、传热和传质以及这些单元操作的复杂组合。同时,大多数冶金过程都是在高温下进行的,实际测量十分困难。因此,多少年来冶金过程的研究一直是以冷态模型实验、单元操作实验或坩埚实验等物理模拟为主要手段,利用这些实验中获得单元操作知识,进行综合判断,来推测炉内状态的。

但是,近年来随着电子计算机计算处理能力的飞跃提高,已经能够利用数学模型直接对全过程进行数学模拟了。由于这种被称为“数值实验”的研究方法具有独到的优点,因此发展迅速,正在形成一个新的领域。现在,数学模型研究的重要性已经被越来越多的人所认识了。

然而,对于数学模型研究的基本原理和方法以及如何运用数学模型去指导和解决生产实际问题,即数学模型研究的方法论知识,现在还不够普及,而这一点又恰好是非常重要的。实际上,即使是应用别人已编好的数学模型,也必须具备有关的基础知识,才能够比较深刻地理解数学模型并运用数学模型去推动生产实践。这是编写本书的主要目的。

为了满足广大冶金科技工作者学习的迫切需要,特编写这本专题教材。读者通过本书对冶金过程的数学模型可以有一个初步的全面了解。但是对于各类冶金过程的数学模型,因限于篇幅不可能深入地详尽地加以阐述。不过,中国金属学会已经决定,还要出版一本《冶金过程数学模型》。该书除了系统地阐述冶金过程建立数学模型的基本概念、基本

原理和基本方法以外，还将结合精选的大量实例，分章介绍各种冶金过程数学模型的特点、构成及其发展趋势。该书还将包括有许多资料性的内容。编者诚挚地希望，该书将能基本满足读者进一步学习的需要。

本书主要是根据我自己研究工作的体会，参考近年搜集整理的有关资料并筛选了繁多的研究论文而编成的。由于经验不足，水平有限，本书难免会有许多欠缺，某些见解也许不够妥当。因此，在感谢中国金属学会委托编写此书的同时，深望科技界前辈、同行和读者给予批评指正。

编 者

1988年10月

目 录

序

前 言

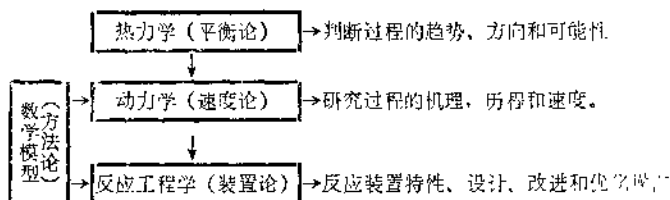
主要符号表

1. 绪论	1
1.1 过程解析与数学模型	2
1.2 数学模拟的意义	3
1.3 数学模拟的优越性	3
1.4 建立数学模型的一般原理	4
1.5 数学模型的分类	4
1.6 建立数学模型的注意事项	7
2. 传输原理数学模型	8
2.1 基本概念	9
2.1.1 控制方程式的数量	9
2.1.2 衡算方程式的形式	11
2.1.3 控制体	14
2.1.4 矢量方向与坐标轴方向	15
2.1.5 未知物理量的微小增量	15
2.1.6 通量矢量的微分衡算	17
2.1.7 固定坐标系与移动坐标系	18
2.1.8 传输速度项	21
2.1.9 化学反应动力学项	23
2.1.10 边界条件与初始条件	25
2.1.11 因次与国际单位制	27
2.2 传输原理数学模型的分类	27
3. 炼铁过程数学模型	31

3.1 基本概念	31
3.1.1 模化的假定	31
3.1.2 料床中的气体流动	33
3.1.3 料床特性值	34
3.2 移动床热交换一维模型	35
3.3 气-固系反应装置数学模型的一般形式	37
3.4 数值解析方法	41
3.4.1 流 场	41
3.4.2 压力场	42
3.4.3 流动与传热的同时解析	43
3.5 高炉过程数学模型	46
4. 炼钢过程数学模型	49
4.1 基本原理	49
4.1.1 Navier-Stokes方程的应用	49
4.1.2 喷气搅拌装置中熔体的混合	51
4.2 渣-铁反应操作模型	56
4.3 底吹精炼装置循环流量区域耦合模型	62
4.4 LD转炉过程模型	66
参考文献	70

1 绪 论

冶金学的发展已经经历了以下几个阶段。



初期的冶金学研究是以热力学为基础的。由于实际工业装置中，化学反应速度还要受到流体流动、传热和传质条件的限制，研究伴有这三种传输现象下的冶金反应速度就形成了冶金过程动力学。动力学研究的丰富成果为冶金反应装置中过程的综合解析提供了必要条件。电子计算机的发展又为求解过程解析所建立的数学模型提供了有效手段。因此，六十年代后期以来冶金反应工程学就迅速发展起来。但是，无论是冶金过程动力学还是冶金反应工程学，数学模型都是它们的主要研究手段。如果对两者加以区别的话，前者的数学模型仅描述一个局部现象，而后者的数学模型则着眼于描述反应装置中的全过程。另外，如果说热力学和动力学是现象论的研究，而反应工程学是装置论（或过程论）的研究，那么数学模型本身则可以说是方法论的研究。

各种冶金过程数学模型的研究已经取得了丰富的成果，达到了一个崭新的水平。并且在生产中发挥着越来越大的作用。因此，了解和掌握运用数学模型研究冶金过程的原理和

方法就变得越来越重要了。

1.1 过程解析与数学模型

为了阐述方便，首先规定本文中一些术语的含义。

所谓**过程**是指实际生产中的一个相对独立的物质处理操作。例如，高炉过程、LD转炉过程等等。

组成过程的要素称为**子过程**。**子过程**有时是指在建立数学模型时为了解析的方便，根据过程的特征所划分的局部过程，例如在底吹精炼装置中，可把整个炉内分成气-液混相上升域、表面流域和下降循环流域，以便于分别给予数学描述（参见图4—8）。子过程有时是从现象的物理本质出发，指过程中所包含的各类不同物理现象。例如，高炉内可以认为同时存在着气体与固体炉料在空间的不均匀运动、气-固相间的热交换、各种均相与非均相反应等子过程。

体系则是指过程中的某一部分，或者是某些子过程的集合体。过程是按生产操作自然划分的，而体系则是为了解析的方便，在过程中人为指定的某一部分。有时也把整个过程做为研究的体系。

这里将**系统**看成是一系列相关过程的组合。例如，在研究整个钢铁企业能源消耗时，它的对象便是由烧结-炼铁-炼钢-连铸-轧制等各过程组成的一个系统。

本书阐述的重点是如何通过过程解析建立数学模型。所谓**过程解析**，就是分析过程中存在的各种物理相关性，并给予数学描述。**数学模型**就是对真实过程的特征与本质的数学表现。

就一般意义而言，用某种方法再现一个系统、过程或一

部分现象，以研究其原理、规律性及控制方法等称为模拟。
当用数学模型进行这种研究时便称为**数学模拟**。

1.2 数学模拟的意义

对现有过程通过数学模拟可以：

- (1) 深刻了解过程的性质和过程变量间的关系；
- (2) 探索改变操作参数的效果，以提供优化手段；
- (3) 为改进反应装置设计提供依据；
- (4) 实现生产过程的自动控制；

等等。

对开发中的过程，通过数学模拟可以：

- (1) 估计过程的可行性；
- (2) 规划实验室规模的试验；
- (3) 为中间工厂试验、放大及鉴定提供参考和依据。

1.3 数学模拟的优越性

与其他方法相比，数学模拟研究具有下列优越性。

(1) 广泛性。可进行生产中不能进行的，可能造成巨大经济损失或具有危险性的各种实际过程的研究。

(2) 经济性。可以迅速、廉价地研究实际生产过程。

(3) 外推性。适宜的数学模型可以成功地模拟当前实际生产中不能实现的极端操作条件下的生产过程，并可帮助确定临界操作条件。

(4) 灵活性。可以比较和评价各种不同操作与设计方案。

(5) 再现性。由于数学模型的内容可以及时而任意地

调整, 就能够保证结果具有良好的再现性。

1.4 建立数学模型的一般原理

通过过程解析建立数学模型, 一般均需经过下述步骤。

- (1) 明确解析的目的、客观标准及操作条件。
- (2) 研究过程的物理特性, 将它分解成若干子过程。
- (3) 研究各子过程之间的关系。
- (4) 对各种变量间的物理相关性给予正确而尽可能简洁的数学表现。
- (5) 根据某种物理化学或数学原理建立数学模型。
- (6) 数学模型妥当性的判断。
- (7) 模型的修改, 以至最后使其对真实过程具有足够的仿真性。

上述各步骤间的关系可表示成图1-1。

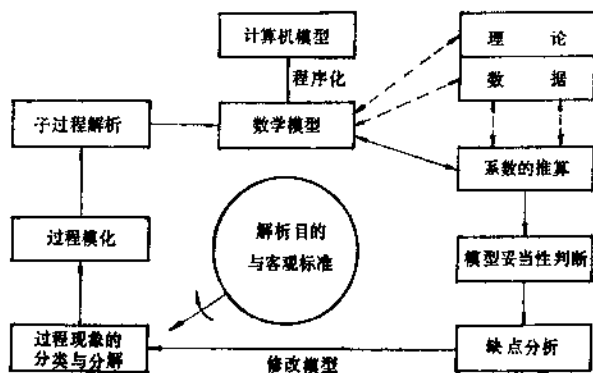


图1-1 建立数学模型的一般步骤

1.5 数学模型的分类

研究数学模型分类有助于深刻理解各种数学模型的品质、用途和特点。

数学模型可以从不同角度加以分类。

(1) 根据模型的经验成分

a) 理论模型，是依据基本物理定律推导而得的模型。它含有最少的臆测或经验处理成分。例如热传导问题、电磁场计算、层流过程等。这类模型多以偏微分方程形式出现，与相应边界条件一起用数值法求解。由于要求严格的理论根据，应用范围受到限制。

b) 半经验模型，是主要依据物理定律而建立的模型。但同时又包括一定的经验假设。在这种模型中，或者由于缺少某些数据；或者由于模拟的过程过于复杂而难于求解，需提出一些经验假设。实际应用的大量数学模型均属于这一类。

c) 经验模型。这是一种输入-输出型黑箱模型。它不是以物理定律为依据的，而是输入与输出变量间一种总的经验表达式。这种模型虽然不能反映过程内部的本质与特征，但对过程的自动控制往往很有效。

(2) 根据所依据的物理或数学原理

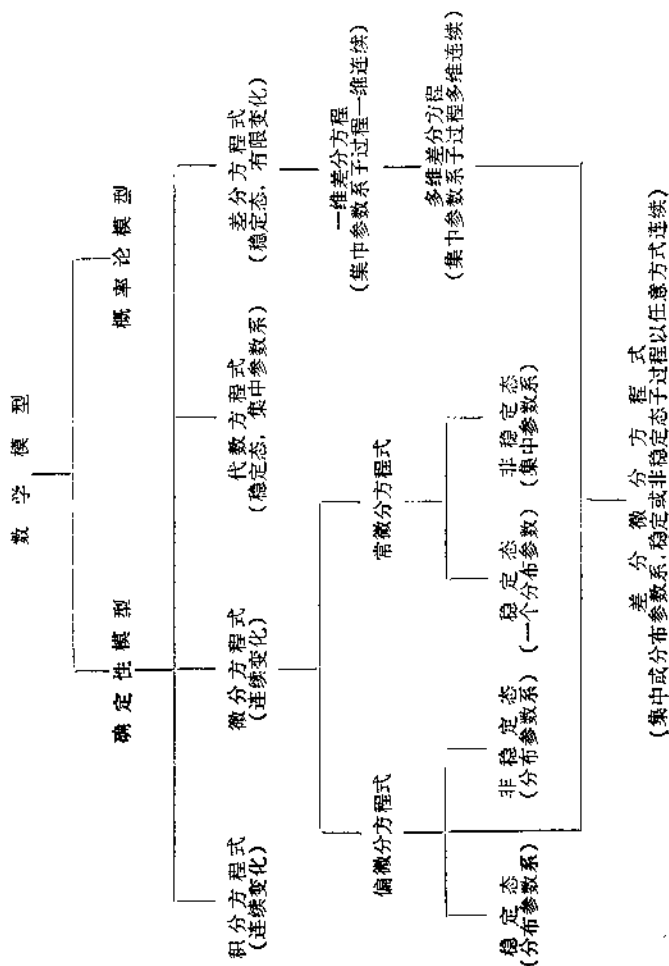
a) 传输原理模型。这类模型是根据质量、动量及能量的传输理论建立的。上述的理论或半经验模型多属于这一类。

b) 统计原理模型。根据概率理论，例如停留时间分布函数、响应函数等概念建立的模型，多与传输原理相结合，主要用于反应装置中混合过程的研究。

(3) 按模型的数学属性而分类

这种分类是与求解方法密切关联的。其分类可见表1—1。

表 1-1 数学模型按数学属性的分类



1.6 建立数学模型的注意事项

(1) 所采用的数据的可靠性和应用范围，特别是动力学数据。

(2) 计算技术的限制条件。不能求解的数学模型是没有意义的。

(3) 要确定模型的外推范围。

(4) 过程模化的合理性，即所有的假定必须保证不丢掉过程的主要本质和特性。

确定数学模型的结构是一项需要创造性和判断性的工作。因为任何数学模型都只不过是对一个复杂过程作理想化的数学描述。因此，也只能表述过程中的某些性质。在所得到的结果中并不含有被忽略了的那些因素的作用，但这不等于说考虑的因素越多就越能逼近真实过程。因为这样一来会使模型变得十分复杂，不确定性参数也会增加，反倒使那些重要因素变得暧昧不清，失掉了结果的可靠性。在满足精确性要求的前提下，数学模型越简单越好。

2. 传输原理数学模型

根据传输原理建立数学模型的方法与步骤示于图2—1。

复杂的冶金过程是难以直接给予数学描述的。因此，首先必须对过程设立一些合理的假定，以使真实的物理过程得到简化，称为过程的模化。所谓合理的假定，就是说模化后的过程仍不失掉原过程的主要性质和特点，对真实过程具有等效性。舍去那些既不影响过程主要性质又难以进行数学处理的次要现象是为了建立数学模型的方便并更加突出过程的

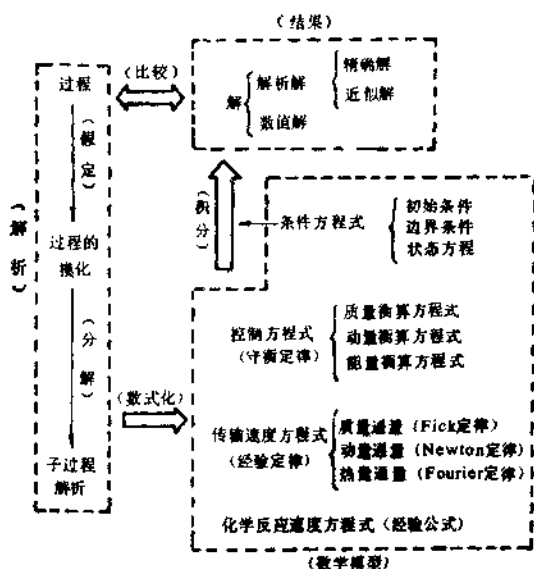


图 2—1 传输原理数学模型的建立方法与步骤

本质。提出合理假定的前提是对过程物理本质的深刻理解和掌握。

经过物理模化后的过程往往仍然复杂。为了方便，常分解成各种子过程，从各子过程的解析入手建立数学模型。

数学模型的核心是一组控制方程式。控制方程式是在子过程解析的基础上，根据物理学的守恒定律建立起来的一组质量、动量及能量衡算方程式（亦称平衡方程式）。一组完整的衡算方程可以唯一地决定一个过程。

由于衡算方程是对物理量（质量、动量和能量）的收入与支出的平衡计算，因此，对于收入与支出项的计算，还必须要有传输速度方程式和化学反应速度方程式。传输速度方程式是建立在经验定律基础上的。质量、动量及热量的基本传输速度方程就是 Fick 定律、Newton 定律和 Fourier 定律。化学反应的计算则是按照化学动力学的方法，采用经验公式，反应常数通常写成 Arrhenius 型的指数式。

为了求解控制方程当然还需要一组完整的边界条件和初始条件。此外，还常用到状态方程，这些可统称为模型的条件方程式。

数学模型的解，无论是解析解还是数值解，都必须与模型实验或实测数据相比较，以验证模型的可靠性。一个令人满意的数学模型往往是经过反复比较和修改后才能得到的。

2.1 基本概念

在这一节里，将具体介绍建立数学模型所必须的物理与数学的基本概念。

2.1.1 控制方程式的数量

描述任何物理现象必须有与未知物理量相同数量的独立方程式，才能唯一地决定所描述的过程。这些方程式称为控制方程式。如前所述，控制方程式可以从质量、动量和能量的守恒关系求得。

〔例2—1〕 在固定床、移动床、流化床以及回转窑等气-固反应装置中，流体通过料层流动。试论描述过程所必要的控制方程数目。

〔解〕

(1) 质量衡算

设流体或固体相的成分数为 n_j ($j=g, s$ 分别表示气相和固相)。则决定气相和固相中各成分浓度均需要 n_j 个质量衡算方程式。一般，其中一个是总质量衡算方程，亦称为连续性方程。质量衡算方程式可以以质量（公斤），也可以以千摩尔为基准而建立。

(2) 能量衡算

能量衡算方程式是以热力学第一定律为基础的。在特定的情况下，与热能或内能相比，位能及动能可以忽略不计，能量衡算方程便简化为热量衡算方程。在冶金过程解析中，经常遇到的是热量衡算方程。

因为能量是标量，对于气相和固相，能量守恒原理都单独成立。因此，分别列出流体相和固相的热量衡算方程式，便可决定各相的温度。

(3) 动量衡算

动量是矢量，必须对三个方向建立平衡关系。但可用统一的矢量式表达。流体和固相的动量衡算方程能够给出各相的三个速度成分。基于动力学观点，动量衡算方程式又称为