

冶金反应工程问题

[BASIC语言]

WEIJIN
FANYING
GONGCHENG
WENTI
HUIZH
JIEXI

数值解析

●马志肖兴国编著

辽宁科学技术出版社

内容提要

本书汇集了25个应用微型计算机解析冶金工程问题的实例。问题包括冶金动力学、传输原理、反应器理论、冶金装置解析等，多数取材于近十年国内外科技刊物上的研究论文。诸问题皆有题目分析、计算方法说明、BASIC程序和运算结果。书后附有进行数值计算的通用子程序和参考文献。本书为冶金工作者在科研生产中应用计算机进行工程问题解析计算提供了切合实际的范例和丰富的参考资料，尤其适合大学冶金专业高年级学生、研究生作为上机实践教材使用。

序

面前这部书稿，是我的同事们近年来在科研和教学中辛勤耕耘的成果。应两作者之邀，在此我谨就本书内容及其背景，贡献一点己见。

正如读者们所周知，自传输工程和反应工程的理论及研究方法引入冶金学领域以后，越来越多的研究致力于冶金反应装置内部过程的定量数学描述，以求全面、准确、深入地揭示过程的规律性。数值计算技术和电子计算机的迅速发展，使这一努力成为现实，从而为冶金新工艺开发、装置设计、过程最佳控制和预测提供了依据和大量信息。这一成就和其他进步，使冶金学正在由过去的以经验为主的工艺科学上升为在系统理论指导下的现代工程科学。

80年代以来，东北工学院陆续为本科生、研究生开设了冶金传输原理、反应工程学课程，并出版了相应教材。本书两作者从那时起即从事该领域的教学科研工作。他们尤其注重将数值计算技术和计算机应用于冶金工程实际问题，在培养学生上机能力方面开展了探索性的工作，科研方面亦饶有成果。现在他们将历年积累的若干计算程序整理分类，选择了尽可能包括常用计算方法的典型实例，配之以针对每问题的数学描述和算法说明，汇编成书。我认为这是一项颇有价值的工作。国内外目前关于数值计算和程序设计的专著并不乏见，但如本书这样将上述两方面与冶金工程实际问题融

为一体者，尚属阙如。因此本书的出版，不仅适应冶金类院校师生之急需，亦将受到生产科研方面的广大冶金工作者的热诚欢迎。

本书的两位作者，都是我的朋友和同事。值本书出版之际，我祝愿他们在已经开拓的道路上，竿头百尺，更进一步。

一九八九年仲秋 肖泽强序于沈阳

前 言

本书汇集了25个应用微型计算机解析冶金工程问题的实例（包括数学模型、算法和BASIC语言程序）。目前计算机在社会上的广泛普及，尤其是微型机的迅速发展，正在深刻地影响着人们的思维、工作和学习方式。面临这一形势，在大学中为冶金专业高年级学生开设计算机应用课程，已势在必行。与此同时，富有实践经验的工程师们在应用计算机进行实际工程问题数值计算的时候，同样希望有些典型的例题作参考。本书即为适应此类迫切需要而编写。

本书选题的基本原则为，以冶金工程问题作为主要对象，在算法上包括常用的数值计算程序。书中问题有冶金动力学和热力学（4个）、传输原理（3个）、反应器理论（8个）和冶金装置的数学模型（10个）。诸问题的主程序、辅程序均与问题的数据、模型及分析说明编在一起，并附有计算结果。部分关于数值计算方法的子程序，为若干问题共用，故作为独立部分汇集于最后。这些算法是：数值积分和微分，线性插值，最小二乘法，解微分方程的龙格—库塔法、吉尔法、特性曲线法、打靶法和差分法，最优化的单纯形法、复合形法和0.618法等。

本书的大多数问题，直接取材于近10年国内外科技刊物发表的论文，程序由本书编者自拟，少数根据近年来国内外出版的教材、教学参考书中内容而改编。为了读者深入研究

的需要,附有参考文献目录。全部程序在苹果-II机上运算通过,部分程序在IBM-PC机教学中曾使用。对于其他机型,调整少量打印和绘图语句亦可适用。本书编者对于参考文献的作者深表谢意,由于书中利用了他们的研究成果。书中难免存在若干不足之处,编者欢迎即将使用本书的教师、工程师和学生们的建议和批评。

编 者

1989年10月

目 录

【前言】

【问题】

1	反应器串联级数.....	1
2	传质和动力学参数计算.....	6
3	热力学参数计算.....	11
4	全混流反应器的热稳定性.....	19
5	渣金两相接触方式.....	22
6	全混流反应器的绝热转化率.....	27
7	物料停留时间分布.....	30
8	非理想反应器模型.....	34
9	半连续式全混流反应器.....	39
10	底浇注钢包的数学模型.....	44
11	气—固反应动力学.....	50
12	渣—金反应动力学.....	56
13	多界面的未反应核模型.....	64
14	生产方案最优化.....	78
15	单级蒸馏的最优化.....	84
16	锆铪分离多级萃取平衡模型.....	92
17	萃取过程的最优化.....	101
18	流化床两相等温模型.....	112
19	移动床扩散等温模型.....	121

20	固定床一维等温模型.....	130
21	高炉风口区模型.....	140
22	氧化精炼模型.....	151
23	闪速焙烧模型.....	158
24	连续铸造模型.....	175
25	热风炉蓄热室模型.....	185
	【数值计算通用的子程序】	196
	【参考文献】	210

问题1 反应器串联级数〔1〕

在溶液中进行下述等温的二级反应，



反应速率为 $r = kC$

$$k = 0.5 \quad 1/(\text{mol} \cdot \text{min})$$

进料反应物浓度和体积流量分别为，

$$C = 1 \quad \text{mol/l}$$

$$F = 0.3 \quad \text{l/min}$$

试计算下列问题：

(1) 用若干个单槽容积为1升的全混槽反应器（即CSTR）构成串联槽列。若使上述反应的总转化率 X_A 达到0.85，至少需要几个槽？

(2) 保持在(1)中确定的总容积和其他条件不变（如 k 、 F 、 C ），选择不同的单槽容积而改变串联槽数，求槽数 $N = 1, 2, \dots, 25$ 时的总转化率各为若干？并与同等容积的活塞流反应器（即PFR，相当于 $N = \infty$ 的CSTR）的转化率作一比较。

【分析】

对于 N 个等容积的CSTR的串联组合，设其中第 i 槽的物料入口浓度和出口浓度分别为 C_{i-1} 和 C_i ($i = 1, 2, \dots, N$)，容积为 V_i ，如图1.1所示。

可以证明：

$$C_i/C_{i-1} = (\sqrt{1 + 4k\tau_i C_{i-1}} - 1)/2k\tau_i \quad (1-1)$$

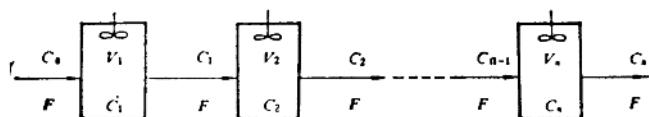


图1.1

$$C_n/C_0 = \prod_{i=1}^n (C_i/C_{i-1}) \quad (1-2)$$

$$X_A = 1 - C_n/C_0 \quad (1-3)$$

此处, $\tau_i = V_i/F$

对于容积为 V 的PFR, 如图1.2所示。

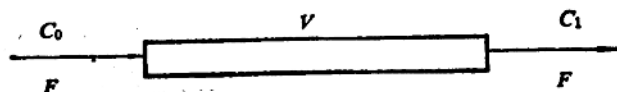


图1.2

同样可证

$$C_1/C_0 = 1/(1 + k\tau C_0) \quad (1-4)$$

$$X_A = 1 - C_1/C_0 \quad (1-5)$$

此处, $\tau = V/F$

【程序及其说明】

根据题目中给定的条件和式 (1-1) — (1-5) 计算本问题的程序和计算结果在下面给出。由于式 (1-1) — (1-3) 将反复使用, 故以一段子程序处理 (语句400—430)。程序中变量的意义说明如下:

K —— 速率常数 k

F —— 体积流量 F

C_0 —— 进料的反应物浓度 C

C——容器中的反应物浓度 C_i

V——容积，在语句60中代表 V_i ，在语句190中代表 V

T——在语句70、220中代表 τ_i ，在语句310中代表 τ

X——转化率 X_A

计算结果示于图1.3。

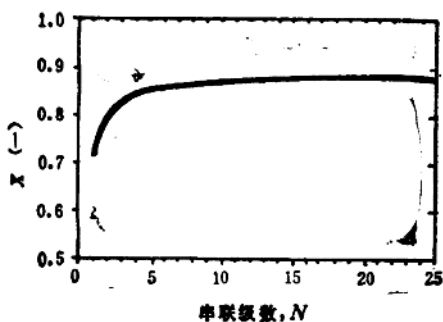


图1.3

```
10 REM PROBLEM-1
20 K=0.5: REM <1/mol/min>
30 F=0.3: REM <1/min>
40 C0= 1: REM <mol/l>
50 REM CSTR(Vs = 1)*N
60 V= 1: REM <1>
70 T= V/F
80 C= C0
90 N= 0
100 GOSUB 400
110 N=N+ 1
120 IFX>= 0.85 THEN 140
```

```

130 GOTO 100
140 GOSUB 500
150 PRINT "FOR  $V_s = 1$ "
160 PRINT " N= " , N, "X>.8500"
170 GOSUB 500
180 REM CSTR*N ( $V_t = 1 \times N$ )
190 V = N
200 PRINT "FOR  $V_t =$  " , V
210 FOR N = 1 TO 25
220 T = V/N/F
230 C = C0
240 FOR I = 1 TO N
250 GOSUB 400
260 NEXT I
270 PRINT "N=" , N, "X=" , LEFT$
      (STR$ (X) , 5)
280 NEXT N
290 GOSUB 500
300 REM PFR ( $V = 1 \times N$ )
310 T = V/F
320 Y = K*T*C0
330 X = Y/(1 + Y)
340 PRINT "FOR  $V_t =$  " , V
350 PRINT "N= infin" , "X=" , LEFT$
      (STR$ (X) , 5)
360 GOSUB 500
370 END

```

```

400 Y = SQR(1 + 2*K*T*C)
410 C = (Y - 1)/(2*K*T)
420 X = 1 - C/C0
430 RETURN
500 PRINT-----

```

```

-----
510 RETURN
RUN

```

```

-----
FOR Vs = 1
N = 5          X > . 8500

```

```

-----
FOR Vt = 5
N = 1          X = .7084
N = 2          X = .7934
N = 3          X = .8253
N = 4          X = .8417
N = 5          X = .8518
N = 6          X = .8585
N = 7          X = .8633
N = 8          X = .8669
N = 9          X = .8698
N = 10         X = .8720
N = 11         X = .8739
N = 12         X = .8755
N = 13         X = .8768
N = 14         X = .8779

```

N = 15	X = .8789
N = 16	X = .8797
N = 17	X = .8805
N = 18	X = .8812
N = 19	X = .8818
N = 20	X = .8823
N = 21	X = .8828
N = 22	X = .8833
N = 23	X = .8837
N = 24	X = .8841
N = 25	X = .8844

FOR Vt = 5

N = infin X = .8928

问题 2 传质和动力学参数计算〔2〕

计算直径为3mm的石墨粒子在流速为 1m/s 的空气中完全燃烧所需要的时间。石墨的密度为 1000kg/m³，灰层内的扩散阻力可以忽略。炉温在1000—1400°C之间。

【分析】

1. 气膜传质系数的计算。

当气体绕流过单个粒子时，有Ranz-Marshall式。

$$Sh = 2.0 + Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (2-1)$$

其中 $Re \equiv d_p u \rho / \mu$, $Sc \equiv \mu / \rho D$, $Sh \equiv k_p d_p / D$

石墨粒径 d_p 和气体流速 u 已知，其余如气体密度 ρ 、粘度 μ 和氧在空气中的扩散系数 D 都是温度的函数。将空气视

为理想气体，密度为

$$\rho = \rho_0(273/T)$$

此处， $\rho_0 = 1.29 \text{ kg/Nm}^3$ ，为空气在标准状态时的 ρ 值。

粘度按 Sutherland 式计算：

$$\mu = \mu_0[(273 + c)/(T + c)](T/273)^{3/2} \quad (2-2)$$

$$c = 1.47T_i$$

空气在273K的粘度和标准沸点分别为：

$$\mu_0 = 0.0616 \text{ kg/(m.h)}$$

$$T_i = 79 \text{ K}$$

氧在空气中的扩散系数及其在标准状态的数值分别为：

$$D = D_0(T/273)^{1.75} p \quad (2-3)$$

$$D_0 = 0.178 \text{ cm}^2/\text{sec}$$

据此，由式 (2-1) 可求出传质系数 k_f 。

2. 化学反应速率常数和总反应速率常数的计算。

根据Hottle等，石墨粒子燃烧反应的速率常数可表示为

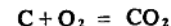
$$k_r = 6.418 \times 10^{11} T^{-1/2} \exp(-44000/1.987T) [\text{m/h}] \quad (2-4)$$

当不考虑灰层扩散阻力时，总反应速率常数为

$$k_t = 1/(1/k_f + 1/k_r) \quad (2-5)$$

3. 计算粒子径变化和燃烧时间。

燃烧反应为：



按上式，对一个石墨粒子作元素碳的物料衡算

$$-\rho_c 4\pi r^2 dr/dt = M_c 4\pi r^2 k_t C \quad (2-6)$$

其中， C ——空气中的氧浓度， (mol/m^3)

ρ_c ——石墨密度， (kg/m^3) 。

M_c 取 0.012 kg/mol 。

在初始条件 $t = 0, r = r_0$ 下积分式 (2-6), 有

$$r_0 - r = (M_c / \rho_c) k_i C t \quad (2-7)$$

该式给出燃烧任意时间后的石墨粒径 r 。

当燃烧终了时, $t = t_f, r = 0$, 代入式 (2-7), 得

$$t_f = (\rho_c / M_c) r_0 / (k_i C) \quad (2-8)$$

【程序及其说明】

计算本题的程序及计算结果在后面给出。根据题目要求, 在 $1000-1400^\circ\text{C}$ 的温度范围内, 以 10°C 为计算步长, 循环运算, 如语句 100—250 所示。程序中的变量多与公式中的同名 (如 DP 与 d_p 、 U 与 u 等)。对少数不同者作说明如下:

RC、RG、EG、DO、CO 分别代表 ρ_c 、 ρ 、 μ 、 D_0 、 C 。

RG(0) 为 RG 在标准态下的数值, 即 ρ_0 。其余类推。

TC 和 T 分别为摄氏温度和绝对温度。

计算结果示于图 2.1。

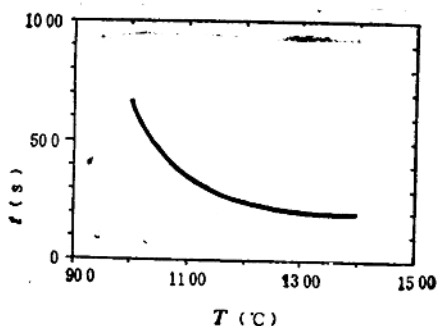


图 2.1

10 REM PROBLEM—2

```

20 DP = 0.003:REM <m>
30 RC = 1000:REM <kg/m3>
35 MC = 12: REM <kg/m2>
40 U = 1: REM <m/s>
45 P = 1: REM <atm>
50 RG(0) = 1.29: REM <kg/m3>
60 EG(0) = 1.71E-4:REM <N*s/m2>
70 CO(0) = 0.21/22.4: REM <kmo1/m3>
80 DO(0) = 0.178E-4: REM <m2/s>
90 C = 1.47*(273 - 194)
95 PRINT
100 PRINT "TEMP. °C", "TIME, sec"
110 FOR TC = 1000 TO 1400 STEP 10
120 T = TC + 273
130 RG = RG(0)*273/T
140 EG = EG(0)*(C + 273)/(C + T)*(T/273)^1.5
150 DO = DO(0)*(T/273)^1.75*P
155 CO = CO(0)*273/T
160 RE = DP*U*RG/EG
170 SC = EG/RG/DO
180 SH = 2.0 + 0.6*RE^0.5*SC^0.3333
190 KF = SH*DO/DP
200 KR = 6.418E11 * EXP (- 44000/1.987/T)/
      SQR(T)/3600:REM <m/s>
210 KT = 1/(1/KF + 1/KR)
220 TF = RC/MC*DP/2/KT/CO
240 PRINT TC, LEFT$(STR$(TF), 5)

```