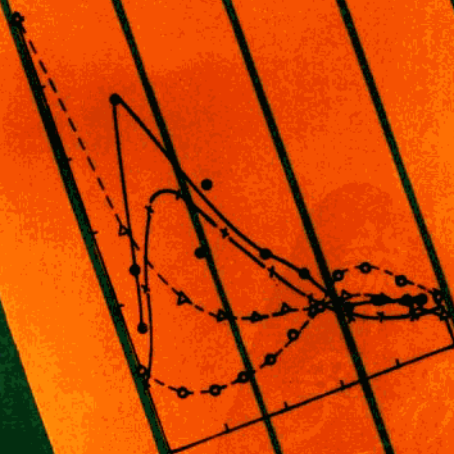


张玉柱 艾立群 著

钢铁冶金过程的 数学解析与模拟



冶金工业出版社

前 言

本书是作者对十几年来教学、研究成果进行整理的结果。

现代冶炼理论使钢铁冶金从单纯的技艺走向科学,金属学、冶金过程热力学与动力学、冶金过程传输理论被称为支撑这一科学的三大支柱。但是,冶金过程的极端复杂性使得这些理论在实际生产中的应用受到很大的局限。冶金炉内变化万千,气、固、液多相并存,动量、能量、质量三传耦合发生,并且为封闭、高温体系。这些特点,使得人们长期以来不得不靠半经验半仪表进行操作,基于各种定律与原理导出的各种方程,以及由这些方程组合而成的数学模型,由于难以求解,只能定性地用于分析指导生产。近年来,随着现代计算技术的飞速发展,为解析这些方程和数学模型提供了工具,也使得利用这些数学模型直接控制冶金炉的生产成为现实。这样,研究冶金过程数学模型的建立与解析也就显得十分重要。

冶金数学模型可分为机理模型、推理模型和经验模型几大类。

机理模型是依据基本定律和原理推导而来的,例如,依据质量守恒定律建立的物料衡算方程;依据能量守恒定律建立的热平衡方程;依据冶金热力学原理建立的化学反应平衡方程;依据冶金动力学原理建立的化学反应速率方程;依据传输原理建立的三传(动量传输、能量传输、质量传输)方程。由这些基本方程可根据需要推演出许多数学模型,简单的如双膜理论、表面更新理论、未反应核模型等;复杂的如气流控制模型、炉体状态判断模型等。

推理模型是靠数学推理而来的,根据冶金原理虽可知道冶炼过程中各工艺参数间所存在的关系,但由于冶炼操作过程的动态复杂性,常无法确定各因素间的相关定量关系。为解决这一问题,人们利用数学方法,如线性规划理论、模糊数学和灰色理论,选定目标函数、约束条件和主要变量,对已有的大量数据进行处理,确

定各因素间的相关系数,经过筛选,得出冶炼过程的优化模型。

经验模型是根据专家在冶炼实践中积累的大量经验而建立的计算机软件系统,也称冶炼专家系统。它是根据计算机科学中的专家系统与神经网络原理,依靠由冶炼专家经验和知识建立起来的知识库,靠推理系统对一次仪表采集来的信号进行处理,模拟冶炼专家解决冶炼过程中出现的各种复杂问题,从而对生产过程进行控制。

数学模型近几年来发展很快,形成了一套比较系统的理论,相当一部分模型已经用于生产实践,并取得了较好的效果。本书不可能将所有数学模型全部罗列出来,只是着重介绍了建立数学模型的基础知识和方法,作为例子介绍了几个较重要模型的建立与解析,因此内容带有方法论的性质。

本书前三章是基础部分,包括数学模型概论、钢铁冶金过程问题的数学描述及模型的数值计算。后六章分别结合钢铁冶金中的五个典型过程,具体论述了钢铁冶金过程数学模型的建立、各类参数的处理、数值方法及相应结果,并对各子过程数学模型的发展与现状、分类与比较给予了较多的关注。

本书的特点是,根据建立数学模型的需要,集中各学科要点,初学者可收到事半功倍之效。

本书可作为有关研究人员和工程技术人员的参考书,亦可作为研究生或本科高年级学生选修课的教材。

在本书的形成过程中,作者得到了东北大学师长们的关怀和指导,得到了河北理工学院钢铁冶金教研室、数学教研室、计算机教研室同仁们的帮助和支持,在此一并深致谢意。

由于作者学识有限,书中难免有疏漏谬误之处,期盼读者批评指正。

作 者

1997年4月

目 录

1 绪论	(1)
1.1 过程模拟与数学模型	(1)
1.2 数学模型的分类	(2)
1.3 数学模型的一般特征	(4)
1.4 建立数学模型的一般步骤	(6)
参考文献	(10)
2 钢铁冶金过程问题的数学描述	(11)
2.1 控制体与坐标系	(11)
2.2 通量微分衡算方程	(13)
2.3 控制方程的具体形式	(20)
2.4 流体湍流模型	(27)
2.5 电磁流体力学基本原理及解析	(31)
2.6 气—固相间传输的数学描述	(39)
2.7 流体—流体相间传输的数学描述	(58)
参考文献	(65)
3 控制方程的数值解析	(67)
3.1 数值计算基础	(68)
3.2 有限差分法	(74)
3.3 有限元法	(88)
参考文献	(93)
4 烧结过程数学模型	(95)
4.1 烧结过程水分传输模型	(95)
4.2 烧结过程物理化学现象的数学描述	(103)
4.3 烧结过程一维非稳态模型	(113)
参考文献	(119)
5 高炉炼铁过程数学模型	(121)

5.1	高炉一维稳态数学模型	(122)
5.2	高炉二维装入物料分布模型	(147)
5.3	煤气流分布二维模型	(151)
5.4	固体料流数学模型	(171)
5.5	化学反应模型	(175)
5.6	热量传输模型	(182)
5.7	液体流动模型	(184)
	参考文献	(188)
6	里斯特操作线模型	(190)
6.1	里斯特操作线模型基础	(190)
6.2	高炉喷吹的过程分析模型	(194)
	参考文献	(222)
7	转炉炼钢过程数学模型	(223)
7.1	LD 转炉静态数学模型	(223)
7.2	LD 转炉炼钢的动态模型	(233)
7.3	复吹转炉反应模型	(241)
	参考文献	(256)
8	钢包冶金数学模型	(257)
8.1	吹气搅拌钢包流况数学模型	(257)
8.2	准单相模型及其应用	(265)
8.3	欧拉模型	(273)
8.4	拉格朗日模型	(276)
8.5	数学模型间的比较	(279)
	参考文献	(281)
9	连续铸钢过程数学模型	(283)
9.1	中间包流况数学模型	(283)
9.2	连铸坯凝固过程热传输模型	(292)
9.3	连铸坯凝固过程耦合模型	(309)
	参考文献	(317)

1 绪 论

数学模拟技术和数学模型的开发是当前冶金领域的研究热点之一。由于其能够对冶金过程作出定量描述,因此在现有工艺过程优化和过程控制以及新工艺开发方面,已日益成为不可缺少的有力工具。这里就数学模型的相关概念、数学模型的作用、分类以及建立数学模型的步骤等内容做简单介绍。

1.1 过程模拟与数学模型

过程是指实际生产中的一个相对独立的物质处理单元。过程模拟则是对某一过程的全部或部分现象以某种方式所作的再现,而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等。钢铁冶金过程的数学模拟,就是指以数学方式(利用数学模型)来再现钢铁冶金过程中的诸现象,反映冶金过程的真实特征和本质。数学模型则是关于对过程有影响的各种因素间定量关系的一系列代数的或微分表达式(方程式或方程组)。它可以用于反映和预测某些过程现象。模型这一术语本身就说明它所反映的关系可能不是十分精确的,而源于该模型的预测只能是近似的。

数学模型的开发和应用源于 60 年代末,但只是在近些年,随着计算机技术飞速发展,模型方程的解算问题才得到了更好地解决。现在,数学模型的研制与开发工作已取得了相当大的进展。从近期开发的数学模型情况来看,它们大多是以冶金反应机理和传输理论为基础,以经验或半经验关系式和数据为补充,以数值计算方法为手段,以运行速度不断提高的计算机为工具,以过程预测、优化、过程控制和新工艺开发为目的的机理型模型。基于神经网络、模糊控制的(预报—控制型)专家系统模型近几年发展得也相当迅速。

提到数学模拟和数学模型,就有必要在这里对物理模拟和物

理模型作出说明。数学模拟和物理模拟是过程模拟的两大类别,后者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拟研究过程的某些特性,它是通过在物理模型上直接实验来实现的。数学模型和物理模型之间可以相互补充,即一方面,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;另一方面,物理模型也需要数学模型对其结果规律化、系统化。

1.2 数学模型的分类

1.2.1 舍克里分类法

按舍克里⁽¹⁾给出的分类方法,冶金过程的数学模型可分为以下几大类别:

(1)机理模型或理论模型,这类模型是以冶金过程的传输机理和反应机理等为基础,依据基本物理、化学定律(如热力学平衡、冶金动力学、冶金过程的传热、传质、流体流动、应变等)建立起来的,对冶金过程现象的数学描述式一般为偏微分方程,其求解方法常常是结合相应的边界及初始条件作数值计算。这类模型中的某些参数或系数可能是未知的,常常要从系统数据中计算出来或采用经验常数。这类模型具有在较宽广泛的领域中应用的有效性和灵活性。也有人认为,应将机理模型中包含有经验假设或经验关系的模型称为半经验模型,这样余下的模型便可称为理论模型。

(2)经验的或黑箱型模型,这类模型的建立是以对某一具体系统的考察结果而不是以基本理论为基础的。一般是在过程机理不详的条件下,人们将生产、实验数据拟合为表征各参数与其影响因素间的相互关系。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,且由于它不能揭示过程的机理和本质,因此只适于在过程本质不详的情况下用来作为一种变通的研究手段。以过程控制为目的的专家系统中包含了知识的表达,而无论是以冶金专家的经验 and 知识的方式,还是以人工神经网络模型的方式

式,这类模型都是对过程机理不详的“黑箱”模型。

(3)群体—衡算模型,它用于描述过程的分布特征,处理过程的分布型参数。这类模型在钢铁冶金过程中应用得很少。

1.2.2 其他分类法

研究问题的角度不同,对数学模型的分类也不相同。比如,按过程状态分,数学模型可分为静态模型、动态模型;按空间变量随时间变化与否可分为稳态和非稳态模型;按变量随机变化的属性分,可分为确定性和非确定性模型等等,具体简述如下:

(1)静态模型和动态模型,前者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。鉴于冶金过程的复杂多变,该类模型的误差较大。动态模型则考虑参数在冶金过程中的变化,因此,它能够用来较准确地确定初始、终了和冶金过程任一时刻的过程状态参数值。

(2)稳态模型和非稳态模型,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,或对于一般连续作用的过程,即使参数有某些波动,也可以将过程近似为稳定态来处理,前者是忽略了时间变化,而后者则是采用了对变量做时间平均的方法。

(3)确定性模型和非确定性模型,确定性排除了变量变化的随机性,因此,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。

另外,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。集中参数模型忽略空间上性质或状态的差异,其描述方程是常微分方程;分布参数模型需要用偏微分方程描述系统中的性质或状态在空间上的变化。

1.3 数学模型的一般特征

1.3.1 数学模型的作用

图 1-1⁽²⁾ 给出了数学模型在钢铁冶金过程中的作用示意图。数学模型通过对数学表达式的量化,在过程控制和过程优化中起着关键性的作用。在方案设计、测量结果的整理方面亦是如此。另外,数学模型也是人工智能(也许叫基于知识的工程学更好)的知识库的主要来源之一。

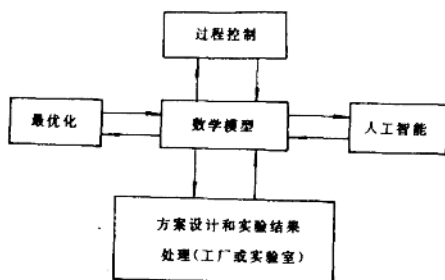


图 1-1 数学模型在钢铁冶金中的作用

无论是过程控制还是过程优化都需要量的反映。过程优化寻求最大收益或最低成本;而过程控制则需要为控制规则提供量化关系。并且,过程控制要求计算过程尽可能迅速,以便在实时控制中给予及时的响应。正因如此,控制算法常常需要对机理模型进行大幅度的简化。

设计试验方案和整理试验结果,对于建立数学模型来说也许是最为重要的却常常最易被误解的两个方面。建立数学模型时,首先要进行一般的试验测量,然后经过研究分析提出模型的一些具体形式,但这必须以测量处理方法妥当为前提,同时还需要进行必要的计算。

前面介绍物理模型时已谈到它与数学模型的关系。在这里,还需强调现场实测的重要意义,即计算和现场实测不能互相替代,且

二者常常与物理模型相互补充、相互验证,三者皆是从不同角度走向物理真实,并最终_以数学方式表达这一真实的不可缺少的工具。

在已有工艺过程和新工艺开发方面,数学模型的具体作用有:

(1)有助于人们深刻了解过程的性质和过程变量间的相互关系。

(2)在进行工艺优化时可用于了解和探讨改变操作参数时的冶金效果。

(3)可用于探讨设备参数对冶金过程及其效果的影响,从而为改进、优化冶炼设备提供依据。

(4)可用于评价和设计工业试验;

(5)以数学模型为工具可以实现生产过程判断和过程自动控制。

在新工艺开发方面,数学模型可发挥如下作用:

(1)估计过程的可行性。

(2)规划实验室规模试验。

(3)为半工业试验及其放大提供参考和进行估价。

1.3.2 数学模型的优越性

数学模型有如下优越性:

(1)经济性,与其他方法相比,数学模型可以以相当快的计算速度用于过程研究,且成本很低。尤其是对于钢铁冶金这样的高温复杂过程,实验研究费用要比数学模拟所花费的高出几个甚至十几个数量级。

(2)资料系统详尽,数学模型的计算结果是详尽而完备的资料,它可以提供过程有关变量在空间和时间域内任一点的值。

(3)具有模拟极端条件的能力,它可以帮助确定临界操作条件,模拟生产中或试验中不能实现的、极端操作条件下的生产过程。

(4)它是过程控制的基础,在过程预测和在线控制方面,数学模型具有绝对优势。

1.4 建立数学模型的一般步骤

建立数学模型并没有通用的方法论,鉴于被描述对象各自的特殊性,问题的性质不同,甚至是对同一问题分析方法和观察问题的角度不同,所建模型是各不相同的。图 1-2 给出了建立完整数学模型所要经历的几个主要阶段,即初步研究阶段、物理现象的数学描述阶段、编制求解程序阶段、实验研究阶段、模型计算及验证阶段等。

1.4.1 初步研究

初步研究阶段的任务是明确模型开发的具体目的、研究过程问题的物理特性,并对过程问题进行分类。如有必要,还要研究与子过程及各个子过程之间的关系。该阶段还包括资料整理工作等。

1.4.2 对问题的数学描述

在这一阶段里要完成以下几个主要任务:(1)过程模化;(2)子过程解析;(3)建立控制方程;(4)给出各种辅助性关系、经验关系和条件方程(边界条件、初始条件、状态方程等)等。

由于冶金问题固有的复杂性,对真实现象直接给予全面的数学描述几乎是不可能的。研究人员总要“挖掘”出一个反映问题关键变量和参量的“映像”,然后才能以适当的数学形式把这一映像表达出来。而该“挖掘”过程即是对真实物理过程的适当简化和对过程的分解。过程简化与子过程解析是密切相关、互为基础的,下面我们分别对这两者给予说明。

简化过程又称为过程模化。简化是进行数学描述的必备前提。“适当”简化就要求简化后所构造的模型尽可能反映拟研究问题的

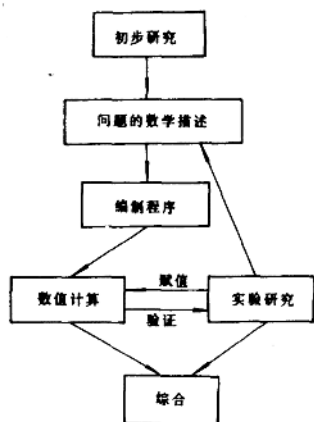


图 1-2 建立数学模型的几个阶段

关键性本质特征和规律,而简化的合理性并不仅仅取决于这一等效性,过程模化还应当遵循如下原则:简化要满足应用的要求——具有适用性;简化要适应现有的计算能力——具有可行性;满足等效性前提下尽可能简化——具有经济性,等等。过程模化中可能涉及的主要问题有:模型种类的选择;计算域的确定;各种传输现象之间的耦合;坐标系的确定;空间变量和时间变量的选择,……。

对复杂过程或问题的分析往往要涉及到子过程,子过程对整个过程的贡献及各个子过程本身的本质特征的描述都要通过子过程的解析来完成。过程分解和子过程解析可使原本复杂的问题变成几个较单纯的问题,从而便于用有关理论去分析、表达冶金过程。

数学方程是数学模型的核心部分,它所要完成的主要任务是对“挖掘”出来的“映像”作具体的表达。经过以上步骤之后这一步骤的进行并不困难。数学模型中以传输类模型居多,而其核心就是一组控制方程,并辅之以相应关系、条件。

控制方程是在子过程解析的基础上根据化学反应和物理学守恒定律建立起来的一组质量、动量、能量的衡算方程式。这种衡算更常见的是针对体积微元而不是整个系统,这就要求对研究对象作空间域和时间域上的微元划分(微元划分方法一般是由拟采用的数值离散化方法决定的)。关于微元划分请读者参见本书第3章中“有限差分法”和“有限元”两部分内容,衡算方程的具体形式和内容参见本书第2章。数学模型中控制方程的具体表达式是由描述各个子过程或各种基本现象的构造单元构成的。钢铁冶金数学模型常见的构造单元如表1-1所示,将在第2章作具体说明。

控制方程的辅助性关系式也是构成完整的可解数模的不可缺少部分,主要关系式包括:

(1)各种传输系数(粘度、热导率、扩散系数等)与浓度、温度、压力间的关系式。

(2)涉及化学反应问题时反应速率与温度、浓度、流动之间的关系式。

表 1-1 数学模型的构造单元(building blocks)

构 成	应 用	备 注
纳维—斯托克斯方程	流体流动	矢量—张量变换;与连续方程同时解
傅里叶定律	热传导	包括相变时复杂;扩散型
菲克定律	扩散	多元系统复杂;扩散型
牛顿定律	动量传输	扩散型速率项
对流传热	传热、传质	传热、传质与流动耦合;对流项
麦克斯韦方程	电磁流体力学	非常复杂
热力学	相图、平衡	通常为计算的子程序
动力学	反应速率	需实验介入
结构关系	应变过程	复杂,需真实数据

(3)涉及湍流流动时选用的湍流模型。

(4)描述气体行为时的状态方程。

求解数学模型所需条件方程包括边界条件和初始条件(非稳态问题)。对于非稳态问题,需给出一初始条件,而边界条件的个数由导数阶数和个数来确定,一般一个 n 阶导数需要 n 个边界条件。

1.4.3 程序设计

数学模型和边界条件给出之后,就可以进行解析运算。但能用解析法求解的冶金问题较少,通常要采用数值计算求解。为此而进行的程序设计包括算法选择、程序编制及调试等,这一部分内容参见第3章。

1.4.4 实验研究

实际上,实验研究可以与数学描述或程序设计平行进行,它的作用就是为粘度、热导率及电导率、反应速率常数等等赋予适当的值,而这些值应该是现有文献中没有(或非公认)的。另一方面,实验(的一部分)又可以与第1.4.5步平行进行,这时其主要作用是验证模型预测结果从而验证数学模型的等效性。

1.4.5 数值计算与验证

数值计算即是指计算的实施。所谓验证是指数学模型的运行

结果与实验结果之间的比较,而这两者之间的差异可能源于模型本身,也可能属于程序问题,更可能是由于实验方法方面的问题。因此,从这个意义上看,验证是在三者之间互相进行的,但我们在

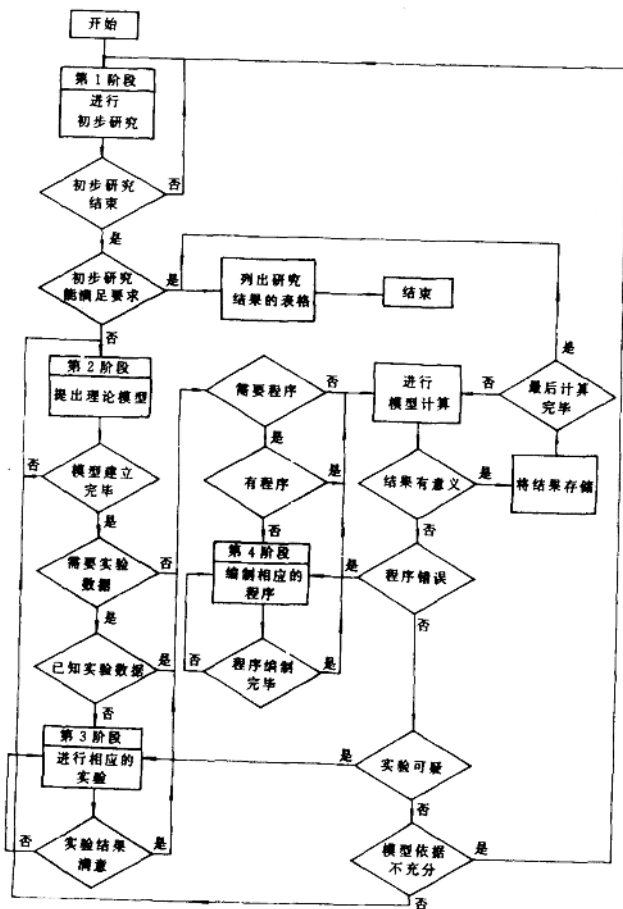


图 1-3 数学模型的建立过程

这里更强调实验对数学模型及求解程序的验证。

1.4.6 综合

综合阶段包括对数学模型建立过程进行总结,利用模型对工艺过程做出分析,提出改进措施,安装新的控制系统,等等。

上面介绍的是建立数学模型的一个循环过程中的几个主要阶段性步骤,但针对某一问题建立数学模型则往往需要多次循环。建立数学模型的典型流程图见图 1-3^[3]。当模型预报结果与实验(或实测)结果相一致时,数学模型的建立工作便告基本完成,余下便是总结和具体实施了。

参 考 文 献

- [1] J. 舍克里等,金属初级加工过程的数学和物理模型,冶金工业出版社,1992,第 13 ~14 页。
- [2] Szekely, J., *Met. Trans.*, **19B**(1988), 527。
- [3] 肖兴国,冶金反应工程学,东北工学院出版社,1989,第 114 页。

2 钢铁冶金过程问题的数学描述

这一章内容主要涉及数学模型建立过程中的第二个阶段,即如何用数学表达式来描述过程问题。

数学模型中的数学表达式可能是代数方程组,也可能是微分方程组。前者相对简单,而后者在数学模型中占绝大多数,且其控制方程的建立以及模型的数值计算都相当复杂。这一章中我们将以讨论传输类数学模型为主。本章具体内容包括冶金传输基础及利用构造单元构成传热、传质及能量传递问题的衡算方程——控制方程。

2.1 控制体与坐标系

所谓控制体是指建立衡算方程时的衡算单元(对象)。当取整个体系为控制体时,无法分析内部变量的分布情况,而只能分析体系整体的宏观衡算。因此,取微元体为控制体更为常见。

微元体形状与取法应当与选定的坐标系一致,这样便于进行衡算。这就要求在确定微元体之前首先确定坐标系以及空间维数。

有时为了解析流体中固体的运动和流体的波动,以及追踪流场内个别质点的运动过程,要采用同步运动的移动坐标系——采用拉格朗日描述法;如果要研究整个流场内不同位置上流体质点流动参量随时间的变化,就要采用固定坐标系——欧拉法。前者常被用于固体,而研究流体时,由于它可能产生大的变形,因此采用欧拉法更为方便。在采用欧拉法时,我们感兴趣的物理量 f (可代表压力、温度、速度、密度等)不仅要随时间变化,且也与 t 时刻的空间位置有关。在一维流动条件下,质点流速为 u 时,有

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} \quad (2-1)$$

而在拉格朗日方法中,

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \quad (2-2)$$

如将式 2-1 拓展到三维,略去变量不写,则有

$$\frac{D}{Dt}(\quad) = \frac{\partial}{\partial t}(\quad) + u_x \frac{\partial}{\partial x}(\quad) + u_y \frac{\partial}{\partial y}(\quad) + u_z \frac{\partial}{\partial z}(\quad) \quad (2-3)$$

式 2-3 被称作质点导数或斯托克斯导数,它是某一个参量沿流体质点运动轨迹对时间的导数。关于欧拉法和拉格朗日法的具体应用,我们将在第 8 章中具体介绍。质点导数(亦有人称其为随体导数)的概念很重要,我们可以利用质点导数直接由欧拉坐标下的方程式写出描述方程的拉格朗日形式。

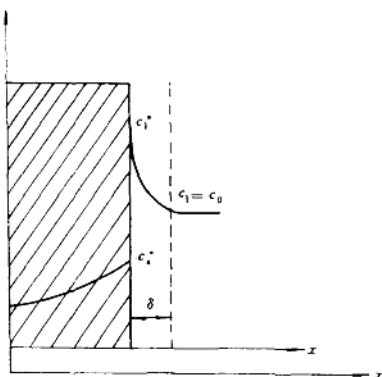


图 2-1 钢液凝固前沿边界层内浓度分布

现在我们来分析图 2-1 所给出的例子。钢液以凝固速度 R 进行单向凝固,凝固前沿存在浓度边界层,浓度边界层内溶质浓度分布在固定坐标系 X' 下满足

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x'^2} \quad (2-4)$$

如将其转化为移动坐标系 x 下的表达式,则可将式 2-4 代入质点导数式 $\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + R \frac{\partial c}{\partial x}$ 中,得

$$\frac{Dc}{Dt} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + R \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2-5)$$