

Pomen matematičnega modeliranja pri študiju jeklarskih procesov

The Role of the Mathematical Modelling by the Study of Metallurgical Processes

B. Koroušič, *Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, Lepi pot 11, Ljubljana*

Razvoj sofisticiranih matematičnih modelov, ki koristijo računalniške baze podatkov s številnimi termodinamičnimi podatki predstavlja danes močno raziskovalno orodje za napovedovanje lastnosti žilindrih sistemov.

Model žlinder—GEMM, razvit na IMT-Ljubljana, omogoča točen opis različnih večfaznih ravnotežij in spremljanje pojavov v sistemu plin-kovina-žlindra.

V današnjem stanju, model GEMM omogoča točen opis termodinamičnih aktivnosti komponent v žilindrinem sistemu: $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$. Kot ilustracijo možnosti modela navajamo rezultate izračunavanj v sistemu $\text{C} + \text{O}$, ki jih nato primerjamo s eksperimentalnimi rezultati.

The development of sophisticated mathematical models in association with computer data bases containing assessed thermodynamic data is today powerful tool for the prediction of the behaviour of the slag systems properties. The slag model GEMM developed at IMT-Ljubljana provides an accurate description various multiphase equilibrium and monitoring metal-gas-slag treatments.

In its present state, the model GEMM provides an accurate description of the thermodynamic component activities at slag-metal equilibrium of the system: $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$.

As an illustration of performances of the model, the prediction of the gas-reactions in the system $\text{C} + \text{O}$ obtained with the present model was compared to investigation results.

1 Uvod

Danes nihče več ne dvomi, da je napredek na tehničnem področju proizvodnje jekla mogoče doseči le s kombinacijo sodobne metalurške opreme in profesionalne uporabe tehnološkega znanja z računalniško informativnim servisom. Zaradi zaostrenih pogojev in občutljivih tržnih mehanizmov na področju prodaje jekla in ostrega zasuka od masovne proizvodnje na proizvodnjo za znanega kupca morajo proizvajalci jekel nenehno misliti na naslednje pogoje:

- zahteve po minimalni specifični porabi energije
- zahteve po vnaprej definiranem nivoju kvalitete in cene jekla
- zahteve po čistem okolju

V sodobni jeklarski praksi doživlja največji razmah ravno razvoj matematičnih modelov (bolj točno ekspertnih sistemov) in sicer tako na področju primarne izdelave jekla (konvertorski postopki) kakor tudi na področju rafinacije in litja jekla.

Osnovni cilj pri razvoju matematičnega modela nekega procesa je, da se opišejo zakonitosti in faze procesa, pri čemer je prenos mase in energije najpomembnejši. Začetno fazo razvoja matematičnega modeliranja procesov karakterizira določena zaprtost, kar daje parcialne rešitve za analizirani problem.

Danes se pri razvoju matematičnih modelov uporablja neprimerno širši prostor in kompleksni interaktivni sistemi, ki povezujejo različna raziskovalna področja: od

uporabe računalniških baz podatkov in profesionalnega software do vključevanja know-how doseženega s tehnološkimi raziskavami.

Namen članka je predstaviti razvoj matematičnega modeliranja na IMT v Ljubljani pri študiju nekaterih jeklarskih procesov kot je dezoksidacija jekla, izbira optimalne sestave žlindre za doseganje nizkih vsebnosti žvepla ter pri kontroli nekovinskih vključkov.

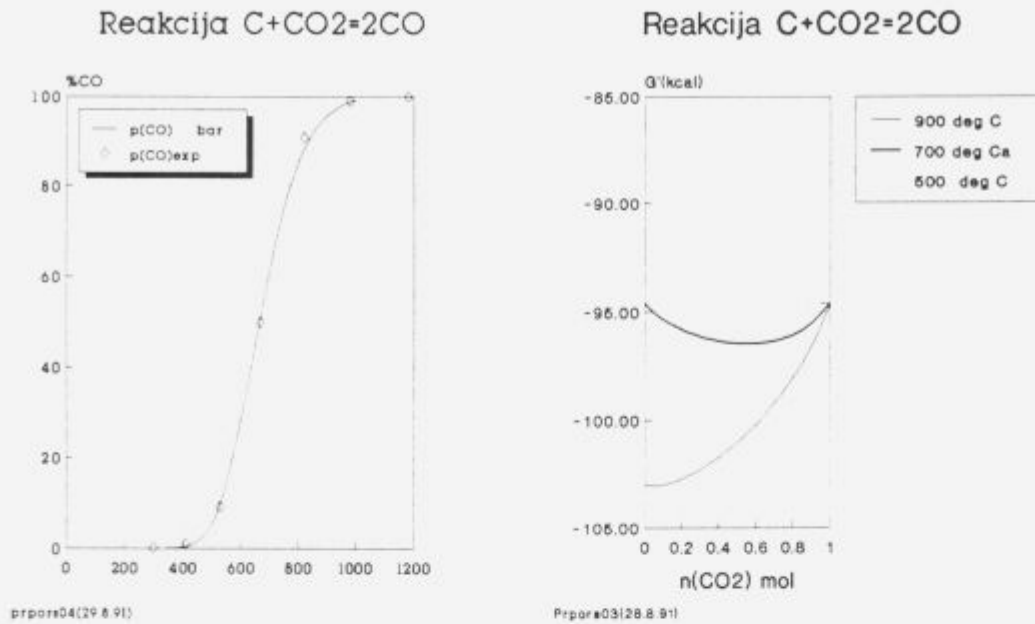
2 Kratek pregled razvoja matematičnih modelov in baz podatkov v svetu

Pregled literaturnih virov kaže, da so se v zadnjem desetletju izoblikovale tri smeri na področju razvoja matematičnih modelov:

- razvoj aplikativne programske opreme za vodenje procesov,
- razvoj modelov za izračunavanje termodinamičnih lastnosti kompleksnih sistemov, računalniške simulacije zlasti na področju strjevanja in prenosa mase in toplote,
- razvoj integralnih baz podatkov.

Na sliki 1 vidimo kratek pregled sodobnih integralnih baz podatkov, med katerimi so nekateri svetovno znani programski paketi za kompleksna izračunavanja kompleksnih metalurških procesov.

Pomembno je poudariti silen razmah na področju združevanja aktivnosti v različnih državah in hitrega obveščanja med različnimi raziskovalnimi skupinami.



Slika 2. Termodinamična analiza sistema $C_{(gr)} + CO_{2(g)} = 2CO_{(g)}$.
 Figure 2. Thermodynamical analysis of the system $C_{(gr)} + CO_{2(g)} = 2CO_{(g)}$.

ITD

Integrated Thermochemical Database

CSIRO(Australija) FACT(Kanada) KSC(Finška) MANLABS(IZDA) MTDATA(Anglija) THERMOCALC (Švedska) THERDAS(Nemčija) THERMODATA(Francija)	SGTE Scientific Group Thermodata Europe
Reakcijske enačbe ----- Toplinske bilance ----- Ravnotežne sestave -----	Izračun ΔH & ΔG ravnotežne konstante parni tlak potenciala ----- Masne in toplotne bilance za eksperimentalne in labor podatke ter industrijske procese ----- Teoretično pričakovane ravnotežne sestave Grafično ponazoritev rezultatov Gibbsova energetska minimizacija

FRPORS06(2 9 91) #A29

Slika 1. Pregled integralnih termokemijskih baz podatkov in programske opreme za kompleksna metalurška izračunavanja.

Figure 1. A review of the integral thermochemical data base and software for the complex metallurgical calculations.

Posebno izstopa združenje SGTE (Scientific Group Thermodata Europe), ki trenutno povezuje skoraj vse razvite države Evrope in je zelo aktivno na vseh mednarodnih srečanjih.

Razvoj sodobnih ekspertnih sistemov sloni na kombinaciji učinkovite uporabe empiričnega inženirskega znanja podprtega s teoretičnim znanjem, pri čemer so najpomembnejši prav matematični modeli.

3 Razvoj matematičnega modela za študij metalurških reakcij

Teoretične osnove metalurške termodinamike so zelo dobro poznane, njihova uporaba se je še pred desetimi leti omejevala na specifične probleme optimizacije nekaterih jeklarskih procesov. Razvoj računalniške tehnike in dostopnost do različnih baz termokemijskih podatkov sta omogočila nesluten razvoj matematičnih modelov za najrazličnejše metalurške procese.

Pred približno 10 leti se je pričel razvoj metalurškega procesnega inženirstva (MPI), ki izhaja iz termodinamične napovedi poteka reakcij v realnih pogojih.

Skupno za skoraj vso dosedaj razvito programsko opremo (kot so THERMOCALC, CHEMSAGE, FACT) je uporaba univerzalnega Gibbsovega principa o minimizaciji energije, ki ga na kratko želimo predstaviti na enostavnem primeru¹.

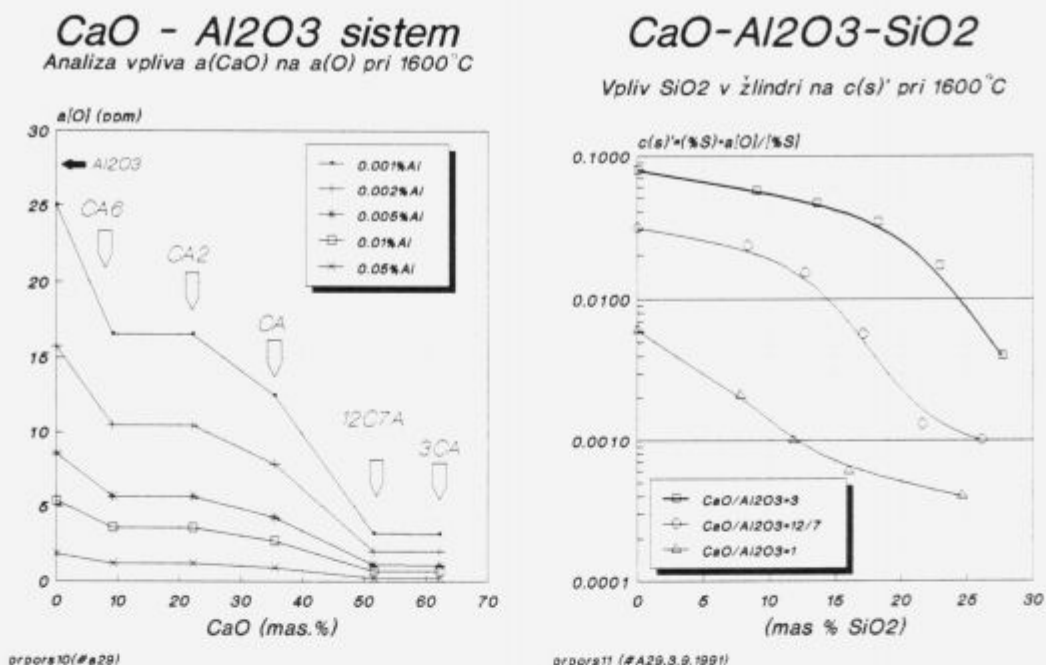
4 Gibbsov princip minimalne energije

V sistemu, ki sestoji iz različnih plinskih, tekočih in kondenziranih faz, nastopi termodinamično ravnotežje takrat, ko sistem doseže minimalno prosto energijo (Gibbsov princip). Čim uporabljamo več kot dve komponenti v sistemu, postanejo izračunavanja ravnotežnih sestav izredno zahtevna, če ne povsem nemogoča naloga. Iskanje rešitev za kompleksnejše sisteme je možna le z uporabo ustreznega računalniškega programa. Zaradi obsežnosti teme bomo skušali na enostavnem primeru pokazati univerzalnost Gibbsove metode.

Oglejmo si znano reakcijo:

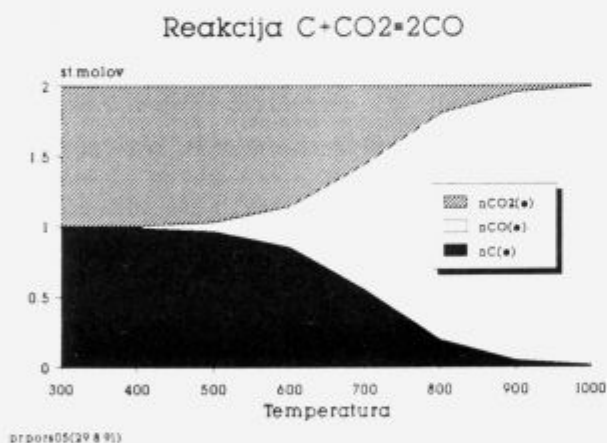


ki se uporablja pri študiju redukcije rud in pri plinski cementaciji jekla. Termodinamična analiza te reakcije nam



Slika 4. Študij vpliva sestave žlindre na dezoksidacijo in razžveplanje jekla pri T 1600°C.

Figure 4. Influence of the chemical composition of the slag on deoxidation and desulphurisation of molten steel by the temperature 1600°C.



Slika 3. Bilanca reakcijskih produktov za reakcijo $C_{(g)} + CO_{2(g)} = 2CO_{(g)}$.

Figure 3. Balance of the reaction products for the reaction $C_{(g)} + CO_{2(g)} = 2CO_{(g)}$.

pokaže, da pri konstantnem tlaku npr. $p = 1$ bar, tvorba CO poteka tem intenzivneje, čim višja je temperatura v sistemu (slika 2). Leva stran slike 2 kaže znano odvisnost P_{CO} v funkciji temperature in desna stran Gibbsovo prosto energijo sistema pri treh temperaturah (500, 700 in 900°C). Pri uporabi matematičnega modela računalniški program najprej izračuna celotno energijo sistema in nato diferencira krivuljo $G' = f(T, n_{CO_2})$, poišče minimum in sestavi ravnotežno bilanco sistema.

Na sliki 3 vidimo primer bilance števila molov reakcij-

skih produktov za opisano reakcijo kot funkcijo temperature. Na analogen način se izvaja termodinamična analiza kompleksnejših sistemov, kar je posebno koristno pri študiju industrijskih jeklarskih žlinder in simulaciji določenih procesov.

5 Osnove matematičnega modeliranja žlinder s programom GEMM

Matematični model GEMM (dosežena le 1. stopnja razvoja) sloni na opisanem principu Gibbsa o minimizaciji energije sistema¹. Zahvaljujoč močni bazi termodinamičnih podatkov, ki vsebuje proste energije za številne oksidne sestave, program na osnovi izbranih robnih pogojev izbere ustrezne termodinamične podatke, pri čemer mora zadostiti masni bilanci vseh udeležencev v sistemu in nato z metodo iteracije poišče ravnotežno sestavo v celotnem sistemu². Nasledni korak je, da iz parcialnih termodinamičnih vrednosti izračuna termodinamične aktivnosti tekočih oksidnih komponent. Dobljene termodinamične vrednosti lahko uporabljamo pri kompleksnih izračunavanjih npr. pri študiju dezoksidacije in modifikacije jekla (slika 4a) z aluminijem v prisotnosti aluminatne žlindre ali analiziramo vpliv sestave žlindre na porazdelitev žvepla med tekočim jeklom in žlindrino fazo (slika 4b)³.

6 Literatura

- 1 Koroušič, B.: Fundamental thermodynamic aspects of the $CaO - Al_2O_3 - SiO_2$ system, Steel Research 62 (1991) No. 7, s. 285-288
- 2 Koroušič, B.: Predicting oxide activities in $CaO - Al_2O_3 - SiO_2$ system by computer, H.T.M.P. VII, Orleans, June 17-20 (1991)
- 3 Koroušič, B.: Vpliv sestave žlindre na dezoksidacijo, razžveplanje in tvorbo vključkov v sodobnih jeklarskih agregatih, BQ 25, št. 3 (1991), s. 77-81.