

CFD-Modellierung in der Feuerfestindustrie

Andreas Filzwieser, Oliver Zach, Stefan Wallner, Johann Kleicker

1 Einleitung

Heutzutage ist der Einsatz mathematischer Modellierungen in der Feuerfestindustrie weitreichend.

Die FEM-Berechnungen (finite element method) werden z.B. zur Bestimmung der Spannungszustände im Stahlmantel als auch in der feuerfesten Ausmauerung (ff-Ausmauerung) verwendet. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Vorgänge im Mauerwerk während des Aufheizens der Aggregate bzw. auf die Veränderung der Zustände im Mauerwerk während des Betriebes gegeben durch Infiltration von Metall und Schlacke und durch den Verschleiß gelegt.

Mit Hilfe dieser Methode werden auch stationäre und instationäre Wärmedurchgangsberechnungen durchgeführt. Die Resultate und Erkenntnisse dieser Berechnungen haben direkten Einfluss auf die Dehnungsvorgaben der feuerfesten Zustellung.

Die Lattice-Boltzmann Modellierung [1 2] - sie beruht auf der Lösung einer diskreten kinetischen Transportgleichung einer Teilchendichteverteilung – wird für die Untersuchung der Vorgänge während der Infiltration von Metall und Schlacke in die Poren der feuerfesten Produkte eingesetzt.

Einen wesentlichen Einfluss auf die Lebensdauer der Ofenausmauerungen hat die Prozessführung und die Prozesskontrolle in den metallurgischen Reaktoren. Je größer das Wissen über die Vorgänge im einzelnen Aggregat ist bzw. je besser die Zusammenarbeit zwischen ff-Industrie und Anwenderindustrie ist umso spezifischer können die feuerfest Lösungen sein.

Strömungsvorgänge in Kundenaggregaten werden in der RHI im konzerneigenen Forschungszentrum in Leoben, Österreich, mit Hilfe der CFD-Modellierung (computational fluid dynamics) berechnet.

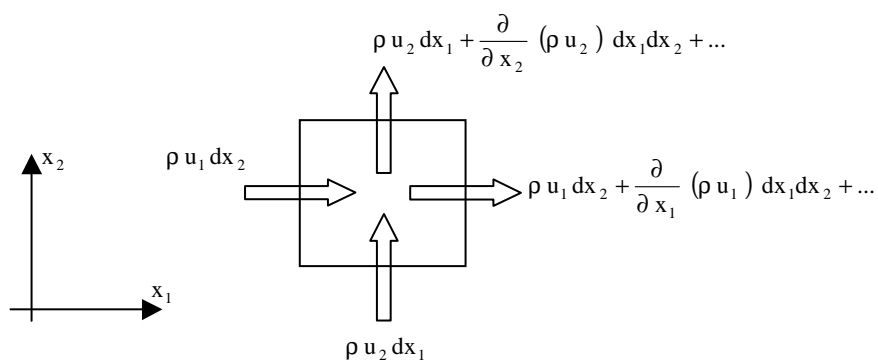
Der vorliegende Beitrag zeigt anhand zweier Beispiele die Anwendung der CFD-Modellierung.

2 Grundlagen der CFD-Modellierung

Eine numerische Berechnung von Wärme- bzw. Temperaturverteilungen oder auch der Strömung wird erst möglich, wenn die physikalisch zu Grunde liegenden Gesetze in eine mathematische Form - im Allgemeinen in verschiedene Differentialgleichungen - gebracht werden.

Die einzelnen Differentialgleichungen drücken ein bestimmtes Erhaltungsgesetz aus. Jede Gleichung beinhaltet eine physikalische Größe als abhängige Variable und geht davon aus, dass zwischen den verschiedenen Faktoren, die diese physikalische Größe beeinflussen, ein Gleichgewicht herrscht. Die abhängigen Variablen dieser Differentialgleichungen werden als spezifische Größen betrachtet, d.h. bezogen auf ein Einheitsvolumen. Beispiele dazu sind die Geschwindigkeit (Impuls pro Einheitsvolumen), der Massen- oder Mischungsbruch und die spezifische Enthalpie/Energie. Die Temperatur, die häufig als abhängige Variable angegeben wird, ist keine spezifische Größe, da sie über eine Fundamentalgleichung ihrerseits mit der Energie-/Enthalpiegleichung verbunden ist.

Die einzelnen Terme einer Differentialgleichung geben den Einfluss auf ein gedachtes Einheitsvolumen an. Ein Beispiel für die Kontinuitätsgleichung, die Erhaltungsgleichung für die Masse, wird für den zweidimensionalen Fall hergeleitet. Betrachtet man in Abbildung 1 ein Flächenelement im zweidimensionalen Raum mit den Kanten dx_1 und dx_2 sowie der Dichte ρ - das entspricht dem Masseneintrag pro Volumen in kg/m^3 - und bilanziert in die beiden Richtungen x_1 und x_2 unter Berücksichtigung der zeitlichen Änderung der Dichte, so erhält man allgemein die Kontinuitätsgleichung (Glg.1).



$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho dx_1 dx_2) = \rho u_1 dx_2 + \rho u_2 dx_1 - \rho u_2 dx_1 - \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2) dx_2 dx_1 - \rho u_1 dx_2 - \frac{\partial}{\partial x_1} (\rho u_1) dx_1 dx_2 - \dots$$

Abbildung 1: Zweidimensionales Flächenelement [3]

(Glg.1)
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} (\rho u_1) + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2) = 0$$

Die Differentialgleichung, die die Erhaltung des Impulses für eine Richtung eines Volumenelementes für ein newtonsches Fluid beschreibt, kann auf ähnliche Weise wie oben beschrieben hergeleitet werden. Mit \mathbf{u} als Geschwindigkeitsvektor und u_1 als Geschwindigkeitskomponente in x_1 -Richtung kann dargestellt werden:

$$(Glg. 2) \quad \frac{\partial \rho u_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} u_1) = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u_1) - \frac{\partial p}{\partial x_1} + B x_1$$

mit μ als Viskosität, p dem Druck und B als „Körperkräfte“ in x_1 -Richtung, z.B. die Gravitationskraft. Die einzelnen Teile dieser Differentialgleichung beschreiben die verschiedenen Arten des Impulstransportes. Dabei bedeutet der erste Term $\delta(\rho u_1)/\delta t$ die Rate der Impulsänderung (Geschwindigkeitsänderung) pro Zeit, der Term $\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} u_1)$ den konvektiven Fluss des Impulses, der durch das allgemeine Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} transportiert wird. Der Term $\operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u_1)$ stellt den diffusiven Anteil des Impulstransportes dar, wobei $\mu \operatorname{grad} u_1$ in Anlehnung an das Fick'sche Diffusionsgesetz folgendes bedeutet: Die Viskosität μ entspricht dem „Diffusionskoeffizienten“ des Impulses und $\operatorname{grad} u_1$ den Unterschied des Impulses über dem Volumenelement. Der Term $\delta p/\delta x_1$ stellt den Anteil der Druckkraft zum Gesamtimpulsbilanz dar. Die Impulserhaltungsgleichung wird oft auch als Navier-Stokes-Gleichung bezeichnet.

Da die oben beschriebene Impulserhaltungsgleichung streng genommen nur für den laminaren Fall gilt und turbulente Strömungen in fast allen technischen Anwendungen überwiegen, und es nur in Spezialfällen unter extremem Rechenaufwand möglich ist, instationäre turbulente Strömungen aufzulösen, ist es bei numerischen Strömungsberechnungen üblich, zeitlich bzw. Ensemble-gemittelte Werte der abhängigen Variablen, z.B. Geschwindigkeit, Dichte, etc. zu verwenden. Dabei wird angenommen, dass um einen Mittelwert sehr schnelle und zufallsbehaftete Fluktuationen bestehen. In den Erhaltungsgleichungen werden dann die augenblicklichen Variablen bei der Bilanz über ein Volumenelement durch die Summe aus dem Ensemble-gemittelten Wert $\langle \mathbf{u} \rangle$ und einer Abweichung \mathbf{u}' vom gemittelten Wert ersetzt, z. B für die Geschwindigkeitskomponente in u_1 :

$$(Glg.3) \quad \mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}'$$

Da die auftretenden Korrelationen der Geschwindigkeitsschwankungen a priori nicht bekannt sind, müssen sie mit Hilfe eines Turbulenzmodells bestimmt werden. Diese Vorgehensweise wird als Schließung des

Gleichungssystem bezeichnet. Dabei ist wesentlich, dass die scheinbaren Schubspannungen hauptsächlich durch die größeren Turbulenzballen erzeugt werden. Die großen Turbulenzballen geben durch Wirbelfadenstreckung und wegen der Scherinstabilität der Strömung ihre Energie an kleinere Wirbel weiter, bis schließlich in den kleinsten Turbulenzelementen so steile Geschwindigkeitsgradienten auftreten, dass hier die Umwandlung in innere Energie stattfindet. Dieser Energietransport im Turbulenzenergiespektrum zu immer größeren Wellenzahlen wird auch als Turbulenzenergiekaskade bezeichnet. Die Einspeisung von Energie in diese Kaskade geschieht - unabhängig von der Viskosität - durch Übertragung von Energie der mittleren Bewegung mittels der scheinbaren Schubspannungen auf die großen Turbulenzelemente; diese Energie wird dann an immer kleinere Turbulenzelemente bis herunter zur Dissipation weitergegeben. Das ist auch der Grund, dass die Verteilung der mittleren Geschwindigkeiten bei turbulenten Strömungen nur wenig von der Reynoldszahl abhängt, obwohl letztlich die Energieverluste durch die Zähigkeit verursacht werden. Beim Durchgang durch die Energiekaskade geht zudem noch die den Schwankungsgeschwindigkeiten aufgeprägte Richtungsinformation verloren, das heißt, dass die zunächst in den verschiedenen Raumrichtungen – auf Grund der in dieser Richtungen ungleich starken Scherungen - ungleich verteilte Schwankungsenergie im Verlauf der Energiekaskade auf alle Richtungen gleichmäßig umverteilt wird. Die kleinsten Turbulenzelemente sind somit isotrop. Bei turbulenten Strömungen mit großen Geschwindigkeitsgradienten oder nicht drallbehafteten rotierenden Strömungen ist das im Allgemeinen der Fall. Solche Strömungen werden lokal isotrop genannt.

Wie bereits oben gezeigt, müssen die abhängigen Variablen ϕ in einen mittleren Wert $\langle \phi \rangle$ und eine fluktuierende Komponente ϕ' zerlegt werden:

$$(Glg. 4) \quad \phi = \langle \phi \rangle + \phi'$$

Für eine statistisch stationäre Strömung wird ϕ als zeitlich gemittelte Größe angesehen.

$$(Glg. 5) \quad \langle \phi(x_0) \rangle = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{2 \cdot t_0} \int_{t=-t_0}^{t=t_0} \phi(x_0, t) dt$$

Obwohl eine große Auswahl an verschiedenen Turbulenzmodellen besteht, gilt als Standardmodell für praktische ingenieurtechnische Anwendungen das sogenannte k-ε Modell von Harlow und Nakayama ^{4/}. Das k-ε Modell löst zwei weitere partielle Differentialgleichungen für die turbulente kinetische Energie k

(Glg. 6)
$$k = \frac{\overline{u_i'^2}}{2}$$

und deren Dissipation ε

(Glg. 7)
$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{l_t}$$

In den obigen Gleichungen steht l_t für eine charakteristische turbulente Wirbellänge.

Für die weitere Vertiefung in das Fachgebiet muss an dieser Stelle auf die Fachliteratur verwiesen werden.

Anhand von zwei einfachen Beispielen wird der Einsatz der CFD-Modellierung gezeigt.

3 Beispiele der CFD-Modellierung

3.1 Optimierung der Spülerposition im Halteofen

In der Stahlindustrie sind verschiedene Ausführungen von Bodenspülern seit mehr als 20 Jahre im Einsatz. Dabei wird durch poröse Spüler oder Röhrenspüler oder durch Doppelmanteldüsen Inertgas oder Reaktionsgas in den metallurgischen Reaktor eingebracht. Auch in der Nichteisenindustrie werden immer mehr Spüler verwendet.

Die Vorteile sind unabhängig von der Anwendung im wesentlichen folgende:

- bessere Homogenisierung des Metallbades sowohl thermisch auch als analytisch
- bessere Ausnutzung von Reaktionsgasen
- Beschleunigung der Bad-Schlacken-Reaktion
- bessere Entfernung unerwünschter Begleitelemente
- Verkürzung der Prozesszeit

Durch das Einbringen von Gas durch den Boden eines Reaktors werden aber die Strömungsverhältnisse im Reaktorraum beeinflusst bzw. verändert. Sowohl die Anzahl der verwendeten Spüler als auch die Positionierung jedes einzelnen ist daher für die metallurgische Arbeit von Bedeutung.

Als Beispiel dient ein Halteofen in der Kupferindustrie. Dieser berechnete Ofen ist als Pufferaggregat zwischen drei Peirce-Smith Konvertoren und 2 Anodenöfen plaziert und konnte vor dem Spülereinbau keine metallurgische Arbeit verrichten.

Die Hauptaufgaben des eingesetzten Spülgases sind eine bessere Temperaturverteilung im Ofen, eine Verminderung des Schwefelgehaltes im Blisterkupfer und eine Verringerung des Kupferanteiles in der Schlacke. Erreicht wird die Vergleichmäßigung der Temperatur und die teilweise Entschwefelung durch eine gute Verteilung der zugeführten Gasblasen im ganzen Reaktorraum. Die Verringerung des Kupferanteils in der Schlacke kann durch eine Erhöhung der Metallbad – Schlacken –Grenzfläche und damit verbunden durch eine Annäherung an das chemische Gleichgewicht erzielt werden. Des Weiteren soll der Ofen, nur mit Hilfe des Spülgases bei individueller Ansteuerung der einzelnen Spüler mit unterschiedlichen Spülgasmengen, vollständig entschlackt werden.

Die Optimierung der Spüleranordnung wurde daher für die Kriterien

- bestmögliche Verteilung des Spülgases im kompletten Reaktorraum
- Maximierung der Grenzfläche Metallbad und Schlacke und
- Treiben der Schlacke zum Entschlackungstor

durchgeführt.

Dazu wurde der Ofen in 250.000 Einzelvolumina zerlegt. Die Dichte und die Viskosität des Blisterkupfers und der Schlacke wurden für eine Temperatur von 1250°C gewählt. Die Schlackenschicht wurde mit 10 cm angenommen. Durchgeführt wurden die Berechnungen für verschiedene Spüleranordnungen (Position und Anzahl) und verschiedenen Gasmengen. In Abbildung 2 ist eine Gegenüberstellung von 4 Varianten hinsichtlich der Turbulenzintensität in der Grenzschicht Metallbad/Schlacke dargestellt – dient um die Auswertung gemäß dem Kriterium nach Maximierung der Grenzfläche durchzuführen.. Abbildung 3 zeigt für die gleichen Varianten die Geschwindigkeitsverteilung des Fluids in verschiedenen Schnitten. Um die bestmögliche Verteilung des Spülgases zu bestimmen wird der Anteil des Gases im Bad mit Hilfe einer „Molfractionrate“ (Anteil Volumen Gas zu Gesamtvolumen) berechnet. Diese Abbildungen sind Beispiele wie die optimale Verteilung der Spüler bestimmt wird wobei darauf hin gewiesen werden soll, dass eine genaue Auswertung eine Vielzahl von solchen Schnitten nach unterschiedlichen Rechenzeiten erfordert.

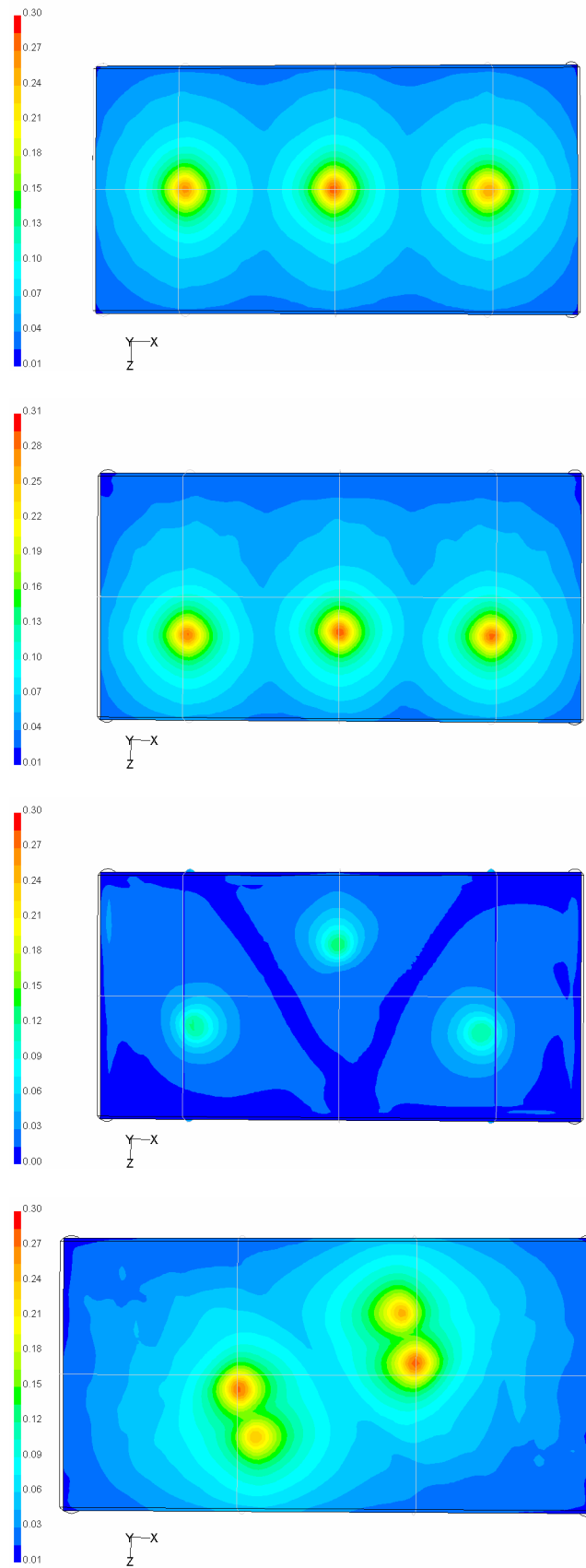


Abbildung 2: Darstellung der Turbulenzintensität in der Metall-Schlacken-Berührungsebene bei 4 verschiedenen Spüleranordnungen

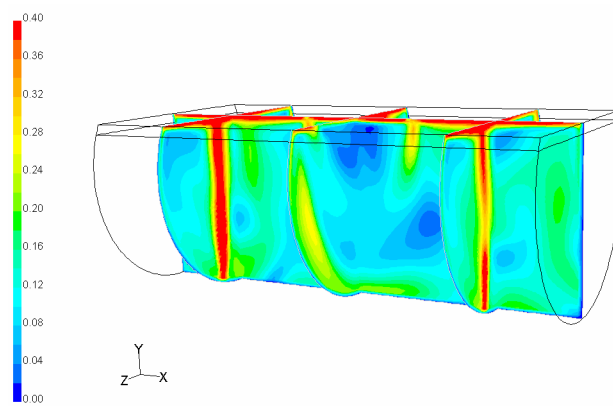
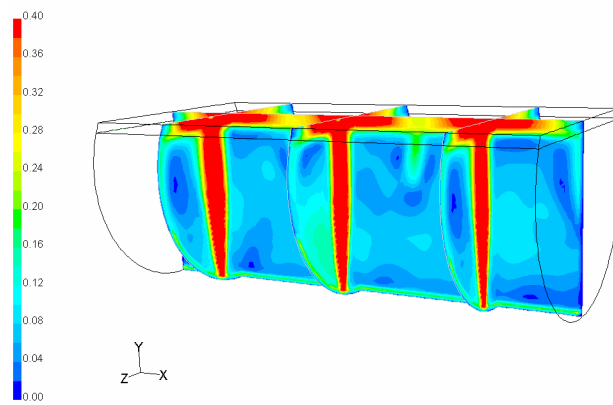
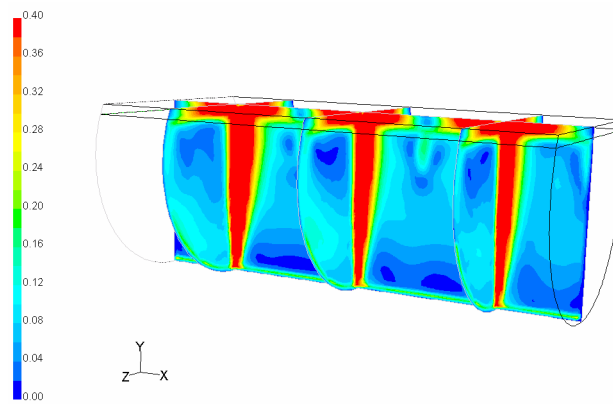
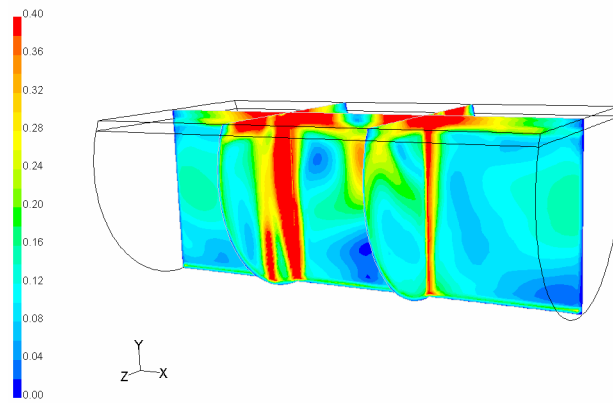


Abbildung 3: Geschwindigkeitsverteilung in unterschiedlichen Schnitten in m/s

3.2 Strömungsberechnung eines Schwefel-Verbrennungs-Ofens

Als 2. Beispiel wurde ein S-Verbrennungsofen gewählt. Die Aufgabe dieses Ofens ist elementaren Schwefel zu Schwefeldioxid zu verbrennen um den Gesamtschwefeldioxidanteil im Abgas der Gesamtanlage auf einen Gehalt zu bringen der groß genug ist um eine nachgeschaltete Schwefelsäureanlage betreiben zu können.

Abbildung 4 a zeigt das Volumengrid des Ofens. Die drei Wände im Ofen dienen zur Erhöhung der Aufenthaltsdauer des Schwefel-Gas-Gemisches um eine 100 % ige Verbrennung zu garantieren. Das Problem war, dass die erste Wand den Beanspruchungen nicht standhielt. RHI wurde gebeten dem Kunden entsprechende Vorschläge für eine neue Konstruktion der Wände zu unterbreiten.

Nach einer Neukonstruktion der Wände wurde der Einfluss der Wandgeometrie auf die Gesamtströmung der Verbrennung berechnet wobei der Gasdurchsatz bei einer Temperatur von 650°C mit 110.000 Nm³/h festgelegt wurde.

In Abbildung 5 sind Geschwindigkeitsvektoren der Strömung in 2 verschiedenen Schnittebenen für die ursprüngliche Variante dargestellt.

Der Einfluss der Wandausführung auf die Gesamtaufenthaltszeit wurde folgendermaßen berechnet.

Nachdem sich eine stabile Strömung ausgebildet hatte wurde am Gaseinlass ein Tracer zum Zeitpunkt $t = 0$ s gesetzt. Berechnet wurde die Zeit die benötigt wird bis der Auslassquerschnitt 100 % Tracer registriert. Die Gesamtzeit mit der ursprünglichen Wandgeometrie betrug 3,65 s. Die kürzeste Aufenthaltszeit ergab sich mit 2 Innenwänden mit 3,45 s. In Abbildung 6 ist der Druck, der auf die erste Innenwand wirksam wird, dargestellt. Während die Aufenthaltsdauer bei 2 Wänden gegenüber der Originalzustellung nur um rund 5 % abnimmt kann der Druck der auf die Wand wirksam wird um 43,2 % reduziert werden.

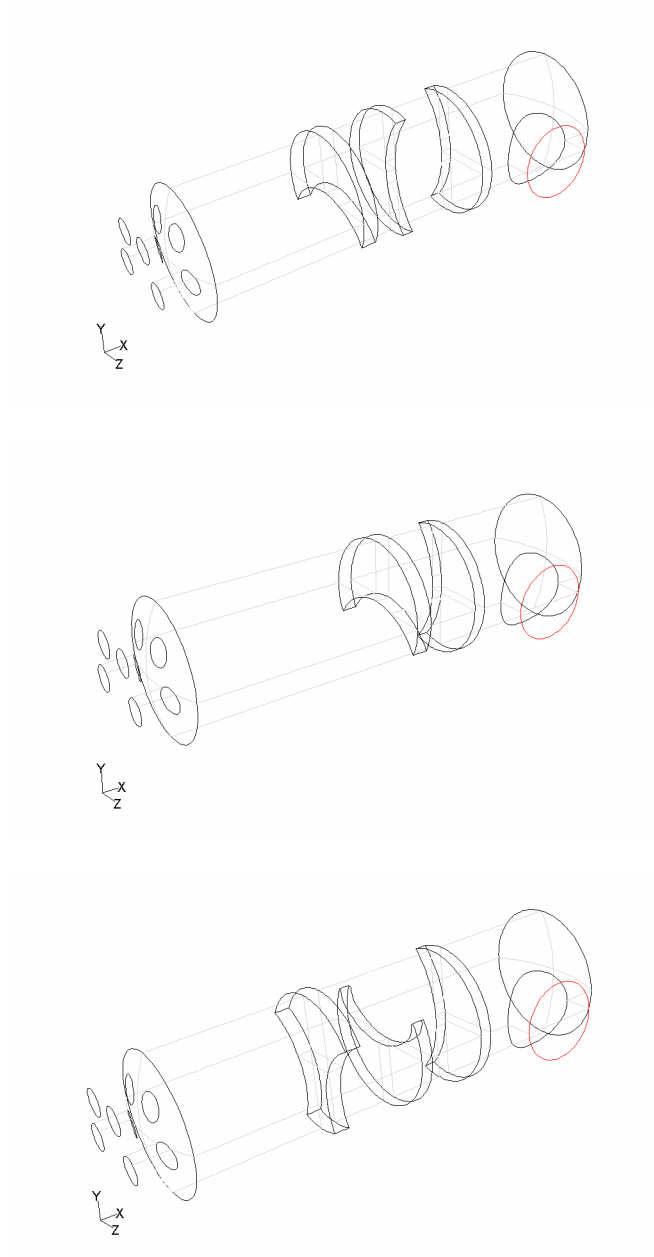


Abbildung 4: oben: ursprüngliche Anordnung der Trennwände; mittig: Variante mit nur 2 Trennwänden; unten: Neugestaltung dreier Wände

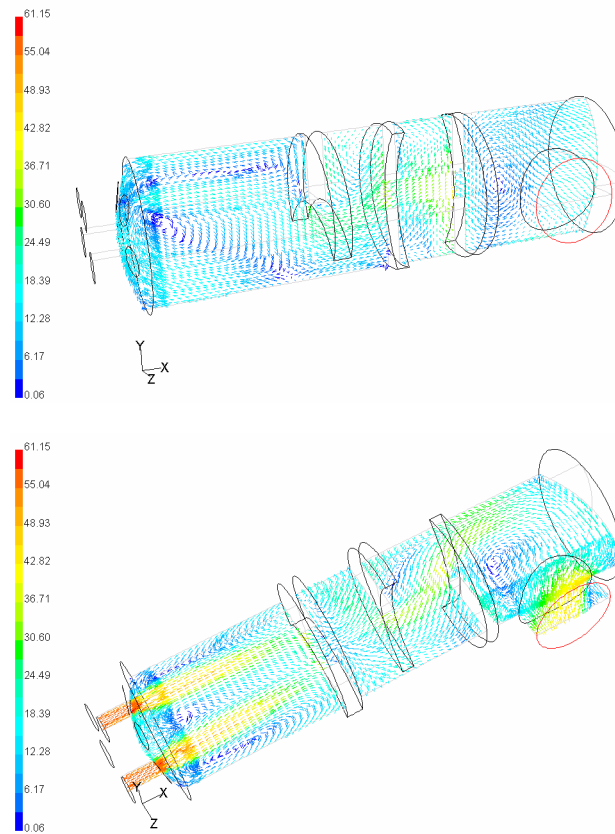


Abbildung 5: Geschwindigkeitsfeld der ursprünglichen Ausführung in m/s

4 Zusammenfassung

Die Lebensdauer feuerfester Auskleidungen hängt neben der chemischen und thermischen Resistenz der feuerfesten Produkte auch von der Qualität der Zustellung, von der Qualität des Aufheizvorganges des Aggregates und auch ganz entscheidend von der Prozessführung und Prozesskontrolle ab. Die mathematische Modellierung –sowohl nach der Methode der Finiten Elementen als auch nach der Methode der Finiten Volumen (CFD) – dient dazu Kundenprozesse zu simulieren um prozessspezifische „feuerfest“ – Lösungen entwickeln zu können.

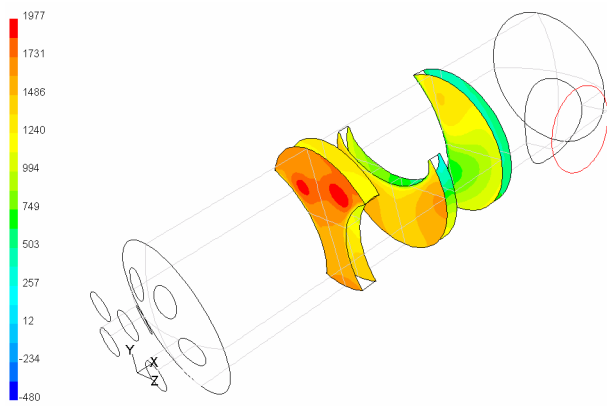
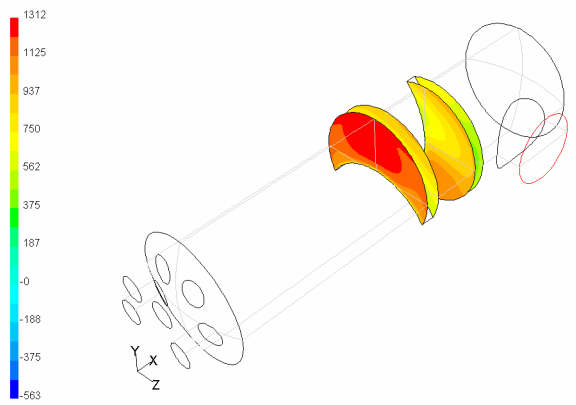
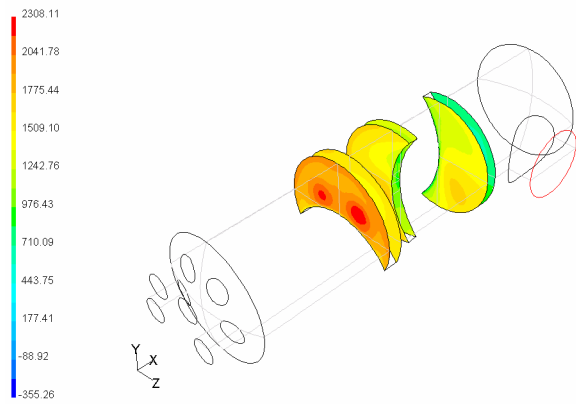


Abbildung 6: Darstellung der Druckbeaufschlagung der Wände in Pa

-
- [1] S. Chen, G.D. Doolen: Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** (1998) 329 – 364
- [2] Y. H., Quian, et al.: Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equations. *Europhys. Lett.*, **17** (1992) 479 – 484
- [3] S. Patankar,: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, New York, 1980
- [4] F. Harlow, P. Nakayama: Transport of Turbulence Energy Decay Rate. Report LA-3845, Los Alamos Science Lab., University of California