



Lehrstuhl für Gesteinshüttenkunde

Dissertation

Untersuchung des Stoffübergangs in einer
gasgespülten Stahlpfanne durch
fluidodynamische Simulationen

Dipl.-Ing. Marianne Doletschek, BSc

Mai 2019

**Untersuchung des Stoffübergangs in einer
gasgespülten Stahlpfanne durch fluiddynamische
Simulationen**

Dissertation

am Lehrstuhl für Gesteinshüttenkunde

vorgelegt von

Marianne Doletschek

Leoben, 27. Mai 2019

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt, und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

Ich erkläre, dass ich die Richtlinien des Senats der Montanuniversität Leoben zu "Gute wissenschaftliche Praxis" gelesen, verstanden und befolgt habe. Weiters erkläre ich, dass die elektronische und gedruckte Version der eingereichten wissenschaftlichen Abschlussarbeit formal und inhaltlich identisch sind.

Inhaltsverzeichnis

1	KURZFASSUNG	6
2	PROBLEMSTELLUNG.....	8
3	STAND DES WISSENS.....	9
3.1	Grundlagen für den Stoffübergang.....	10
3.1.1	Mechanismen an der Grenzfläche	10
3.1.2	Diffusion an der Grenzfläche.....	11
3.1.3	Strömungseinfluss	15
3.2	Experimentelle Untersuchungen zur Entschwefelung in der Pfanne im Spiegel der Literatur.....	16
3.3	Modellierung blasengerührter Pfannen in der Literatur.....	17
3.3.1	Software für Strömungssimulationen.....	17
3.3.2	Einfluss der Pfannengeometrie	18
3.3.3	Phasen (Metall-, Schlacke- und Atmosphäre)	18
3.3.4	Spülgas.....	19
3.3.5	Turbulenz.....	20
3.3.6	Modellierung des Stoffübergangs im Spiegel der Literatur	20
4	STOFFÜBERGANGSMODELL.....	24
4.1	Modellaufbau	24
4.1.1	Modellablauf und verwendete Gleichungen.....	25
4.1.2	Datenauswertung und Berechnung der Stoffübergangskoeffizienten	30
4.2	Erprobung und Validierung des Stoffübergangsmodells	30
4.2.1	Grenzflächeninitialisierung	31
4.2.2	Validierung am konvektionsfreien Fall.....	34
4.2.3	Einfluss der Konvektion.....	36
5	ANWENDUNG DES STOFFÜBERGANGSMODELLS AN EINER GASGESPÜLTEN PFANNE	40
5.1	Modellierung der gasgespülten Pfanne mittels CFD.....	40
5.1.1	Rechengitter	40
5.1.2	Phasen und Spezies	42
5.1.3	Spülgas.....	43

5.1.4	Turbulenz.....	44
5.1.5	Überblick über die verwendeten Modelle	47
5.2	Charakterisierung der Bedingungen	48
5.2.1	Einflussgrößen auf den Stoffübergang	48
5.2.2	Dimensionslose Kennzahlen.....	49
5.3	Parameterstudie.....	50
5.3.1	Auswertung der Simulationen	51
5.3.2	Vorstudie	52
5.3.3	Detailstudie.....	55
5.3.4	Interpretation der Ergebnisse.....	57
5.4	Ermittlung dimensionsloser Potenzgesetze für die Stoffübergänge Metall -Schlacke und Feuerfestmaterial - Schlacke	64
5.5	Anwendung der Sherwood-Gleichungen	65
6	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	67
7	LITERATUR	I

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des Projektes P 2.4 "Analysis of refractory wear aiming to improve lining life time" des COMET Kompetenzzentrums K1-Met am Lehrstuhl für Gesteinshüttenkunde der Montanuniversität Leoben durchgeführt. Ich danke für die dadurch erhaltene Unterstützung. Eine ideelle Förderung meiner Arbeit verdanke ich zahlreichen Mitarbeitern der industriellen und wissenschaftlichen Partner dieses Projektes. Zu letzteren zählt neben der Montanuniversität Leoben insbesondere auch die Johannes Kepler Universität Linz. Sie alle waren mir in den letzten Jahren wichtige Begleiter.

Ein großer Dank gilt auch meiner Familie, vor allem Andreas und Max, die an mich geglaubt haben und mich vor allem in der Endphase der Arbeit unterstütz haben.

1 Kurzfassung

Stahlpfannen dienen dem Transport, der Veredelung sowie der Reinigung des Metallbades. Unterschiedliche basische oder auch nicht basische feuerfeste Steine sowie Massen schützen die Stahlpfanne vor dem Verschleiß durch die Schlacke und durch das flüssige Metallbad. Die erforderliche Kinetik metallurgischer Reaktionen und das erforderliche Durchmischen des flüssigen Metallbades werden durch das Spülen mittels Argon erreicht.

Diese Arbeit dient der Feststellung der optimalen Prozessbedingungen für die Pfannenbehandlung, bei denen der Stoffübergang zwischen dem Metallbad und der Schlacke ein Maximum erreicht bei einer gleichzeitigen Minimierung des Verschleißes der feuerfesten Ausmauerung.

Dies erfolgt auf Basis von Strömungssimulationen mit der Software Fluent. Der Stoffdurchgang vom Metallbad in die Schlacke wird von der Diffusion der übergehenden Spezies von der Grenzfläche Metall – Schlacke ins Schlackenbad kontrolliert, da sowohl chemische Reaktionen an der Grenzfläche als auch der Antransport der Spezies im Metallbad wesentlich rascher ablaufen. Eine wichtige Spezies für den Stoffübergang von der Grenzfläche Metall – Schlacke ist der Schwefel und für den Stoffübergang von der Grenzfläche Feuerfest – Schlacke Magnesia. Für den Stoffübergang der Spezies ausgehend von der Grenzfläche Metallbad - Schlacke wurde ein Modell entwickelt, dessen Aufbau und Validierung Teil dieser Arbeit ist. Die Diffusion wird mit den Wandfunktionen des linearen und des logarithmischen Profils sowie dem zweiten Fick'schen Gesetz beschrieben. Die Validierung des Modells erfolgte anhand der Lösung der expliziten eindimensionalen finiten Differenzgleichung. Der Verschleiß der feuerfesten Ausmauerung ist durch einen diffusiven Stofftransport vom Feuerfestmaterial in die Schlacke berücksichtigt. Da der Einfluss der Strömung auf den Stoffübergang erheblich ist, gilt der realitätsnahen Darstellung der Strömung ein besonderes Augenmerk. Im Rahmen der Parameterstudie für die Stahlpfanne wurden der Spülgasstrom, die Viskosität, die Diffusionskoeffizienten und die Schlackenbadhöhe in betriebsüblichen Bereichen variiert.

In einer Vorstudie konnte der optimale Spülgasbereich zwischen 100 - 300 NI/min gefunden werden, die Beschleunigung der Geschwindigkeit an der Grenzfläche Metall - Schlacke in diesem Bereich lässt auch eine Beschleunigung des Stoffübergangs erwarten. Dieser Bereich ist gekennzeichnet von einem Schlackenauge, das sich gleichbleibend über dem Spülstein ausbildet und einem stabilen Spülgasstrom.

Der dimensionslose Stoffübergang wird durch die Sherwood-Zahl Sh charakterisiert. Die Sherwood-Zahl ist hier definiert als Quotient des Produktes des Stoffübergangskoeffizienten mit der Schlackenbadhöhe und des effektiven Diffusionskoeffizienten. Der dimensionslose Stoffübergangskoeffizient in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke $Sh^{m/s}$, beträgt zwischen $Sh^{m/s} = 480\ 000$ und $1\ 905\ 000$. Zur Verdeutlichung dieser Grenzfläche wird der

Index m/\underline{s} verwendet. Der Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke $Sh^{r/\underline{s}}$, liegt zwischen $Sh^{r/\underline{s}} = 55\ 000$ und $165\ 000$. Zur Verdeutlichung der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke wird der Index r/\underline{s} verwendet.

Für den dimensionslosen Stoffübergang an der Grenzfläche Metall - Schlacke $Sh^{m/\underline{s}}$ gilt:

$$Sh^{m/\underline{s}} = 9407 \cdot Re^{0.407} \cdot (Sc^{m/\underline{s}})^{0.342} \cdot \Gamma^{0.769} \quad \text{mit } B = 0.973 \quad (1)$$

für Reynolds-Zahl Re zwischen 64 und 420
 Schmidt-Zahl $Sc^{m/\underline{s}}$ zwischen 65 200 und 114 000.
 Simplex Γ zwischen 0.06 und 0.13

Die dimensionslose Größe Γ ist der Quotient aus Schlackenbadhöhe und Pfannenradius. Die Re - Zahl ist ermittelt aus dem Quotient des Produktes der Gasgeschwindigkeit - beim Spülsteinaustritt unter Betriebsbedingungen - mit der Schlackenbadhöhe und der kinematischen Schlackenviskosität. Die Sc - Zahl ist der Quotient der kinematischen Viskosität der Schlacke und des effektiven Diffusionskoeffizienten der jeweiligen Spezies in der Schlacke. B steht für das Bestimmtheitsmaß.

Für den dimensionslosen Stoffübergang von der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke $Sh^{r/\underline{s}}$ gilt:

$$Sh^{r/\underline{s}} = 19\ 843 \cdot Re^{0.283} \cdot (Sc^{r/\underline{s}})^{0.161} \cdot \Gamma^{0.649} \quad \text{mit } B = 0.933 \quad (2)$$

 Schmidt-Zahl $Sc^{r/\underline{s}}$ zwischen 390 000 und 688 850

Die Gleichungen sind für geometrisch ähnliche Pfannen gültig mit einem Verhältnis zwischen Pfannenradius und Pfannenhöhe von 0.381 und einer Exzentrizität der beiden Spülsteine - als Distanz zwischen Pfannenmittelpunkt und Spülstein dividiert durch den Pfannenradius - von 0.615, sowie einem Winkel zwischen den beiden Spülsteinen von 125° .

Steigende Spülgasraten sowie Schlackenbadhöhen und sinkende Viskositäten führen zu einem Anstieg der Stoffübergänge. Spülgasraten von 260 - 300 NI/min können als Bereiche optimaler Prozessbedingungen identifiziert werden.

Mittels der Strömungssimulationen mit implementiertem Stoffübergangsmodell konnten jene Prozessbedingungen charakterisiert werden, bei denen der Stoffübergang von der Grenzfläche Metallbad und Schlacke ein Maximum erreicht und jene zwischen der feuerfesten Ausmauerung und der Schlacke gering bleibt.

In zukünftigen Arbeiten werden die lokal vorherrschenden strömungstechnischen Prozesse an der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke einer detaillierteren Untersuchung unterzogen.

2 Problemstellung

Der erwünschte Stoffdurchgang bei der Entschwefelung in einer gasgespülten Stahlpfanne, bei dem die Spezies Schwefel vom Metallbad in die Schlacke übergeht, steht dem unerwünschten Stoffübergang des Feuerfestmaterials in die Schlacke gegenüber. Es ergibt sich die praxisrelevante Fragestellung, welche Prozessbedingungen den Stoffdurchgang Metall - Schlacke unterstützen, bei einem gleichzeitig geringen Stoffübergang zwischen dem Feuerfestmaterial und der Schlacke.

Die in metallurgischen Aggregaten, wie z.B. der Stahlpfanne, auftretenden Stoffübergänge sind aufgrund der hohen Temperatur und der Strömungsbedingungen einer direkten und detaillierten Messung nicht zugänglich. Für die Lösung verschiedenster strömungstechnischer Fragestellungen werden seit vielen Jahren CFD (Computational Fluid Dynamics, auch CFD - Simulationen) erfolgreich verwendet. Für die Simulation der Pfannenbehandlung bietet die CFD - Software Fluent von Ansys die am weitesten entwickelte und am häufigsten eingesetzte Software mit den meisten implementierten und auch erweiterbaren Modellen. Für den Stoffdurchgang zwischen flüssigen Phasen, bei einer gleichzeitig genauen Abbildung der Phasengrenzfläche, ist jedoch derzeit kein Modell verfügbar. Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Modells, das den Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Metall – Schlacke, darstellen.

Dieses Stoffübergangsmodell Metall - Schlacke in Kombination mit dem Modell für den Stoffübergang vom Feuerfestmaterial in die Schlacke ist für die Untersuchung einer gasgespülten Stahlpfanne heranzuziehen. Aus einer Parameterstudie sollen jene Betriebsbedingungen abgeleitet werden, bei welchen der Stoffübergang von der Grenzfläche Metall - Schlacke ein Maximum erreicht bei gleichzeitiger Minimierung des Stoffübergangs zwischen dem Feuerfestmaterial und der Schlacke. Die Untersuchung einzelner Einflussfaktoren auf den Stoffübergang sowie deren mathematische Erfassung mittels Dimensionsanalyse und Parameterstudie sind eine weitere Zielsetzung dieser Arbeit.

3 Stand des Wissens

In metallurgischen Prozessen, wie der Pfannenbehandlung, wird der Stoffdurchgang von der Metallphase zur Schlackenphase für die Reinigung des Metalls von Spezies wie Schwefel und Phosphor eingesetzt. Bei der Metall- bzw. Schlackenphase handelt es sich um Mischphasen, da sie aus verschiedenen chemischen Verbindung zusammengesetzt sind. Um den Prozess zu beschleunigen wird Strömung induziert indem am Boden der Behandlungsaggregate Spülgas eingeblasen wird. An der Grenzfläche zwischen Metall und Schlacke findet der Durchgang der Spezies von der Metallphase in die Schlackenphase statt. Von der feuerfesten Ausmauerung in die Schlacke kommt es zum unerwünschten Stoffübergang [1, 2]. Dies ist in Abb. 1 für eine gespülte Pfanne schematisch dargestellt. Aufgrund der hohen Gleichgewichtskonzentration der Spezies in der Schlacke kommt es zu einer Anreicherung von Spezies in der Schlacke und infolge dessen zur Verminderung im Metallbad [3, 4].

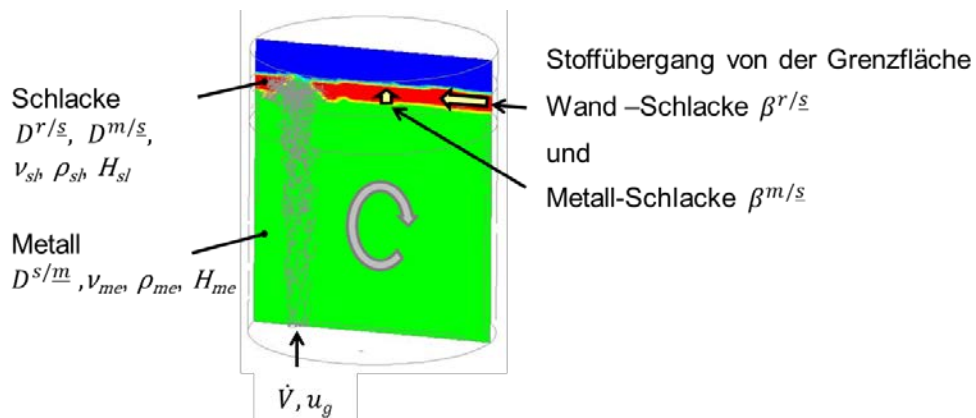


Abb. 1: Einflussfaktoren auf den Stoffübergang Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/s}$ und den Stoffübergang Metall - Schlacke $\beta^{m/s}$; $D...$ effektive Diffusionskoeffizienten der übergehenden Spezies, $\nu...$ kinematische Viskosität, $\rho...$ Dichte, $H...$ Höhe des Bades, $\dot{V}...$ Spülgasstrom und $u_g...$ Gaseintrittsgeschwindigkeit; die Indizes sl , me , r/s , m/s und s/m bezeichnen Schlacke, Metall, in der Schlackenphase von der Grenzfläche Feuerfest-Schlacke, in der Schlackenphase von der Grenzfläche Metall – Schlacke und in der Metallphase zur Grenzfläche Metall-Schlacke

Die Stoffübergangsrate wird durch die Stoffeigenschaften der beiden Mischphasen - Metall und Schlacke - und die vorherrschenden Strömungsverhältnisse beeinflusst [5, 6]. Der Stoffübergang zwischen zwei flüssigen Mischphasen ist ein häufig auftretender Verfahrensschritt, der in der Extraktion und Sorption angewendet wird [7].

3.1 Grundlagen für den Stoffübergang

Der Stoffübergang bezeichnet den Übergang einer Spezies von einer flüssigen Mischphase in eine Zweite über eine Grenzfläche. Eine treibende Kraft stellt der Aktivitätsgradient der Spezies zwischen den beiden Mischphasen dar. Da die Aktivität für eine direkte Anwendung meist nicht verfügbar ist, wird die Konzentration an deren Stelle herangezogen. Im Falle der Stahlpfanne steht eine anfänglich hohe Spezieskonzentration im Metallbad einer geringen in der Schlacke gegenüber. Der Endzustand ist dann erreicht, wenn der Konzentrationsgradient in den jeweiligen Mischphasen verschwindet. Dieser Diffusionsvorgang kann mit laminarer oder turbulenter Strömung auftreten. Die für diese Arbeit erforderlichen Gesetzmäßigkeiten werden im Kapitel 3.1.2 beschrieben. [8, 9, 7]

Innerhalb der Stahlpfanne wird durch das Spülgas eine Strömungswalze induziert, wodurch sich eine turbulente Strömung ausbildet. Durch die Strömung wird die Spezies zur Grenzfläche hin- und von dieser abtransportiert. Die Stoffeigenschaften der beiden Mischphasen sowie die auftretende Strömung beeinflussen den Stoffübergang daher maßgeblich [10].

3.1.1 Mechanismen an der Grenzfläche

Der Stoffdurchgang setzt sich aus den beiden Stoffübergängen beidseits der Grenzfläche zusammen, dabei werden eventuelle Reaktionen an der Grenzfläche vernachlässigt.

Des Weiteren bildet sich ein Konzentrationssprung zwischen der an die Grenzfläche anliegenden Spezieskonzentration aus. Der Abtransport der Spezies von der Grenzfläche in die Schlacke wird von der Aktivität der Spezies in der Schlacke bestimmt: Je niedriger die Aktivität in der Schlacke im Vergleich zur Aktivität in der Metallphase ist, desto mehr Spezies vermag die Schlacke aufzunehmen und desto rascher läuft der Stoffübergang in der Schlackenphase ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke ab [2]. Aufgrund der niedrigen Aktivität der Spezies in der Schlackenphase ist der Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Metall – Schlacke, der geschwindigkeitsbestimmende Schritt.

Die vom Spülgasstrom induzierte Strömung führt sowohl im Metallbad als auch in der Schlackenphase zur Anregung von Bewegung. In Folge dessen kommt es an der Grenzfläche zu Wellenbewegungen und im Bereich über dem Spülstein zur Ausbildung eines Schlackenauges. Am Rand des Schlackenauges bildet sich eine abwärts gerichtete Strömung aus, die den Einzug der Schlacke in das Metallbad zur Folge hat. Die eingezogene Schlacke liegt tröpfchenförmig vor und führt zu einer lokalen Oberflächenvergrößerung, was wiederum den Stofftransport beschleunigt [6, 11, 12].

3.1.2 Diffusion an der Grenzfläche

Diffusion ist ein physikalischer, von selbst ablaufender Vorgang, bei dem ein anfänglicher Konzentrationsunterschied von Spezies bzw. Teilchen innerhalb eines Mediums mit der Zeit ausgeglichen wird [7, 9, 8]. Das Vorhandensein einer Wand verursacht eine Grenzschicht, wobei direkt an der Wand eine Geschwindigkeit von Null vorausgesetzt wird, dies entspricht auch der relativen Geschwindigkeit an der flüssig-flüssig Grenzfläche [13, 14, 15, 16]. Liegt keine oder eine geringe Strömung vor, so wird für die Modellierung der Grenzschicht ein lineares Profil herangezogen.

Mittels dem ersten Fick'schen Gesetz wird der Speziesfluss für den linearen und eindimensionalen Fall folgendermaßen beschrieben:

$$j = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (3)$$

Es besagt, dass der Fluss j [kg/m²s] einer Spezies direkt proportional zum Konzentrationsgradienten $\partial c / \partial x$ [kg/m⁴] ist. Hierin steht D für den effektiven Diffusionskoeffizienten in [m²/s].

Im Falle des Stoffübergangs an der Grenzfläche Feuerfestmaterial - Schlacke wird durch die Simulationen ausschließlich der diffusive Stoffübergang berechnet. Die Grenzfläche Feuerfestmaterial - Schlacke gilt dabei als semipermeable Wand: es kommt zur Stoffübertragung der hier betrachteten Spezies nur in eine Richtung. Dadurch entsteht an der Grenzfläche eine senkrecht zu dieser in Richtung der Schlacke gerichteten Strömung mit der Geschwindigkeit v , der Stefanstrom, der bei den hier durchgeführten Simulationen unberücksichtigt bleibt:

$$v = - \frac{D}{1 - w_s} \frac{\partial w}{\partial x} \Big|_{x=X_0} \quad (4)$$

Dabei ist D der effektive binäre (i.e. zwei Spezies) Diffusionskoeffizient, w der Massenanteil der übertragenen Spezies in der Schlacke, w_s der Massenanteil in der Schlacke an der Grenzfläche, x die Ortskoordinate und X_0 die Grenzflächenkoordinate. Dieser Stefanstrom gleicht die Diffusion der zweiten, nicht am Stoffaustausch beteiligten Spezies in Richtung Grenzfläche aus. Deren Diffusionsstrom entsteht durch das Konzentrationsgefälle der übertragenen Spezies. Der Gesamtstrom ergibt sich, wenn der Massenstrom gemäß dem Fick'schen Gesetz, also das Produkt aus effektiven Diffusionskoeffizienten und dem Konzentrationsgradienten an der Grenzfläche, durch die Differenz $1 - w_s$ dividiert wird. Weiters wurde nicht berücksichtigt, dass der Stefanstrom mit der Geschwindigkeit v auch das Strömungsfeld beeinflusst. Dieser Einfluss ist nur bei entsprechend

hohen Konzentrationsgradienten von Bedeutung. Für die Grenzfläche Metall - Schlacke sind beide Effekte aufgrund der geringen Konzentrationsdifferenzen vernachlässigbar. [2]

Liegt nun neben dem örtlichen auch ein zeitlicher Konzentrationsunterschied vor, so wird dieser mit dem zweiten Fick'schen Gesetz beschrieben.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x} \quad (5)$$

Darin ist die Zeit mit t bezeichnet.

Für die Lösung dieser partiellen Differentialgleichung kann die numerische Methode der Finiten Differenzen angewendet werden [17]. Mit deren Hilfe wird für den eindimensionalen Fall die zeitabhängige Lösung ermittelt. Für die Modellierung des Stoffübergangs an der flüssig-flüssig Grenzfläche wird angenommen, daß der Stoffübergang sich analog zum Wärmeübergang von der Wand in eine, die Wand überströmende, flüssige Phase verhält [14]. An der Wand herrscht eine Geschwindigkeit von Null vor und darüber bildet sich zunächst eine laminare Strömung aus. Mit steigender Geschwindigkeit wird diese laminare Grenzschicht schmaler, um bei turbulenter Strömung in eine laminare Unterschicht überzugehen, siehe Abb. 2.

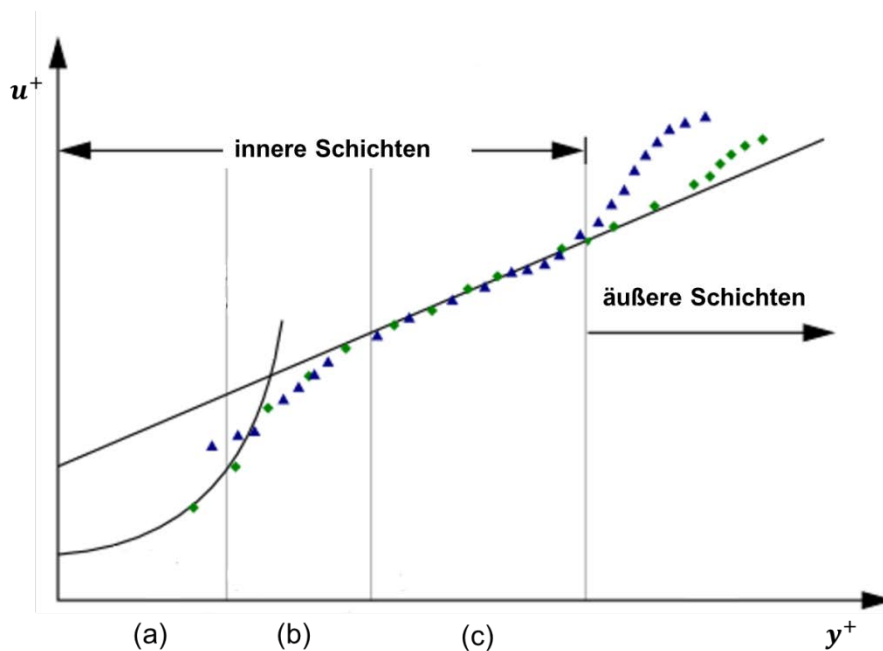


Abb. 2: Dimensionslose Geschwindigkeit u^+ in Abhängigkeit vom dimensionslosen Abstand y^+ und die Unterteilung des Wand-Nahen-Bereiches in eine viskose Unterschicht (a), Übergangsbereich (b) und turbulenter Bereich (c)

Der dimensionslose Abstand y^+ ermittelt sich aus $y^+ = u_\tau y / \nu$. Darin steht u_τ in [m/s] für die reibungsbedingte Geschwindigkeit; die sich aus der Wurzel der Wandschubspannung τ in [Pa] dividiert durch die Dichte der flüssigen Phase ρ in [kg/m^3] errechnet. y steht für den Abstand zur Wand in [m] und ν für die kinematische Viskosität in [m^2/s]. Die dimensionslose Geschwindigkeit

u^+ entspricht der Strömungsgeschwindigkeit dividiert durch die reibungsbedingte Geschwindigkeit. Da diese laminare Unterschicht in der Modellierung nicht mehr komplett durch ein ausreichend feines Gitter dargestellt werden kann, wird diese üblicherweise mit einer halbempirischen Formel der sogenannten „Wand-Funktion“ modelliert.

Die Experimente zur Herleitung der empirischen Gleichungen sind in [15] beschrieben, siehe Abb. 3.

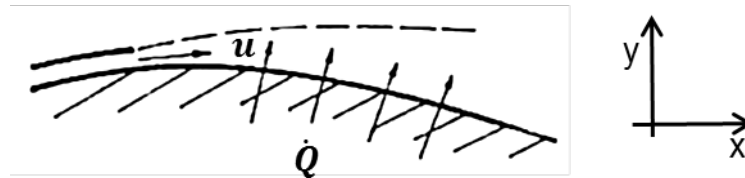


Abb. 3: Schematische Darstellung des Wärmeübergangs, \dot{Q} Wärmefluss und u Geschwindigkeit der flüssigen Phase; nach [15]

Bei den Experimenten laut [15] sind die lokalen Größen - wie Geschwindigkeit und Temperatur - nur von den zwei Ortsvariablen x und y abhängig. Diese quasi zweidimensionale Strömung ist zudem stationär und die Flüssigkeit weist von der Raumrichtung unabhängige Eigenschaften auf, siehe Abb. (2).

Für die Modellierung des dimensionslosen Speziesflusses Y^* wurde Glg. (6) verwendet, siehe [14].

$$Y^* = \frac{(c_{if} - c_{sl}) \cdot C_\mu^{1/4} \cdot k_p^{1/2}}{J} \quad (6)$$

In Glg. (6) bezeichnet c_{if} [kg/m^3] die Konzentration an der Grenzfläche - für das in dieser Arbeit entwickelte Modell ist deren Berechnung im nächsten Absatz beschrieben. c_{sl} [kg/m^3] bezeichnet die Konzentration der Schlacke in der an die Wand angrenzenden Zelle, siehe auch 4.1.1. C_μ [-] ist eine Modellkonstante, in der μ auf dessen Ursprung in der Gleichung für die turbulente Viskosität hindeutet. k_p [m^2/s^2] bezeichnet die turbulente kinetische Energie, im Abstand p von der Wand und J die Stoffstromdichte der Spezies. Des Weiteren wird der dimensionslose Abstand zur Wand y^* mittels Glg. (7) definiert, siehe auch [14].

$$y^* = \frac{\rho_{sl} \cdot C_\mu^{1/4} \cdot k_p^{1/2} \cdot \Delta x_{sl}}{\eta_{sl}} \quad (7)$$

In Glg. (7) bezeichnet ρ_{sl} [kg/m^3] die Schlackendichte, Δx_{sl} [m] den Abstand zwischen der Grenzfläche und dem betrachteten Punkt in der Schlacke - für das in dieser Arbeit entwickelte Modell ist dessen Berechnung unter 4.1.1 beschrieben und η_{sl} [Pas] die Schlackenviskosität. Für das lineare Profil lässt sich der dimensionslose Speziesfluss Y^* gleichsetzen mit Y_{lin}^* , siehe [14].

$$Y^* = Y_{lin}^* = Sc^{m/s} y^* \quad (8)$$

Dabei errechnet sich die $Sc^{m/s}$ –Zahl aus $Sc^{m/s} = \eta_{sl}/(\rho_{sl} \cdot D_{eff,m})$. Für das logarithmische Profil lässt sich der dimensionslose Speziesfluss Y^* auch als Y_{log}^* mittels Glg. (9) definieren, siehe [14].

$$Y^* = Y_{log}^* = Sc_t \left[\frac{1}{\kappa} \ln(E y^*) + P_c \right] y^* \quad (9)$$

In Glg. (9) sind Sc_t , κ und E dimensionslose Modellkonstanten - wobei t in Sc_t für turbulent steht. P_c entspricht dem dimensionslosen Widerstand aufgrund der laminaren Unterschicht in der turbulenten Grenzschicht, c weist auf den Speziestransport hin. Der Gültigkeitsbereich des logarithmischen Profils beginnt am Schnittpunkt zwischen dem linearen und dem logarithmischen Profil und wird als kritischer dimensionsloser Abstand y_c^* bezeichnet. Als Ende des Gültigkeitsbereiches wird das 10-fache von y_c^* angenommen. Weiterführende Literatur sind [15, 16, 18, 19].

Differenzgleichung für die Grenzflächenkonzentration

An der Grenzfläche findet der Durchgang einer Spezies von einem Medium in ein anderes statt. In Abb. 4 ist dies schematisch für den Fall eines Stoffdurchgangs vom Metall in die Schlacke dargestellt.

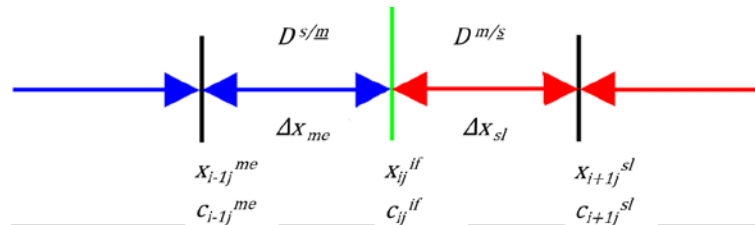


Abb. 4: Schematische Darstellung des Stofftransports im Bereich der Grenzfläche; D ... effektiver Diffusionskoeffizient, Δx ... Inkrement der Ortskoordinate, c ... Konzentration; die Indizes me , sl , if , s/m , m/s bezeichnen Metall, Schlacke, Grenzfläche, in der Metallphase bis zur Grenzfläche Metall - Schlacke, in der Schlackenphase bis zur Grenzfläche Metall – Schlacke, i , j stehen für die örtliche und zeitliche Diskretisierung

Durch eine Massenstrombilanz ergibt für die Grenzfläche folgende Gleichung.

$$\frac{c_{ij+1}^{if} - c_{ij}^{if}}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x_{me} + \Delta x_{sl}} \left(D^{m/s} \frac{c_{i+1j}^{sl} - c_{ij}^{if}}{\Delta x_{sl}} - D^{s/m} \frac{c_{ij}^{if} - c_{i-1j}^{me}}{\Delta x_{me}} \right) \quad (10)$$

Die in Glg. (10) angeführten Konzentrationen sind die Konzentration der Spezies an der Grenzfläche c_{ij}^{if} , in der Schlacke c_{i+1j}^{sl} sowie im Metall c_{i-1j}^{me} , $D^{s/m}$, $D^{m/s}$, sind die effektiven Diffusionskoeffizienten der Spezies in der Metall- und der Schlackenphase, Δx_{me} und Δx_{sl} sind die

Inkrementen der Ortskoordinate im Metall bzw. der Schlacke und Δt die dazugehörige Zeitschrittweite.

Für die Berechnung der Grenzflächenkonzentration innerhalb einer dreidimensionalen Zelle, werden die Spezieskonzentrationen in den jeweiligen Phase und für die Berechnung der Inkremente der Ortskoordinaten das Zellvolumen sowie die Phasenanteile der beiden flüssigen Phasen herangezogen, siehe 4.1.1 sowie Abb.7.

Das Stabilitätskriterium für den expliziten Fall des Stoffübergangs zwischen zwei Phasen ist

$$\frac{\Delta t}{\Delta x_{me} + \Delta x_{sl}} \left(\frac{D^{m/s}}{\Delta x_{sl}} + \frac{D^{s/m}}{\Delta x_{me}} \right) < \frac{1}{2} . \quad (11)$$

3.1.3 Strömungseinfluss

Im Kapitel 3.1.1 ist auf den erheblichen Einfluss der Strömung auf den Stoffübergang bereits eingegangen worden. Daher sollen in diesem Abschnitt die maßgeblichen Einflussfaktoren auf die Strömung beschrieben werden.

Die Strömung in Stahlpfannen wird durch einen Spülgasstrom, der mittels Spülsteinen in die Pfanne eingebracht wird, induziert. Die Größe der sich ausbildenden Gasblasen ist vom Aufbau des Spülsteins beeinflusst [20]. In der Stahlpfanne geht man bei niedrigen Spülraten von Blasendurchmessern zwischen 2 - 5 mm aus [21]. Hohe Spülraten führen hingegen zur Ausbildung einer stabilen Gasblase direkt über dem Spülstein [22].

Während des Aufsteigens der Blasen tritt der Einfluss der ursprünglichen Blasenbeschaffenheit jedoch weitgehend in den Hintergrund. Die Blasensäule wird in vier Bereiche unterteilt: Impuls-, Übergangs-, Auftriebs- und den Oberflächenbereich [22, 23, 24]. Der Impulsbereich ist gekennzeichnet vom Impulsaustausch zwischen der Gas- und Flüssigphase. Im darauf folgenden Übergangsbereich wird der eingetragene Impuls zur Gänze auf die flüssige Phase übertragen, daraufhin folgt der Auftriebsbereich. Treten die Gasblasen an die Oberfläche, so bildet die aufwallende Flüssigkeit mit den Gasblasen einen Staubereich. Die Strömungsrichtung der Flüssigkeit wird von der Vertikalen in eine horizontale Richtung umgelenkt und die Gasblasen entweichen aus der Flüssigkeit. Das Auftreten der verschiedenen Strömungsbereiche ist von der Gasspülrate abhängig [23 - 29].

Die Spülrate sowie Anzahl und Position der Spülsteine in der Pfanne stellt das wichtigste Steuerungsmittel in der Pfannenmetallurgie dar. Ihr Einfluss auf die Strömung in der Pfanne ist ausführlich untersucht worden und ist auch Teil gegenwärtiger Untersuchungen [10, 12, 23, 24, 25, 26].

3.2 Experimentelle Untersuchungen zur Entschwefelung in der Pfanne im Spiegel der Literatur

Der Vorgang der Entschwefelung wurde direkt im Stahlwerk durch die prozessbegleitende Probenentnahme von Schlacke und Metall von Andersson et al. [3] untersucht. Im Hinblick auf den Stoffübergang in einer Stahlpfanne wurden von Asai et al. [6], Deng [27] und Hirasawa et al. [28] Laborexperimente mit flüssigen Metallen und Schlacke durchgeführt. In [28] wurde flüssiges Kupfer als Metallphase verwendet. Des Weiteren wurden Laboruntersuchungen durchgeführt, bei denen das Metall und die Schlacke durch Wasser/Öl substituiert wurde [5, 12, 27]. In den Arbeiten [5, 6, 12, 27, 28] wurde der Einfluss der Gasspülrate, des Volumenverhältnisses zwischen Schlacken- und der Metallphase [28, 29] und der Lage des Spülsteins [12] auf die Stoffübergangsrate untersucht. In allen Arbeiten konnte gezeigt werden, dass die steigende Spülgasrate einen Anstieg der Stoffübergangsrate bewirkt und dass dieser Anstieg der Stoffübergangsrate für hohe Spülgasraten deutlich größer ist als für niedrige Spülgasraten. Erklärt wird dieser Effekt durch eine Oberflächenvergrößerung aufgrund von Schlackeneinzug ab einer bestimmten Spülgasrate. In [12] wurde mit Hilfe des Wassermodells auch der Einfluss der Schlackenviskosität und der Grenzflächenspannung zwischen den Phasen untersucht. Es konnte kein Einfluss der Schlackenviskosität festgestellt werden, allerdings wurde lediglich ein Viskositätsbereich zwischen 0.0323 und 0.0475 Pas betrachtet. Eine höhere Oberflächenspannung führte zu einer Erhöhung der Gasspülrate, bei der ein Schlackeneinzug eintritt. Des Weiteren wurde eine Beschleunigung des Stoffübergangs bei axialer Lage des Spülers gegenüber einer exzentrischen Spülerposition nachgewiesen [12].

In den Arbeiten von Chung et al. und Muhmood et al. [30, 31] wurden Phänomene, wie Turbulenzen an der Grenzfläche und spontane Emulgierung, unmittelbar an der Grenzfläche Stahl/ Schlacke anhand von Röntgenbildern untersucht. Eine chemische Reaktion, welche Grenzflächenphänomene wie Wellenbildung und spontanen Schlackeneinzug hervorruft, ist z.B. die Reaktion zwischen Al_{me} und SiO_2 zu Al_2O_3 und Si. Es wird angenommen, dass lokal auftretende chemische Reaktionen, Marangoni-Konvektion und natürliche Konvektion Turbulenzen an der Grenzfläche verursachen. Die sich über die Grenzfläche hinweg verändernde Strömung führt zu einer Instabilität der Grenzfläche Metall - Schlacke, die spontanen Schlackeneinzug zur Folge haben kann.

Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen wurden teilweise zur Berechnung des Stoffübergangskoeffizienten verwendet, diese werden im folgenden Abschnitt erörtert.

Stoffübergangskoeffizienten aus experimentellen Untersuchungen

Die Arbeiten von Asai und Kim [6, 12] hatten ihren Schwerpunkt in der Untersuchung von hohen Spülgasraten, mit 5 - 200 NI/(t min) sowie 50 - 1750 NI/min.

In den Arbeiten Deng und Hirasawa [27, 28, 29] wurden Versuchsanordnungen mit Tiegeldurchmessern von etwa 6 cm verwendet, das Spülgas wurde über Röhren mit einem Durchmesser von etwa 1 mm eingebracht. Das Volumenverhältnis zwischen Schlacke- und Metallphase betrug > 0.27 .

3.3 Modellierung blasengerührter Pfannen in der Literatur

Wie unter Kapitel 3.1.3 dargestellt, bewirkt die aus dem bei der Pfannenspülung eingebrachten Spülgas resultierende Blasensäule eine Bewegung des flüssigen Metalls und der Schlacke. Sämtliche Behandlungsschritte werden von diesem Strömungsfeld maßgeblich beeinflusst, weshalb es auch für die Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulation von großer Wichtigkeit ist, die Strömung gut zu modellieren.

Die Weiterentwicklung der Modellierung der Strömung und deren Evaluierung am Wassermodell wird schon seit vielen Jahrzehnten betrieben [20, 29 - 33]. Es stehen verschiedene Softwarepakete für Strömungssimulationen zur Auswahl.

3.3.1 Software für Strömungssimulationen

Es steht eine große Anzahl von kommerzieller als auch frei zugänglicher Software zur Modellierung von Strömungsproblemen zur Verfügung. Für die Anwendung an der gasgespülten Pfanne seien im Folgenden die üblichsten Softwarepakete angeführt.

Aus der Gruppe der kommerziellen Softwarepakete stehen die von Ansys angebotenen Programme Fluent und CFX zur Auswahl sowie das von CD-Adapco angebotene Programm STAR-CCM+. Der Bereich der frei zugänglichen Softwarepakete wird von OPENFOAM dominiert. [14, 32]

Fluent ist im Bereich der Strömungssimulationen insbesondere für metallurgische Aggregate das am häufigsten eingesetzte und am besten evaluierte Softwarepaket. Viele erforderliche Modelle werden zur Verfügung gestellt mit der Möglichkeit der Modellerweiterung mittels UDF's (user defined function), siehe 3.3.3, 3.3.4 und 3.3.5. Auch die Software CFX bietet eine ähnliche Auswahl an Modellen sowie deren Erweiterung mittels zusätzlicher Programme, CFX wurde jedoch bis dato selten zur Modellierung von metallurgischen Aggregaten verwendet und eine Evaluierung in diesem Anwendungsbereich ist daher ausständig. [14]

Die Software STAR-CCM+ bietet zur Modellierung der Turbulenz neben den herkömmlichen Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) -Modellen nur das rechenintensive Large Eddy Simulation (LES) -Modell an. Im Bereich der Mehrphasenströmung sind das Volume Of Fluid (VOF) sowie das Discrete Phase Modell (DPM) und Kombinationen dieser Modelle verfügbar. Diese Software wird häufig im Rahmen der Kernenergie, Energiegewinnung aus Ozeanen und Aerodynamik angewendet. [14]

OpenFoam ist im Bereich der Pfannenmodellierung eine häufig eingesetzte Software, es zeichnet sich durch die freie Zugänglichkeit, den einsehbaren und modifizierbaren Programmcode, aber auch durch einen erhöhten Programmieraufwand aus.

3.3.2 Einfluss der Pfannengeometrie

Die Modellierung des Stoffüberganges wurde bisher vorwiegend an einzelnen Gasblasen bzw. Tropfen vorgenommen, wobei das Hauptaugenmerk auf einer exakten Darstellung der Grenzfläche und der Strömung lag, siehe dazu [33, 34]. Dabei zeigt sich eine Tendenz von anfänglichen 2 D Modellen hin zu 3 D Modellen, die es ermöglichen, die Bewegung in allen drei Raumrichtungen abzubilden.

In den Modellen zur Pfannenbehandlung wurden bisher 2 D Ausschnitte mit symmetrischem Spülstein bzw. 3 D Ausschnitte mit zwei Spülsteinen in der symmetrischen Pfannenschnittebene verwendet, wobei die Strömung durch die Annahme einer flachen Wand an der Badoberfläche zusätzlich vereinfacht wurde [35, 36, 37].

3.3.3 Phasen (Metall-, Schlacke- und Atmosphäre)

In Fluent stehen für Simulationsaufgaben mit mehreren Phasen vorgefertigte Modelle zur Verfügung. Diese sind das Mixture Modell, das Eulerian Modell sowie das Volume of Fluid Modell (VOF). Weiters ist das Discrete Phase Modell (DPM) verfügbar.

Beim Mixture Modell werden die Phasen als sich gegenseitig vollständig durchdringend dargestellt. Die Bewegung der verschiedenen Phasen wird über die Zellgrenzen hinaus verfolgt, wobei die relative Geschwindigkeit zwischen den Phasen mittels empirisch hergeleiteten Formeln dargestellt wird. Eine klare Grenzfläche zwischen den Phasen ist nicht vorhanden. [14, 38]

Das Eulerian Modell bietet die Möglichkeit, alle benötigten Erhaltungsgleichungen für jede Phase zu lösen. Der Stoffübergang zwischen den Phasen ist mittels benutzerdefinierter Funktionen, sogenannter User defined Functions (UDF), möglich. Die Verwendung des Eulerian Modells ist limitiert durch den großen Speicherplatzbedarf und häufig durch Probleme im Konvergenzverhalten. Des Weiteren kann das Eulerian Modell nicht in Kombination mit dem Discrete Phase Modell (DPM) verwendet werden und das parallele Rechnen auf mehreren CPU's (Central Processing Unit) mit diesem Modell ist zur Zeit nicht möglich [14, 38]. Das DPM Modell ist jedoch bei Pfannensimulationen zur Modellierung der Gasspülung erforderlich, eine detaillierte Beschreibung des DPM-Modells erfolgt im Kapitel 3.3.4. Das parallele Rechnen einer Simulation ist ein wichtiges Werkzeug, um die Berechnung großer Modelle, wie z.B. das Modell der Stahlpfanne, zu beschleunigen. Dies kann als Hauptgrund dafür gesehen werden, dass das Eulerian Modell nicht für die Modellierung der Pfanne herangezogen wird.

Als Drittes steht das VOF Modell (Volume Of Fluid) zur Verfügung. Es ist für die Modellierung nicht mischbarer Flüssigkeiten geeignet und kommt dann zum Einsatz wenn die klare Darstellung der Grenzfläche von Interesse ist. Das VOF Modell kann auch ohne Einschränkung mit dem DPM Modell kombiniert werden. Dadurch ist es für die Modellierung der Pfanne das Geeignetste [14, 38].

Für Pfannensimulationen und im Speziellen für Arbeiten, deren Hauptinteresse Abläufe an der Grenzfläche sind, wird in den neuesten Arbeiten vorwiegend das VOF Modell herangezogen [12, 43 – 47]. Es dient der Darstellung der zwei inkompressiblen Phasen Metall und Schlacke sowie der darüber liegenden kompressiblen Gasphase. Um die Grenzfläche exakt darzustellen, wird in [14] das Diskretisierungsverfahren „Compressive“ empfohlen, es basiert auf der Arbeit von Ubbink [39].

3.3.4 Spülgas

Zur Vereinfachung wird in [10] die Gasspülung als Bereich mit geringerer Dichte dargestellt, aus dem die Strömung induziert wird. Die Modellierung der Form und Dichte des Spülgasbereiches erfolgt mittels empirischer Formeln, denen Wasserexperimente zugrunde liegen [10, 40, 41, 42]. Diese Herangehensweise bietet den Vorteil von geringem Rechenaufwand, ergibt jedoch ein vollkommen statisches Strömungsbild.

In neuerer Zeit ist es üblich, die Gasspülung mittels des DPM Modells darzustellen [43, 44, 45]. Die Bewegungsbahn der Partikel bzw. Gasblasen stellt dabei das Ergebnis des Kräftegleichgewichts dar. Die umgebende flüssige Phase wird als Kontinuum betrachtet, wofür die Erhaltungsgleichung gelöst wird.

Die Partikelbewegung wird dominiert vom Strömungswiderstand. Dieser ist wiederum von der Form, der relativen Geschwindigkeit und den Eigenschaften von Fluid und Partikel abhängig. Dieser Einfluss wird im Widerstandsbeiwert ausgedrückt und wird im DPM Modell berücksichtigt [22, 46, 31, 47, 48]. Für den Widerstandsbeiwert steht in Fluent ein Modell für sphärische Partikel zur Verfügung [14, 49].

Im Gegensatz zu Partikeln verformen sich aufsteigende Gasblasen, koaleszieren oder platzen auf, abhängig von den vorherrschenden Strömungsverhältnissen. Dieses Verhalten wird auch als Schwarmverhalten bezeichnet. Von Ishii und Zuber wurde ein spezielles Modell zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes von Gasblasen entwickelt [48] und in CFD implementiert und getestet [50]. Es stellt eine geeignete Wahl für die Modellierung des Widerstandsbeiwertes der Gasspülung dar und kann mittels UDF implementiert werden.

Des Weiteren ist für Fluid Partikel Systeme, in denen die Dichte des Fluides größer ist als die der Partikel, die Verwendung des Druckgradienten- und des Modells der virtuellen Masse empfohlen [14, 19, 38, 47]. Im Druckgradienten-Modell wird die zusätzliche Kraft F berücksichtigt, die aus

hohen Druckgradienten im Fluid stammt, und mit dem Modell der virtuellen Masse wird jene Kraft berücksichtigt, die zur Beschleunigung der Fluidmasse, welche das Partikel umgibt, erforderlich ist. Eine detaillierte Beschreibung befindet sich in [14].

3.3.5 Turbulenz

Die exakte Darstellung aller auftretenden Wirbel mittels Navier-Stokes Gleichung ist aufgrund der erforderlichen Rechnerressourcen nur für kleine Bereiche möglich. Für die meisten Anwendungen ist die exakte Darstellung der turbulenten Strukturen jedoch nicht erforderlich. Mittels der sogenannten RANS Modelle (Reynolds-averaged Navier-Stokes Modelle) genügt es zwei Erhaltungsgleichungen zu lösen, eine für die turbulente kinetische Energie und eine weitere für den Verlust der turbulenten kinetischen Energie.

Eine Kombination aus der direkten Lösung der Navier-Stokes Gleichung (DNS) und eines RANS Modells stellt das Large Eddy Simulations Modell (LES) dar. Hier werden Wirbel, die größer als eine Gitterzelle sind, exakt dargestellt, während kleinere Wirbel mittels eines RANS Modells modelliert werden [18, 19, 51, 52]. Es führt jedoch auch dieses Modell für große Geometrien zu einem erheblichen Rechenaufwand.

Das Scale Adaptive Simulation Modell (SAS-Modell), das ab der Version Fluent 14.0 verfügbar ist, stellt eine Weiterentwicklung im Bereich der RANS Modelle dar. Es ermöglicht es die mittels RANS errechneten Strömungsstrukturen an die tatsächlich vorliegenden, dynamischen und instationären Wirbel der Strömung heranzuführen [14, 53]. Damit ist die Abbildung der Strömung mittels SAS Modell ähnlich der von LES Simulationen bei einem Rechenaufwand ähnlich dem eines RANS Modells [54, 55, 56].

3.3.6 Modellierung des Stoffübergangs im Spiegel der Literatur

Beschrieben werden Arbeiten in denen der Stoffübergang an einer Grenzfläche modelliert wurde. Basierend auf Henry'schen Gesetz, Higbie's Penetrationstheorie, der Oberflächenerneuerungstheorie und der Filmtheorie wurde der Durchgang von einer Flüssigkeit in die Gasphase modelliert [34, 35, 56 – 64].

Die Modellierung des Stoffübergangs in Pfannen beruhte auf dem Löslichkeitsprodukt [35, 36, 37, 57, 58] denen Daten aus Experimenten zugrunde gelegt wurden. In einem Fall wurde ein Finite Differenzen Ansatz gewählt [59].

Im Folgenden wird zunächst auf die Modellierung des Stoffübergangs eingegangen und im Anschluss der Modellaufbau beschrieben.

Stoffübergang

In [59] wird der Stoffübergang vom Metall in die Schlacke mittels eines Finiten Differenzen Ansatzes modelliert, der Stoffübergang wird an den angrenzenden Knoten vorgenommen.

In vielen Arbeiten zur Modellierungen des Stoffübergangs wird der Durchgang von einer flüssigen Phase in eine Gasphase behandelt. [34, 60]

Weitere Arbeiten befassen sich mit dem Stoffübergang zwischen einem abtinnenden Flüssigkeitsfilms an einer Wand [60] sowie mit Tropfen und Gasblasen, die sinken oder aufsteigen [37, 38, 60 - 65, 67] und der sie umgebenden Phase.

Als physikalische Grundlage dient die Berechnung des Gleichgewichtsdampfdrucks bzw. der Gleichgewichtskonzentration in der Gasphase nach dem Henry'schen Gesetz [33, 34, 60, 61]:

$$c_l = c_g / H \quad (12)$$

Darin sind c_l und c_g die Konzentrationen in der flüssigen und der gasförmigen Phase. Die Henrykonstante H ist abhängig von der Flüssigkeit, der Gasphase, der übergehenden Spezies sowie vom Druck und der Temperatur.

Des Weiteren wurden Higbie's Penetrationstheorie und die Oberflächenerneuerungstheorie für den Stoffübergang von einer kontinuierlichen Phase in eine Gasphase angewandt [57, 62, 63]. Beide Modelle wurden für Tropfen oder Gasblasen entwickelt. In Higbie's Penetrationsmodell wird zur Berechnung des Stoffübergangskoeffizienten eine Kontaktzeit t herangezogen wie in Gleichung (13) dargestellt.

$$\beta = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{D_{eff}}{t}} \quad (13)$$

Der Stoffübergangskoeffizient β errechnet sich aus dem Diffusionskoeffizienten D_{eff} und der Kontaktzeit t . Für den Fall von Gasblasen oder Tropfen wird die Kontaktzeit aus dem Gasblasen- bzw. Tropfendurchmesser dividiert durch die mittleren Steig- oder Sinkgeschwindigkeit errechnet.

Eine Weiterentwicklung des Higbie's Modells stellt das Dankwerts Oberflächenerneuerungsmodell dar. Aufbauend auf Higbie's Modell geht Dankwert davon aus, dass die Kontaktzeit verschieden lang sein kann und einem Verweilzeitspektrum entspricht. Nach dem Ende der Verweilzeit wird das Fluidelement, das mit der Grenzfläche in Kontakt steht, von der Grenzfläche verdrängt und ein neues Fluidelement tritt mit der Grenzfläche in Kontakt. Dieses Modell wurde erfolgreich für die Absorption von Gasen in gerührten Flüssigkeiten angewendet. [7]

Des Weiteren wird die Filmtheorie zum Beispiel für die Verdunstungskühlung verwendet. Hier überzieht ein Wasserfilm eine feste, adiabatisch isolierte Wand. Über dem Wasserfilm befindet sich

ungesättigte Luft. Das Wasser verdunstet und wird von der Luft aufgenommen, sofern diese nicht wasserdampfgesättigt ist. Für die Anwendung der Filmtheorie wird ein Stoffübergangskoeffizient verwendet, der aus Experimenten hergeleitet wird. [7]

In den Arbeiten, die konkret die Pfannenbehandlung modellieren, wird das Löslichkeitsprodukt als Verteilungsparameter herangezogen [3, 37, 64]. Es dient als Basis zur Berechnung jener Menge die vom Metall in die Schlacke übergeht (Glg (14)); deren Herleitung ist in [64] zu finden.

$$L = \frac{(\% S)}{[\% S]} = c_s \cdot \frac{f_s \cdot K}{a_o} \quad (14)$$

Hierin steht L für den Verteilungskoeffizienten von Schwefel und $(\% S)$ sowie $[\% S]$ für die Konzentrationen von Schwefel in der Schlacken- und Metallphase. Dabei sind c_s die Sättigungskonzentration, die aus dem KTH (Royal Institute of Technology) Modell berechnet wird, f_s der Aktivitätskoeffizient des gelösten Schwefels im Stahl, a_o die Aktivität von Sauerstoff im Stahl und K die Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion Gl. (14). Zur Berechnung der Sauerstoffaktivität a_o , siehe Glg. (14) werden die Redoxreaktionen zwischen Metall und Schlacke abgebildet. Die Implementierung der Spezies Al_2O_3 , CaO , MgO , SiO_2 , MnO und FeO erfolgt jeweils mit einer eigenen Erhaltungsgleichung. [3, 64]

Eine ähnliche Vorgehensweise wird in der Arbeit von Lou [35, 36] gewählt. Zur Berechnung des Löslichkeitsproduktes wird das Modell von Shankar aus [65] herangezogen, die Sauerstoffaktivität wird hierin über die Redoxreaktionen der Elemente bestimmt. Die Berechnung der Sauerstoffaktivität erfolgt wie in [64]. Des Weiteren wird noch zwischen den Reaktionen an der Grenzfläche zwischen Metall–Schlacke und Metall–Gas am Schlackenauge unterschieden.

Das direkte Verknüpfen der Ergebnisse der Strömungssimulation mit einem thermodynamischen Modell für die Gleichgewichtsverhältnisse an der Grenzfläche wurde in [66, 67] vorgenommen. Hierin berechnet das thermodynamische Modell MTDATA (Metallurgical and Thermochemical Databank) jene Masse an Al, O und S, die zwischen der Metall- und Schlackenphase übergeht, um ein Minimum der Gibb's Energie zu erreichen.

Eine ganz andere Vorgangsweise für die Ermittlung des Stoffübergangs wählen [73, 74]. Hier ist die Geschwindigkeit der Metallphase für den Stoffübergang maßgeblich. Die Diffusion wird nicht berücksichtigt.

Strömung und Allgemeines

In [59] wird die Geschwindigkeit zur Grenzfläche und von der Grenzfläche weg in beiden Phasen als konstanter Wert vorgegeben und im konvektiven Teil der Erhaltungsgleichung berücksichtigt.

Für das Modell des ab rinnenden Flüssigkeitsfilms an einer Oberfläche wird die Erdbeschleunigung als geschwindigkeitsinduzierender Moment genutzt, eine Störfunktion sorgt für die nötige Wellenbildung [60]. Aufgrund der niedrigen Geschwindigkeit ist die Darstellung der Strömung durch das DNS-Modell möglich.

In den Arbeiten mit einzelnen Blasen und Tropfen gibt es ähnliche Ansätze wie für den Flüssigkeitsfilm; die Strömung wird mit dem DNS-Modell dargestellt sowohl für die bewegte [33, 34, 61, 68, 69] als auch für die unbewegte [63, 70, 71] Grenzfläche. Um die Modellierung der Strömung weiter zu verbessern wird von 2 D Modellen in späteren Arbeiten auf 3 D Modelle übergegangen [72].

Für die Simulation der Pfannenbehandlung wird zur Modellierung der Turbulenz durchwegs das RANS Modell $k - \varepsilon$ verwendet, wobei die Abbildung der Gasspülung mittels DPM Modell unter Verwendung des Modells für sphärische Partikel erfolgt. [3, 10, 35, 36, 56, 57, 62, 64, 66]

Modelle, in denen die Reaktionen von Spezies berücksichtigt sind, gehen immer mit der Reduktion des Modellbereichs einher. Es werden Pfannen mit zentrischem Spülstein betrachtet; dies ermöglicht eine symmetrische Randbedingung an der Achse und damit die Halbierung des Modells bzw. häufig die Anwendung eines 2 D axisymmetrischen Modells [3, 66, 67]. In den Arbeiten [35, 36] erfolgt eine 3 D Modellierung einer halben Pfanne. In den Arbeiten [35, 36] ist nur die Metallphase abgebildet und die Grenzflächenreaktion Metall - Schlacke als auch jene zwischen Metall - Luft am Schlackenaugen wird im Modell als Randbedingung realisiert. Die Berechnung der Größe des Schlackenaugenbereiches erfolgt mittels empirischer Formeln [42].

In [37] wird die Schlackenphase modelliert, was die Bewegung der Grenzfläche zwischen Metall und Schlacke ermöglicht, die Luft über der Schlacke ist nicht modelliert und anstelle der Luft befindet sich eine reibungsfreie Wand über der Schlacke. In [66, 67] ist auch der Luftraum über der Schlacke berücksichtigt, was die freie Bewegung der Schlackenoberfläche ermöglicht.

Aufgrund der in den Arbeiten [35, 36, 37] getroffenen Annahme einer Wand anstelle der freien Badoberfläche wird die modellierte Strömung durch das unmittelbare Umlenken an dieser verändert, siehe Kapitel 3.1.3. Dies führt vor allem im Fall von hohen Spülraten zu einer Verfälschung der Geschwindigkeit an der Grenzfläche und im darunter liegenden Metallbad.

Die exakte Darstellung der Strömung in der Pfanne ist sowohl für die Verteilung der Spezies in den Phasen als auch für die Abbildung von Grenzflächenphänomenen wie Schlackenaugenentwicklung und Wellenbildung von Bedeutung, diese beeinflussen den Stoffübergang.

4 Stoffübergangsmodell

In den bisherigen Arbeiten - siehe dazu auch Kapitel 3.3.6 - dienten als Basis zur Berechnung der übergehenden Stoffmenge einer Spezies das Henry-Gesetz, Higbie's und Dankwerts Oberflächenerneuerungsmodell als auch die Filmtheorie [7].

Das Henry-Gesetz kann nur in Gas-Flüssig Systemen verwendet werden. Zur Anwendung des Higbie's - und Dankwerts Modell ist es erforderlich die Kontaktzeiten bzw. das Verweilzeitenspektrum der Kontaktzeit zu kennen [7]. Beides ist für den Fall des Stoffübergangs zwischen Metall und Schlacke nicht verfügbar.

In den Arbeiten [3, 35, 36, 37, 64] werden die Gleichgewichtskonzentrationen an der Grenzfläche im Metallbad und in der Schlacke ermittelt und in den Erhaltungsgleichungen berücksichtigt. Eine Reduktion des Modells wurde erreicht indem nur die halbe Pfanne und diese zweidimensional modelliert wurde, dies ist aufgrund der axisymmetrischen Spülsteinanordnung möglich.

Das in dieser Arbeit vorgestellte Modell beruht auf dem Stoffübergangsmodell von der Wand in eine flüssige Phase, wie es in Fluent verwendet wird [14] und dem zweiten Fick'schen Gesetz. An der Grenzfläche zwischen den flüssigen Phasen wird die Spezies im Quellterm der Spezieserhaltungsgleichung dargestellt. In der Metallphase mittels negativem Quellterm und in der Schlacke mittels positivem Quellterm. Die Diffusion der Spezies in der Schlacke ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke wird im Folgenden ausgewertet, da dies der geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist, siehe dazu 3.1.1. Die im Modell verwendeten Gleichungen sind in Kapitel 3.1.2 beschrieben. Das Modell ist für die Anwendung in 3 D und daher für unsymmetrische Strömungssituationen geeignet. Eine detailliertere Darstellung des Modellablaufes folgt in Kapitel 4.1.

Chemische Reaktionen an der Grenzfläche sowie physikalische Effekte, wie die Veränderung der Oberflächenspannung durch unterschiedliche Speziesverteilung, werden nicht berücksichtigt.

4.1 Modellaufbau

Das Stoffübergangsmodell wurde für die Software Ansys Fluent Version 14.5 entwickelt und als UDF (user defined function) implementiert. Da das entwickelte Stoffübergangsmodell in der Computersprache C geschrieben wurde, ist es auch für die Einbindung in andere CFD-Programme geeignet. Die Ausführung des UDF's erfolgt am Ende jedes Zeitschrittes als sogenanntes „DEFINE_EXECUTE_AT_END“ Makro.

Im Folgenden ist erklärt welche Schritte für den Modellablauf erforderlich sind, welche Gleichungen verwendet werden und welche weiteren Schritte zur Modellierung notwendig sind.

4.1.1 Modellablauf und verwendete Gleichungen

Im Folgenden ist der Modellablauf für die Berechnung des Stoffübergangs an der Grenzfläche Metall - Schlacke dargestellt. Der Stoffübergang von der Wand in die Schlacke ist mit dem bereits implementierten Spezies-Modell von Fluent dargestellt worden, siehe dazu 5.1.2 sowie [14]. Das Berechnungsgebiet wird durch ein Gitter in Zellen unterteilt. Mittels einer Programmschleife wird jede Zelle im Gitter abgefragt und die angeführte Prozedur durchgeführt:

- a) Feststellen ob eine Grenzflächenzelle vorliegt
- b) Zuordnung zum entsprechenden Profil mittels des kritischen dimensionslosen Abstandes
- c) Berechnung des dimensionslosen Abstandes
- d) Zuordnung zum linearen bzw. logarithmischen Profil
- e) Berechnung der übergehenden Speziesmenge
- f) Setzen der Quellterme in den jeweiligen Speziestransportgleichungen
- g) Berechnung der Grenzflächenkonzentration
- h) Ende der Prozedur

a) Es wird festgestellt, ob eine Zelle eine Grenzfläche beinhaltet. Dies erfolgt mittels des Produktes der Phasenanteile, hier Stahl und Schlacke.

b) Liegt eine Grenzfläche in der Zelle vor, so erfolgt die Zuordnung zum linearen bzw. logarithmischen Profil. In jeder Zelle wird der kritische dimensionslose Abstand y_c^* berechnet. Die Ermittlung erfolgt anhand Glg (15); diese wird wie folgt bestimmt:

Für den Schnittpunkt zwischen dem linearen und logarithmischen Profil gilt, dass die dimensionslosen Speziesflüsse Y_{lin}^* und Y_{log}^* gleich groß sind, siehe 3.1.2. Für eine Schmidt-Zahl von $Sc^{m/\underline{s}} = 500\ 000$ - $Sc^{m/\underline{s}} = \eta_{sl}/(\rho_{sl} \cdot D^{m/\underline{s}})$ - sind die dimensionslosen Speziesflüsse in Abhängigkeit vom dimensionslosen Abstand in Abb. 5 dargestellt.

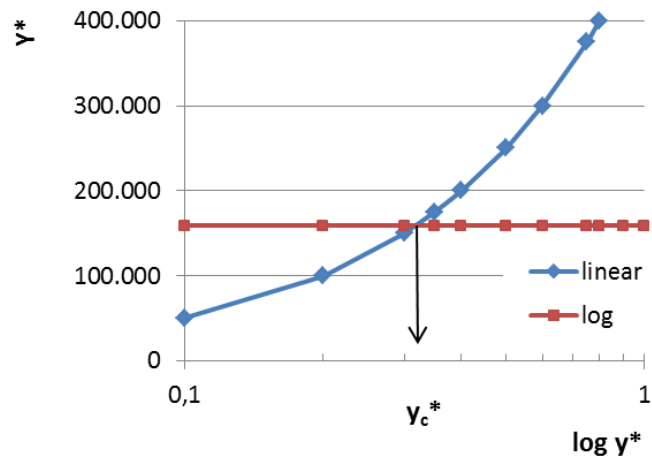


Abb. 5: Dimensionsloser Stoffübergang an der Wand Y^* in Abhängigkeit vom dimensionsloser Abstand y^* , für das $\text{---}\blacklozenge\text{---}$ lineare und das $\text{---}\blacksquare\text{---}$ logarithmische Profil, y_c^* ...kritischer dimensionsloser Abstand, am Beispiel von $Sc^{m/s} = 500\,000$

Der kritische dimensionslose Abstand y_c^* wurde durch Interpolation der zwei Geradengleichungen, der am Kurvenschnittpunkt angrenzenden Punkte, berechnet. Es wurden Geradengleichungen für die jeweils unter und über dem Schnittpunkt liegenden Y_{lin}^* - bzw. Y_{log}^* - Werte aufgestellt; Gleichsetzen dieser führt zu y_c^* . Dazu wurden in $1/10$ Abständen von y^* die dimensionslosen Speziesflüsse Y_{lin}^* und Y_{log}^* graphisch dargestellt. Die Reduktion des y^* - Abstandes von 0.1 auf 0.05 bringt eine Änderung in der 7. Nachkommastelle von y_c^* und die Bestimmung wurde daher als ausreichend genau angenommen.

Die kritischen dimensionslosen Abstände y_c^* wurden wie zuvor beschrieben für einen Viskositätsbereich von η_{sl} 0.07 – 0.77 [Pas] bei einem Diffusionskoeffizienten von $D^{m/s} = 4.14 \cdot 10^{-10}$ [m²/s] berechnet und in Abhängigkeit von der Schmidt-Zahl $Sc^{m/s}$ aufgetragen, siehe Abb. 6.

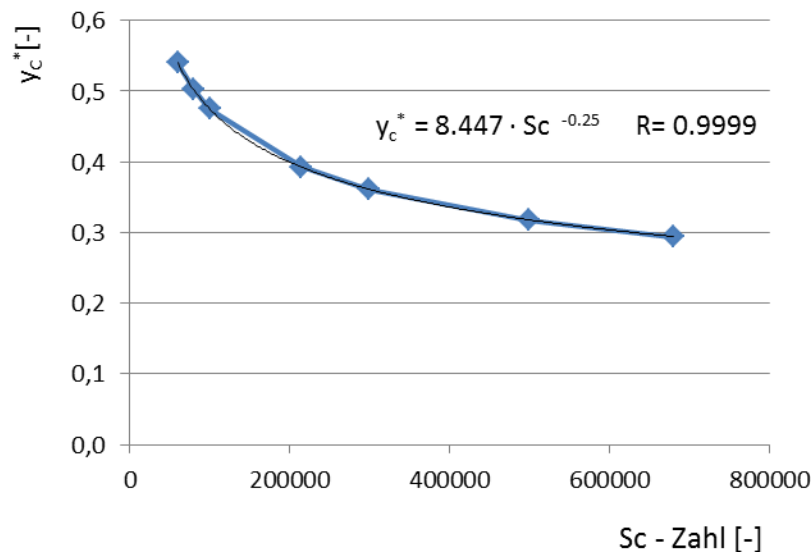


Abb. 6: Die kritischen dimensionslosen Abstände y_c^* in Abhängigkeit von der Schmidt - Zahl $Sc^{m/s}$, sowie das sich ergebende Potenzgesetz und dessen Bestimmtheitsmaß

Das ermittelte Potenzgesetz für den Stoffübergang Metall - Schlacke ist in Glg. (15) angeführt, siehe dazu auch 3.1.2.

$$y_c^* = 8.447 \cdot Sc^{m/\bar{s} - 0.25} \quad R = 0.9999 \quad (15)$$

Als obere Grenze des Gültigkeitsbereiches wird das 10-fache von y_c^* lt. Literatur [14, 18, 19] angenommen.

c) Für die Zuordnung zum linearen bzw. logarithmischen Profil ist des Weiteren die Berechnung des dimensionslosen Abstandes y^* erforderlich, siehe Glg. (7).

d) Liegt y^* unter dem kritischen dimensionslosen Abstand y_c^* , so ist das lineare Profil anzuwenden, andernfalls das logarithmische Profil. Ist der dimensionslose Abstand größer als das 10-fache des kritischen dimensionslosen Abstandes, so ist das Gitter in diesem Bereich zu grob.

Liegen Zellen außerhalb des Gültigkeitsbereiches vor, so kann die Möglichkeit einer Gitterverfeinerung geprüft werden.

e) Die übergelagerte Speziesmenge m lässt sich durch Gleichsetzen der rechten Teile von Glg. (6) und

Glg. (8) für das lineare Profil mit

$$m = D^{m/\bar{s}} \cdot \frac{(c_{ij}^{if} - c_{i+1j}^{sl})}{\Delta x_{sl}} \cdot A \cdot \Delta t \quad (16)$$

und für das logarithmische Profil durch Gleichsetzen der rechten Teile von Glg. (6) und (9) mit

$$m = \frac{(c_{ij}^{if} - c_{i+1j}^{sl}) C_\mu^{1/4} k_p^{1/2} A \Delta t}{Sc_t \left[\frac{1}{\kappa} \ln(E y^* + P_c) \right]} \quad (17)$$

berechnen, siehe 3.1.2.

Zur Berechnung der übergelagerten Speziesmenge nach Glg. (16) und (17) sowie der Grenzflächenkonzentration aus Glg. (10) sind die Konzentrationen der Spezies in den Phasen erforderlich. Im Folgenden ist die Berechnung dieser Werte aus den in Fluent verfügbaren Daten beschrieben.

Die erforderlichen Konzentrationen c_{i+1j}^{sl} in den Phasen errechnen sich aus dem Produkt der Massenfraktionen w_{i+1j}^{sl} und der Dichten ρ_{sl} . In Glg. (18) ist diese Berechnung am Beispiel der Schlackenkonzentration angeführt, der Index sl bezeichnet das Metallbad und die Schlacke.

$$c_{i+1j}^{sl} = w_{i+1j}^{sl} \cdot \rho_{sl} \quad (18)$$

Des Weiteren lässt sich das Inkrement der Ortskoordinate Δx_{sl} , Δx_{me} aus dem Produkt von Zellhöhe h und dem Phasenanteil α_{sl} bestimmen, siehe Abb.7 und Glg. (19) für die Schlacke.

$$\Delta x_{sl} = \frac{\alpha_{sl} \cdot h}{2} \quad (19)$$

Diese Vereinfachung ist erforderlich da keine weiteren Daten aus der Zelle zugänglich sind.

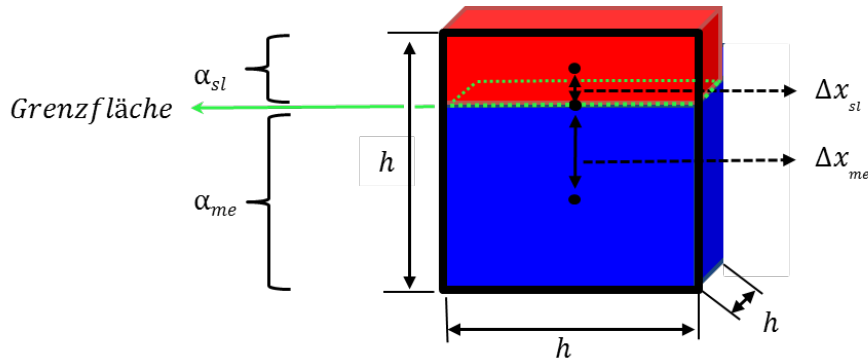


Abb.7: Darstellung einer Zelle mit der waagrechten Grenzfläche Metall-Schlacke, der Seitenlänge h , Phasenanteilen der Schlacken- und Metallphase α_{sl} , α_{me} und den Inkrementen Δx_{sl} , Δx_{me}

Für Gitter mit Zellen von gleichen Seitenlängen, kann für die Ermittlung der Seitenlänge h das Zellvolumen V_{Zelle} herangezogen werden.

$$h = \sqrt[3]{V_{Zelle}} \quad (20)$$

f) Die Übergabe der Speziesmenge wird mittels einer positiven Quelle, als sogenanntes „DEFINE_SOURCE“ Makro, in jener Phase, in der die Stoffmenge ansteigt - hier in der Schlacke - und einer negativen Quelle in der Phase, in der die Stoffmenge abnimmt – hier das Stahlbad – realisiert.

g) Die Grenzflächenkonzentration wird im ersten Zeitschritt als Mittelwert aus den Metall- und Schlackenkonzentrationen errechnet. Für die nächsten Zeitschritte wird die Grenzflächenkonzentration c_{ij+1}^{if} nach Glg. (10) berechnet und in einem „UDM“ (user defined memory) gespeichert, um für den jeweils darauffolgenden Zeitschritt zur Verfügung zu stehen.

h) Damit ist das Ende der Prozedur erreicht und die nächste Zelle wird geprüft. Beinhaltet die Zelle keine Grenzfläche, so endet die Prozedur unmittelbar.

In Abb. 8 ist der Programmablauf des Modells dargestellt.

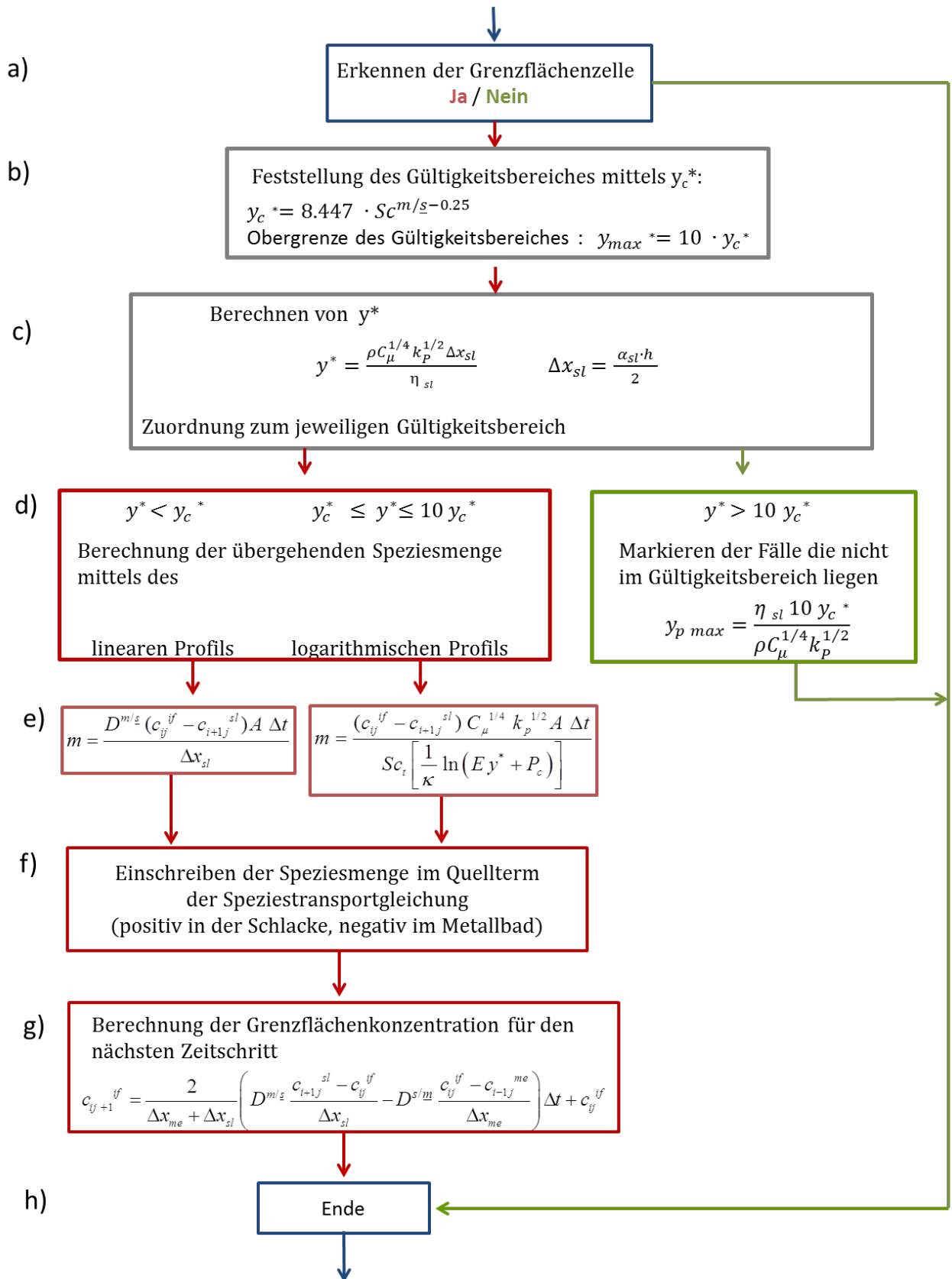


Abb. 8: Fließschema des Stoffübergangsmodells, Prüfung ob eine Grenzflächenzelle vorliegt (a), Feststellung des Gültigkeitsbereiches (b), Berechnung des vorliegenden dimensionslosen Abstandes (c), Zuordnung zum Gültigkeitsbereich (d), Berechnung der übergelenden Speziesmenge (e), Menge im Quellterm eintragen (f), Berechnung der Grenzflächenkonzentration (g), Ende der Schleife für eine Zelle (h)

4.1.2 Datenauswertung und Berechnung der Stoffübergangskoeffizienten

Mittels UDF (user defined function) werden die erforderlichen Daten wie Zeitschrittweite, Speziesmenge, Volumen der Phasen, die gemittelten Grenzflächenkonzentrationen, der gemittelte Betrag der Geschwindigkeit an den Grenzflächen und die Größe der Grenzfläche laut [14] in eine Datei ausgelesen. [73]

Die Berechnung des Stoffübergangskoeffizienten β erfolgt laut Glg. (21), siehe dazu [1]

$$\beta = \frac{\Delta m}{\Delta t \cdot A \cdot (c_{ini}^{if} - c_{ini}^{sl})} \quad (21)$$

Darin steht Δm für die Speziesmasse, Δt für die Zeitschrittweite, A für die Grenzfläche und c_{ini}^{if} , c_{ini}^{sl} für die anfängliche Grenzflächen- und die anfängliche Schlackenkonzentrationen. Die Daten zur Berechnung des Stoffübergangskoeffizienten wurden in einem Berechnungsabstand von 0.05 sec ausgelesen. Die sich ergebenden Stoffübergangskoeffizienten werden über ein Zeitintervall von ca. 10 – 20 sec gemittelt. Es handelt sich bei den resultierenden Stoffübergangskoeffizienten daher um eine zeitlich und örtlich gemittelte Größe.

4.2 Erprobung und Validierung des Stoffübergangsmodells

Das Stoffübergangsmodell ist unter Kapitel 4.1 detailliert beschrieben, es wird im Folgenden mit **FD in CFD** bezeichnet. Die Validierung des Modells erfolgt anhand eines expliziten eindimensionalen finiten Differenzenmodells, im Folgenden auch mit **FD** bezeichnet.

Zur Erprobung und Validierung des Stoffübergangsmodells wurde ein einfaches Geometriemodell erstellt. Es handelt sich dabei um einen Quader in 3 D, welcher mit den beiden Phasen - Metall und Schlacke - befüllt ist, siehe Abb. 9. Das Rechengitter für das 3 D Modell weist eine Höhe von 0.10 m, eine Breite von 0.05 m und eine Tiefe von 0.15 m auf und wurde mit der Software Gambit erstellt. In der Höhe und Breite wurden 20 Zellreihen angelegt und drei in die Tiefe, damit besteht das Rechengitter aus 1200 Zellen.

Das **FD**-Modell als auch die **CFD**-Modelle weisen in Diffusionsrichtung jeweils die gleichen Abmessungen auf. Da Konvektion im **FD**-Modell nicht berücksichtigt werden kann, sind auch die **CFD**-Modelle für die Validierung ohne Konvektion ausgeführt. Um den Einfluss der Konvektion auf den Stoffübergang darzustellen und das Modell in dieser Hinsicht zu erproben, wurde im **CFD**-Modell mittels stationärer und instationärer Wirbel Konvektion initiiert, siehe Kapitel 4.2.3. Die verwendeten Materialdaten für die Validierung und Erprobung des Stoffübergangsmodells sind in Tab. 1 aufgelistet. Es wurde dabei nicht auf eine realistische Größenordnung der Diffusionskoeffizienten Wert gelegt.

	$D^{s/m}$ [m ² /s]	ρ_{me} [kg/m ³]	$D^{m/s}$ [m ² /s]	ρ_{sl} [kg/m ³]
Fall 1:	3.46e-3	2700	3.46e-3	2700
Fall 2:	3.46e-3	7000	3.46e-3	2700
Fall 3:	3.46e-3	7000	3.46e-6	2700

Tab. 1: Materialdaten der Metall- und Schlackenphase für die Validierung; D effektive Diffusionskoeffizient, ρ ... Dichte; die Indizes s/m , m/s , me , sl bezeichnet in der Metallphase zur Grenzfläche Metall - Schlacke, in der Schlackenphase zur Grenzfläche Schlacke - Metall Metall und Schlacke

4.2.1 Grenzflächeninitialisierung

Die Erkennung der Zellen die eine Grenzfläche enthalten, erfolgt mit dem Produkt der Phasenanteile, siehe 4.1.1. Bei dieser Methode werden jedoch jene Zellen mit einer Grenzfläche nicht erkannt, bei denen die Grenzfläche exakt mit der Zellgrenzfläche zusammenfällt. Dieser Fall ist bei einer Strömungssimulation nicht zu erwarten, da aufgrund der Strömung eventuell zusammentreffende Grenzflächen, nicht bestehenbleiben. Bei konstruierten Testfällen, wie sie in 4.2 verwendet werden, trifft dies jedoch zu.

Die Patch-Funktion von Fluent füllt eine Zellschicht, welche in jeder Zelle zwei Phasen enthalten sollte, derart, dass ein Teil der Zellen vollständig mit der ersten Phase und die restlichen Zellen mit der zweiten Phase befüllt sind.

Daher erfolgte die Initialisierung der Phasen mit dem in Fluent vorhandenen Makro „DEFINE_INIT“. In Abb. 9 ist eine vordefinierte Phasenverteilung für ein einfaches Modell dargestellt.

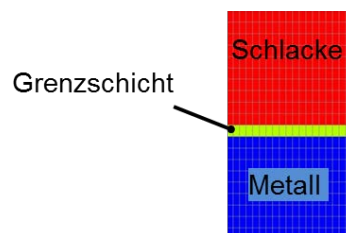


Abb. 9: Grenzschicht zwischen der Metall und Schlackenphase

In Abb. 9 ist zwischen der Metallphase (blau) und der Schlackenphase (rot) die Grenzschicht (grün) mit einem 50%igen Phasenanteil von Metall und Schlacke zu sehen. Die Vorgabe einer Grenzschicht mit einem Phasenanteil von Metall und Schlacke von 50% wurde in allen Simulationen durchgeführt.

Eindimensionales Finite Differenzen Modell

Beim *FD*-Modell erfolgt die Berechnung unter Verwendung der in 3.1.2 und [7] angeführten Gleichungen mit der Software Microsoft Excel. Abb. 10 zeigt schematisch den Aufbau des *FD*-Modells.



Abb. 10: Schema *FD*-Modell; Δx Inkrement der Ortskoordinate

Für das *FD*-Modell erfolgte die Berechnungen mit einer Zeitschrittweite Δt von 0.0001 s und einem Gitter mit einer Intervalllänge Δx von 0.005 m. Das Stabilitätskriterium gemäß Glg. (11) ist erfüllt, die linke Seite hat den Wert 0.01386. Als Anfangsbedingung ist die Konzentration der Spezies im Schlackenbad mit 0 kg/m^3 bzw. 324 kg/m^3 im Metallbad vorgegeben worden. An der Wand liegt eine Diriclet-Randbedingung mit einer Konzentration von 0 kg/m^3 vor.

Zeitschrittweiten- und Gitterunabhängigkeit

Für die Prüfung der Gitterunabhängigkeit in Diffusionsrichtung wurde die 3 D Quader-Geometrie bei gleicher Zellenanzahl in alle Richtungen um eine Zehnerpotenz vergrößert, womit sich in Diffusionsrichtung eine Vergrößerung von 0.005 auf 0.050 m ergibt. Damit entsprechen die Zellgrößen jenen wie sie auch für große Geometrien, wie Pfannen, üblich sind. Zur Prüfung der Zeitschrittweiten- und Gitterunabhängigkeit wurden Simulationen ohne Konvektion mit den Materialdaten von Fall 3 und Fall 2 lt. Tab. 1 durchgeführt. Die getesteten Zeitschrittweiten betragen 0.0001, 0.001 und 0.01 sec und die Zellhöhe in Diffusionsrichtung wurde zwischen 12.5, 25 und 50 mm variiert.

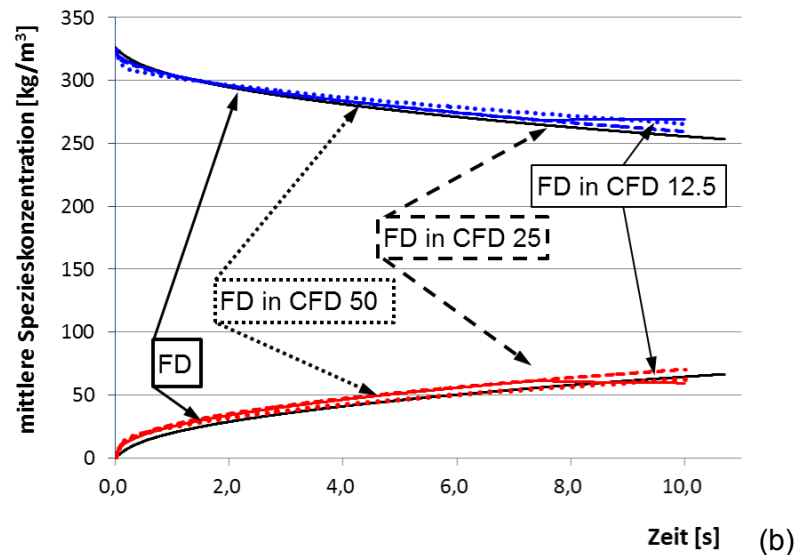
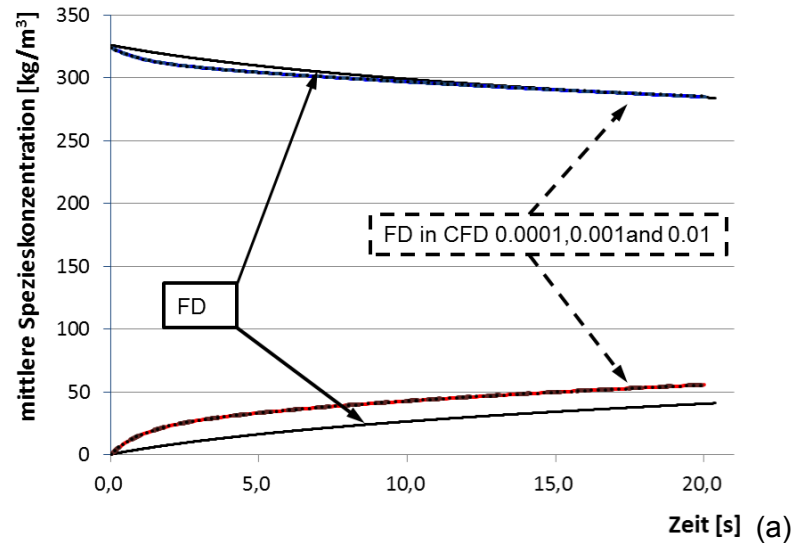


Abb. 11: Prüfung der (a) Zeitschrittweiten- (Fall 3, lt. Tab. 1) und (b) Gitterunabhängigkeit (Fall 2, lt. Tab. 1); mittlere Spezieskonzentration in der Metall- und Schlackenphase, blaue und rote Kurve, in Abhängigkeit von der Zeit, eine Spezies diffundiert von der flüssigen Metallphase in die flüssige Schlackenphase.

Mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten kommt es zu keiner merklichen Beeinflussung des Ergebnisses, siehe Abb. 11 (a). Die Gitterverfeinerungen führen zu einer leichten Verschiebung der Simulationsergebnisse (*FD in CFD*) hin zu jenen des *FD* - Modells, siehe Abb. 11 (b).

Auf Basis dieser Ergebnisse kann geschlossen werden, dass das Modell in ausreichend großen Wertebereichen als zeitschrittweitenunabhängig und gitterunabhängig angesehen werden kann.

4.2.2 Validierung am konvektionsfreien Fall

Die mit dem *FD*-Modell für den Fall 1 und 2 (siehe Tab. 1) erzielten Konzentrationen und Massenanteile der Spezies in den beiden Phasen in Abhängigkeit von der Zeit sind in Abb. 12 dargestellt.

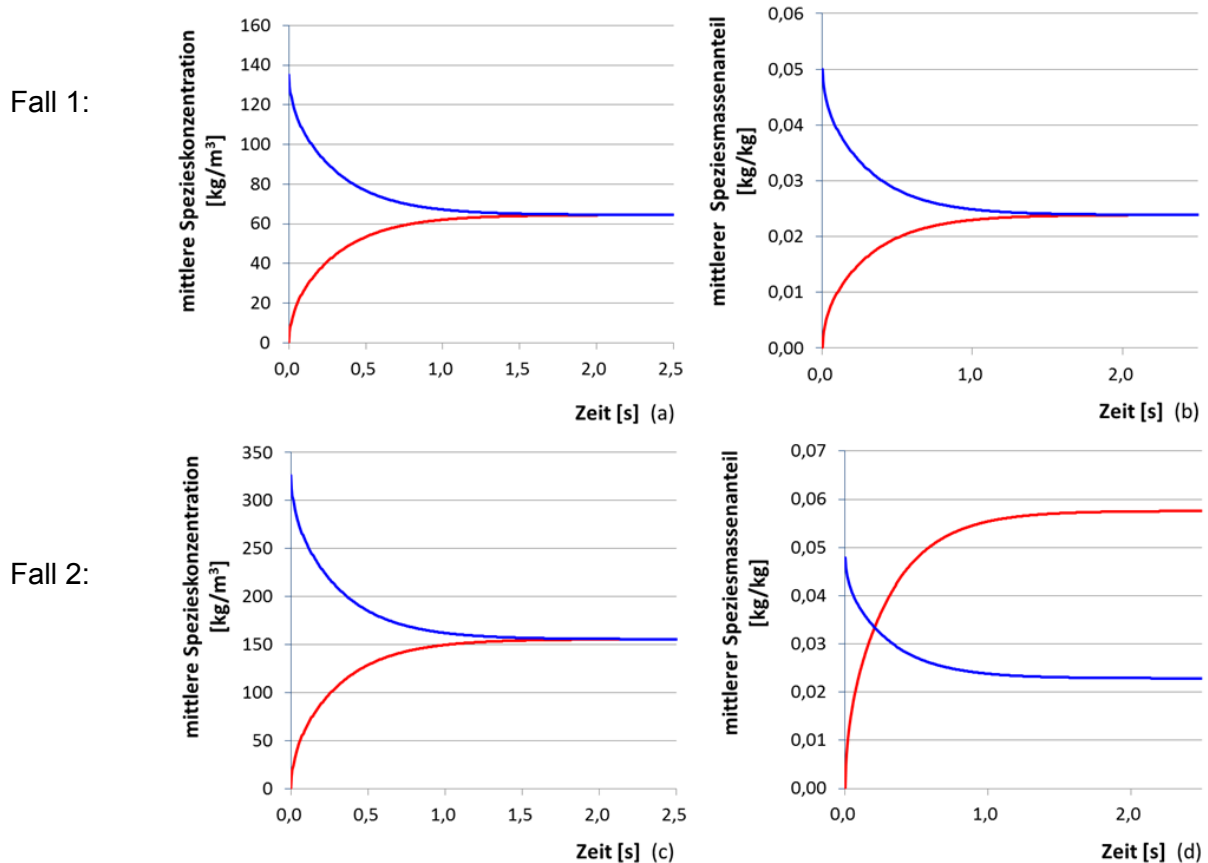


Abb. 12: Mittlere Konzentration und mittlerer Massenanteil der Spezies in der Metall- und der Schlackenphase, blaue und rote Kurve, in Abhängigkeit von der Zeit für Fall 1 lt. Tab. 1 (a) und (b) sowie für Fall 2 lt. Tab. 1 (c) und (d)

Der Stoffübergang aufgrund des Konzentrationsunterschiedes an der Grenze führt zum Konzentrationsausgleich, Abb. 12 (a)(c). Durch die gleichen Dichten der beiden Phasen kommt es auch zu einem Ausgleich des Massenanteils auf einen mittleren Wert, Abb. 12 (b). Eine höhere Dichte im Metall führt hingegen zu einem Anstieg des Massenanteils in der Schlacke über den des Metalls, Abb. 12 (d).

In Abb. 13 sind die Ergebnisse des *FD*-Modells und des Stoffübergangsmodells (*FD in CFD*) für die Berechnung mit unterschiedlichen Dichten der beiden Phasen dargestellt. Während für Fall 2 gleiche Diffusionskoeffizienten der Spezies in beiden Phasen angenommen werden, werden im Fall 3 ein geringerer Diffusionskoeffizient jener Phase, in welche die Spezies eindiffundiert, definiert, siehe Tab. 1.

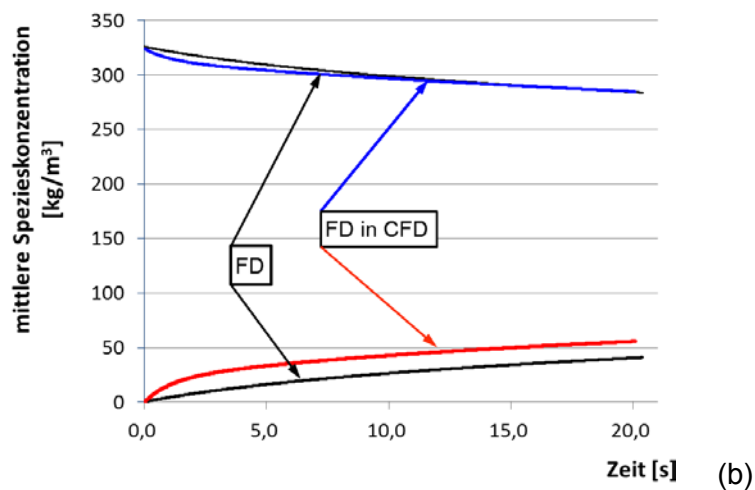
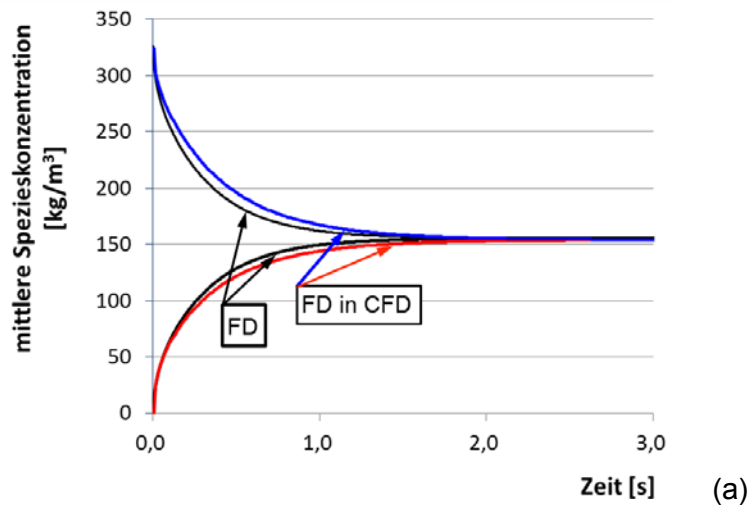


Abb. 13: Mittlere Spezieskonzentration in der Metall- und der Schlackenphase, blaue und rote Kurve, in Abhängigkeit von der Zeit für Fall 2 (a) und Fall 3 (b) lt. Tab. 1 berechnet mittels *FD*-Modell und *FD in CFD*-Modell

Im Fall 2 (Abb. 13 (a)) mit hohen Diffusionskoeffizienten in beiden Phasen errechnet das *FD*-Modell den rascheren Stoffausgleich; die mittlere Spezieskonzentration liegt im Mittel um 3.30 % über dem des *FD in CFD* - Modells.

Im Fall 3 (Abb. 13 (b)) ist die verzögernde Wirkung des geringen Diffusionskoeffizienten in der Schlacke deutlich zu erkennen; nach 20 sec ist bei weitem noch kein Konzentrationsausgleich erreicht. Für den Fall gleicher Diffusionskoeffizienten der Spezies ergibt sich ein geringfügig rascherer Stoffübergang für das *FD* Modell gegenüber dem *FD in CFD* Modell (Abb. 13 (a)); diese Reihenfolge ändert sich für Fall 3. Die Ergebnisse beider Modelle sind in guter Übereinstimmung (Abb. 13 (b)).

4.2.3 Einfluss der Konvektion

Um den Einfluss der Konvektion auf den Stoffübergang zu berücksichtigen und das Modell in der Hinsicht zu erproben, wurde in zwei Schritten vorgegangen. Als erstes wurden zwei stationäre Wirbel mittels UDF erzeugt, sodass sich in beiden Phasen, mit jeweils gleichem Abstand zur Grenzfläche ein Wirbelfeld ausbildet. Die Lösung der Erhaltungsgleichungen für die Turbulenz wurde in diesem Fall deaktiviert, wodurch die Geschwindigkeitskomponenten des Wirbels während der gesamten Simulationszeit gleichblieben und damit auch die ebene Grenzfläche. Die Wirbel weisen den gleichen Drehsinn auf, womit die Scherung an der Grenzfläche maximiert wird.

Des Weiteren wurde, um die numerische Stabilität hinsichtlich einer bewegten Grenzfläche zu prüfen, Konvektion mit einer in Fluent vorgegebenen Funktion, der sogenannten „Framemotion“, erzeugt. Die Erhaltungsgleichungen für die Turbulenz werden dabei gelöst und durch die unsymmetrische Anordnung der Wirbel kommt es zur Verschiebung der Grenzfläche.

Als Anfangsbedingung ist die Konzentration der Spezies im Schlackenbad mit 0 kg/m^3 bzw. 324 kg/m^3 im Metallbad vorgegeben worden. An der Wand liegt eine Diriclet Randbedingung mit einer Konzentration von 0 kg/m^3 vor und die Geschwindigkeit auf der Wand ist mit Null vorgegeben – no-slip. Es wurde für diese Simulationen eine 3 D Quadergeometrie verwendet, die um eine Zehnerpotenz vergrößerte wurde.

Stationärer Wirbel

Die Wirbelgenerierung erfolgt bei der Initialisierung durch ein sogenanntes „DEFINE_INIT“ Makro. Mittels UDF kann die maximale Geschwindigkeit des Wirbels entlang eines eingeschriebenen Kreises sowie dessen Größe und Lage vorgegeben werden. Die Geschwindigkeitskomponenten in jeder einzelnen Zelle werden mit Hilfe der Winkelfunktionen berechnet. Die Materialdaten entsprechen denen von Fall 3 in Tab. 1., siehe Abb. 14.

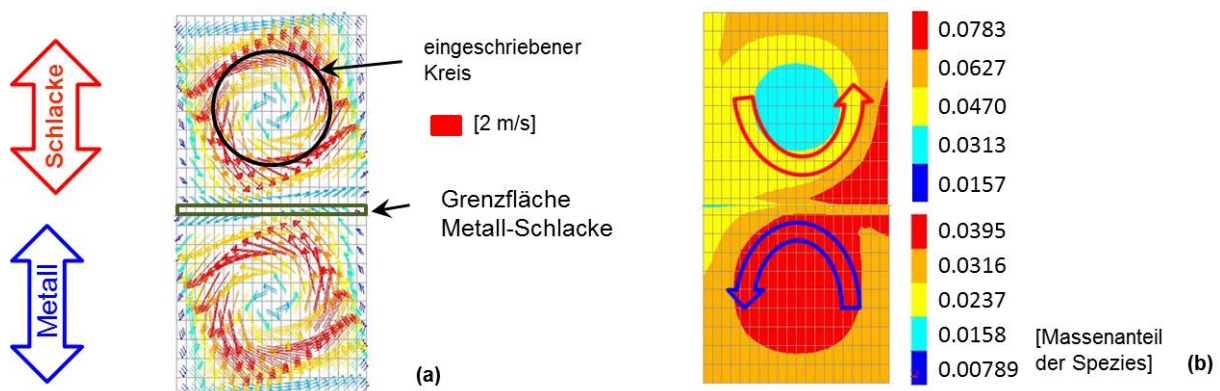


Abb. 14: Geschwindigkeitsvektoren entlang eines eingeschriebenen Kreises in den beiden Phasen mit deren maximaler Geschwindigkeit von 2 m/s, sowie der Grenzfläche Metall - Schlacke, im 3 D Quadermodell (a), Massenanteilsverteilung der Spezies zwischen den beiden Phasen nach 3 sec Stoffübergang (b) für Fall 3 in Tab. 1

In der Metallphase wird die Spezies durch den Wirbel an die Phasengrenzfläche transportiert, was auf der rechten Seite der Metallphase zur Entstehung einer Region mit höherer Konzentration führt, Abb. 14 (b). An der Grenzfläche findet dann der Stoffübertrag von der Metallphase in die Schlackenphase statt. In der Schlackenphase wird die Spezies von der Grenzfläche aufgrund des Wirbelfeldes abtransportiert, was zur Entstehung der Region mit hoher Spezieskonzentration auf der rechten Seite führt. Dies entspricht der zu erwartenden Konzentrationsverteilung durch den Einfluss der Wirbel.

Basierend auf diesem Modell wurde eine Parameterstudie durchgeführt, um den Einfluss der Konvektion auf den Stoffübergang darzustellen. Dazu wurden für den Fall 2 in Tab. 1 Berechnungen für drei unterschiedliche maximale Geschwindigkeiten der Wirbel von 0.001, 1.0 und 2 m/s, durchgeführt. Das entsprechende örtliche Mittel an der Grenzfläche Metall - Schlacke beträgt 0.0003, 0.309 und 0.6180 m/s, siehe Abb. 15.

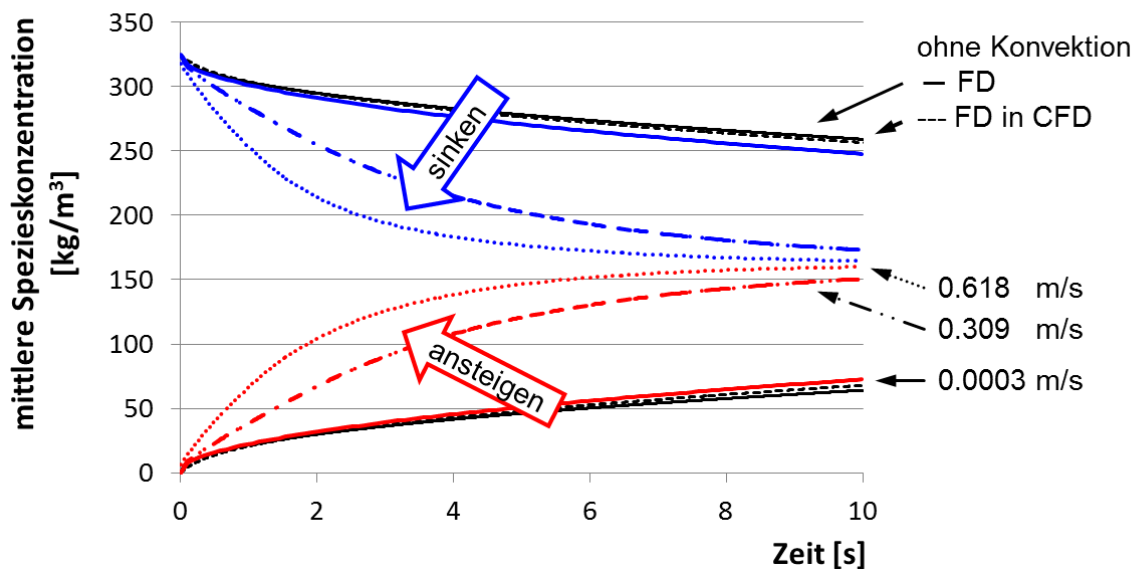


Abb. 15: Mittlere Konzentration der Spezies in der Metall- und Schlackenphase, blaue und rote Kurven, in Abhängigkeit von der Zeit unter dem Einfluss von Konvektion für drei Geschwindigkeiten an der Grenzfläche (0.0003, 0.309 und 0.618 m/s), sowie ohne Konvektion berechnet (mittels *FD*-Modell und *FD in CFD*-Modell) für Fall 2 in Tab. 1

Die durchgezogenen und gestrichelten schwarzen Linien in Abb. 15 sind jeweils die Ergebnisse der Fälle ohne Konvektion des *FD*- und des *FD in CFD*-Modells. Deutlich erkennbar ist die Beschleunigung des Stoffübergangs aufgrund der steigenden Geschwindigkeiten an der Grenzfläche von 0.0003 – 0.618 m/s.

Instationärer Wirbel

Um die Funktion „Frame Motion“ nutzen zu können, muss jener Gitterbereich, innerhalb dessen die Bewegung initiiert wird bzw. stattfindet, in einer eigenen Zellzone separiert werden. Die Vorgabe der Rotationsgeschwindigkeit auf den separierten Zellzonen erfolgt dann in Fluent unter „Cell Zone Conditions“ und „Frame Motion“. Abb. 16 zeigt die Geschwindigkeitsvektoren der unsymmetrischen Wirbel im 3 D Quadermodell mit der bewegten Grenzfläche sowie die Speziesverteilung in der Schlackenphase dargestellt in Massenanteilen.

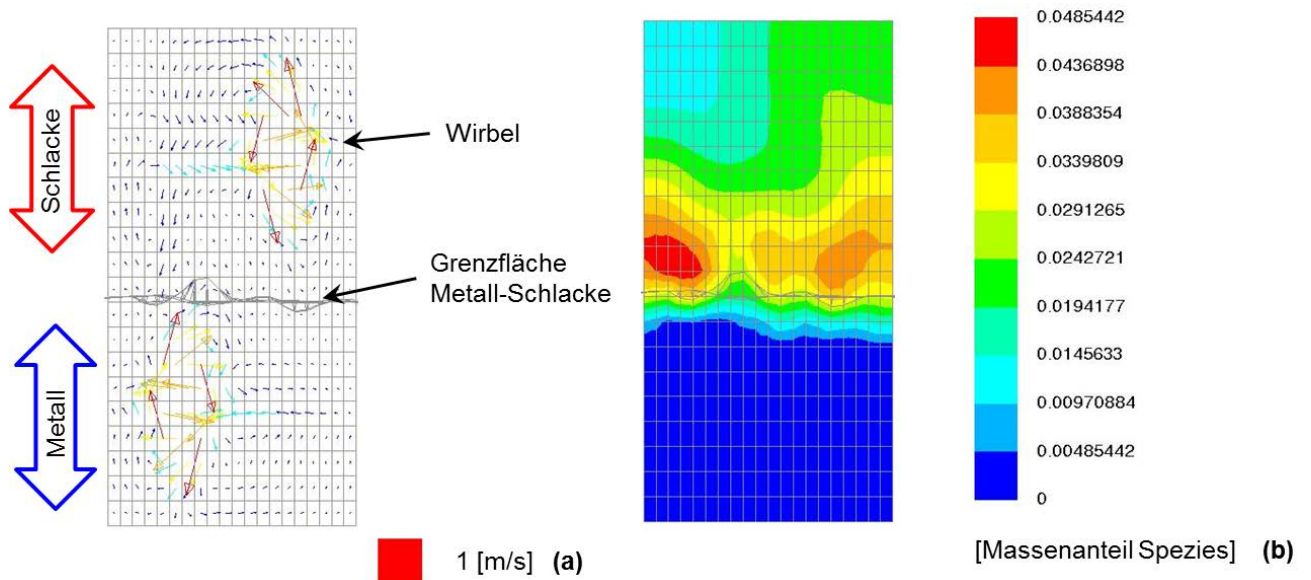


Abb. 16: Geschwindigkeitsvektoren der unsymmetrischen Wirbel mit der bewegten Grenzfläche im 3 D Quadermodell (a), Speziesverteilung in der Schlackenphase in Massenanteilen nach 10 sec Stoffübergang (b) für Fall 2 in Tab. 1

Mit diesem Modellaufbau wurde geprüft, ob die numerische Stabilität des Modells gewährleistet ist, wenn Verschiebungen der Grenzfläche auftreten. Dazu wurde in den Grenzflächenzellen eine maximale Grenzflächengeschwindigkeit von 0.001, 1 und 2.0 m/s erzeugt, siehe Abb. 17.

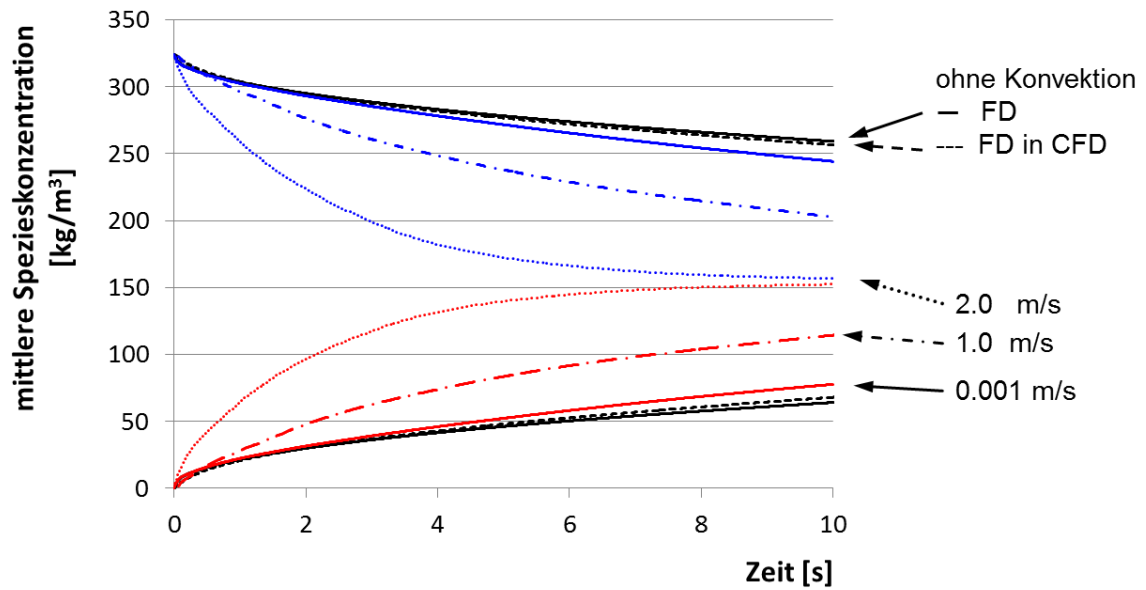


Abb. 17: Mittlere Konzentration in der Schlacken- und Metallphase in Abhängigkeit von der Zeit unter dem Einfluss von Konvektion für maximale Grenzflächengeschwindigkeiten von 0.001, 1.0 und 2 m/s mittels unsymmetrischer Wirbel erzeugt für Fall 2 in Tab. 1

Die Beschleunigung des Stoffübergangs gegenüber den Fällen ohne Konvektion ist auch hier deutlich erkennbar, siehe Abb. 17. Das Modell erwies sich als numerisch stabil, auch in den Fällen mit hoher Geschwindigkeit ließen sich keine Probleme hinsichtlich der numerischen Stabilität feststellen.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass das *FD in CFD* Modell eine gute Übereinstimmung mit dem *FD*-Modell aufweist. Die Prüfung auf Zeitschrittweitenunabhängigkeit ergab zwischen 0.0001 und 0.01 sec nur geringfügige Abweichungen und die Gitterunabhängigkeit ist im Bereich der Zellgröße zwischen 12.5 und 50 mm gegeben. Im Fall von numerischen Instabilitäten kann das Diskretisierungsverfahren erster Ordnung verwendet werden.

5 Anwendung des Stoffübergangmodells an einer gasgespülten Pfanne

In der vorliegenden Arbeit wird das Stoffübergangsmodell laut Kapitel 4.1 für den Fall einer gasgespülten Stahlpfanne angewandt. Es handelt sich um eine Stahlpfanne, die für ein Fassungsvermögen von maximal 180 t ausgelegt ist und mit einem oder zwei Spülsteinen betrieben werden kann. In dieser Arbeit wurde von einer Gasspülung mit zwei Spülsteinen ausgegangen. Es wird der Stoffübergang einer Spezies aus dem Metallbad in die Schlacke betrachtet.

5.1 Modellierung der gasgespülten Pfanne mittels CFD

Aufgrund der großen Auswahl an verschiedenen Modellen, der verfügbaren Literatur im Bereich der Pfannenmodellierung und der einfachen Anwendbarkeit wurde in dieser Arbeit das Softwarepaket Ansys Fluent 14.5 verwendet.

5.1.1 Rechengitter

Die Stahlpfanne weist, im Bezug auf den Pfannenmittelpunkt, zwei unsymmetrisch positionierte Spülsteine auf. Um das Strömungsfeld vollständig darstellen zu können, ist ein dreidimensionales Modell erforderlich. Der Raum über der Schlacke ist ebenfalls modelliert, um die freie Bewegung der Schlackenphase zu ermöglichen.

Das Rechengitter für das Pfannenmodell wurde basierend auf der Konstruktionszeichnung, siehe Abb.18, als 3 D Modell erstellt.

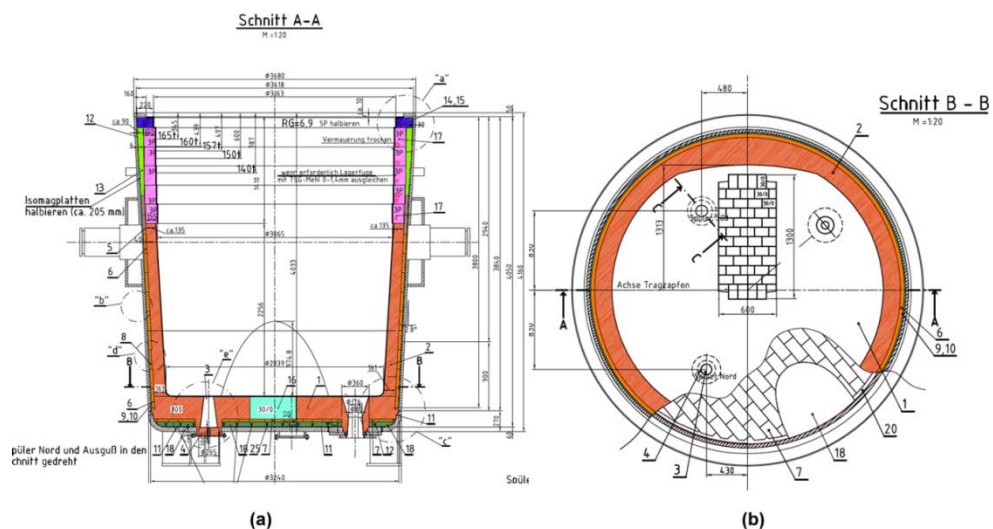


Abb.18: Konstruktionszeichnung der untersuchten Stahlpfanne; Querschnitt (a) Draufsicht (b)

Für das Rechengitter wurde zur Vereinfachung eine zylindrische Form angenommen, die geringfügigen Steinvorsprünge der Ausmauerung im Schlackenbadbereich wurden vernachlässigt. Der Pfannenradius des zylindrischen Modells beträgt 1.55 m bei einer Gesamthöhe des Modells von 3.7 m. Die Exzentrizität der beiden Spülsteine beträgt 0.615 - als Distanz zwischen Pfannenmittelpunkt und Spülstein dividiert durch den Pfannenradius und der Winkel zwischen den beiden Spülsteinen beträgt 125° . Das Rechengitter wurde mit der Software Gambit erstellt.

Gitter für die Vorstudien

Die Auffindung eines geeigneten Turbulenzmodells, siehe 5.1.4, sowie die Einschätzung des Spülratenbereiches, siehe 5.3, erfolgte mit einem reduzierten Rechengitter. Es weist Verfeinerungen im Schlackenbereich, an der Wand sowie über den Spülsteinen auf und umfaßt 263 644 hexaedrische Zellen.

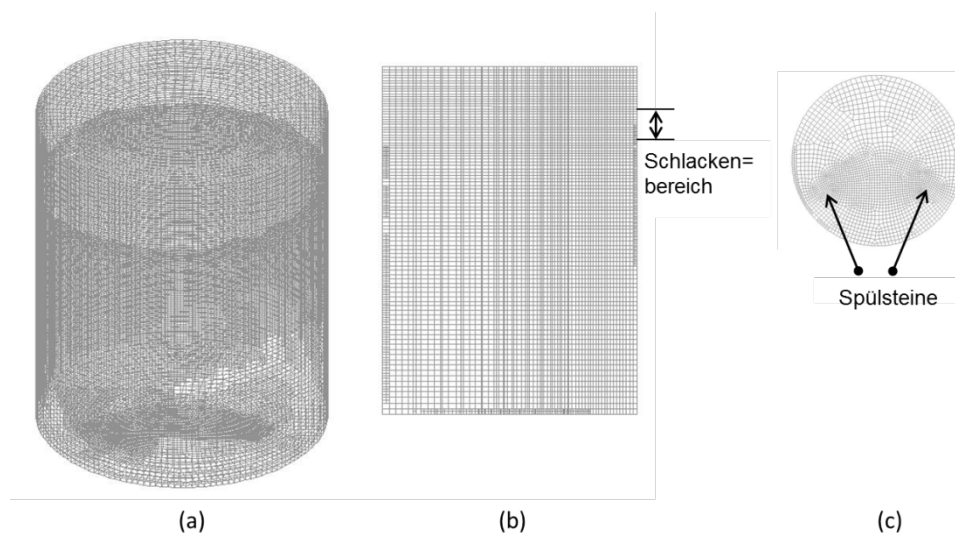


Abb. 19: Rechengitter der Stahlpfanne: Wände (a), vertikale Schnittebene durch den Pfannenmittelpunkt und einen Spülstein (b) sowie horizontale Schnittebene im Schlackenbad (c)

Gitter für die Parameterstudie des Stoffübergangs

Das verwendete Rechengitter ist in Abb. 20 dargestellt. Verfeinerungen wurden im gesamten Schlackenbereich, an der Wand sowie über den Spülsteinen im Stahlbad vorgenommen.

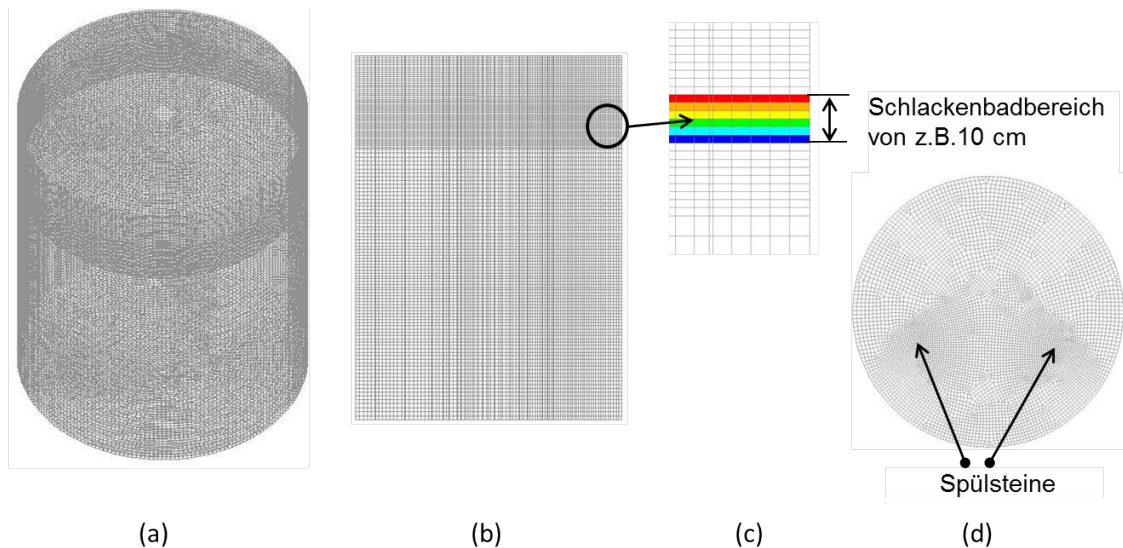


Abb. 20: Rechengitter der Stahlpfanne: Wände (a), vertikale Schnittebene durch den Pfannenmittelpunkt und einen Spülstein (b), die Verfeinerung im Schlackenbadbereich (c) sowie die horizontale Schnittebene Stahlbadbereich (d)

Das Rechengitter umfaßt 777 660 hexaedrische Zellen. Durch doppelte Verfeinerung des Rechengitters an den jeweiligen Grenzflächen Metall - Schlacke bzw. Feuerfest - Schlacke ergibt sich eine Gittergröße von jeweils etwa 1.03 bzw. 1.02 Millionen Zellen.

5.1.2 Phasen und Spezies

Zur Modellierung der fluiden Phasen - im betrachteten Fall Metallschmelze, Schlacke sowie der darüber befindlichen Atmosphäre - ist das VOF Modell eine gute Wahl, da es eine klare Darstellung der Grenze Metall - Schlacke ermöglicht, an der der Stoffübergang modelliert werden soll.

Die Spezies sind mit den Spezies-Transportgleichungen abgebildet, wobei der Stoffübergang durch den Quellterm in der jeweiligen Spezies-Transportgleichung realisiert ist.

Zusätzlich zum Stoffübergangsmodell Metall - Schlacke wurde auch der Stoffübergang Feuerfestmaterial - Schlacke im Bereich des Schlackenbades berücksichtigt, siehe [1]. Dafür wurden separate Simulationen durchgeführt mit der erforderlichen Gitterfeinheit an der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke. Zur Kontrolle sind die auftretenden y_c^* -Werte berechnet und mit den vorliegenden Grenzwerten y_c^* bzw. der Obergrenze $10 \cdot y_c^*$ verglichen worden, siehe 3.1.2, die ermittelte Formel für den Stoffübergang Feuerfestmaterial-Schlacke ist in Glg. (22) angeführt.

$$y_c^* = 8.440 \cdot S_c^{r/s - 0.25} \quad (22)$$

Glg. (22) ist für einen Viskositätsbereich von $\eta_{sl} = 0.07 - 0.77$ [Pas] bei einer $\rho_{sl} = 2700$ [kg/m³] sowie einem $D^{r/s} = 2.50 \cdot 10^{-9}$ [m²/s] gültig, siehe dazu 3.1.2.

Die Grenzfläche Feuerfest - Schlacke wird aus dem Schlackenvolumen berechnet, dieses ergibt sich aus dem vorliegenden Zellvolumen V_{Zelle} multipliziert mit dem Phasenanteil der Schlacke α_{sl} . A_r erhält man durch die Division der Zelltiefe, die dem Doppelten des Normalabstandes vom Zellmittelpunkt zur senkrechten Zellwand d entspricht.

$$A_r = \frac{V_{Zelle} \cdot \alpha_{sl}}{2 \cdot d} \quad (23)$$

Angenommen werden dabei quaderförmige Zellen sowie eine gleichmäßige und horizontale Befüllung der Zelle mit den beiden Phasen.

5.1.3 Spülgas

Die den Betriebsdaten entnommenen Spülgasvolumenströme sind für 36 Chargen in Abb. 21 aufgelistet, die Spülgasströme sind für einen Spülstein, beim Einsatz von insgesamt zwei Spülsteinen.

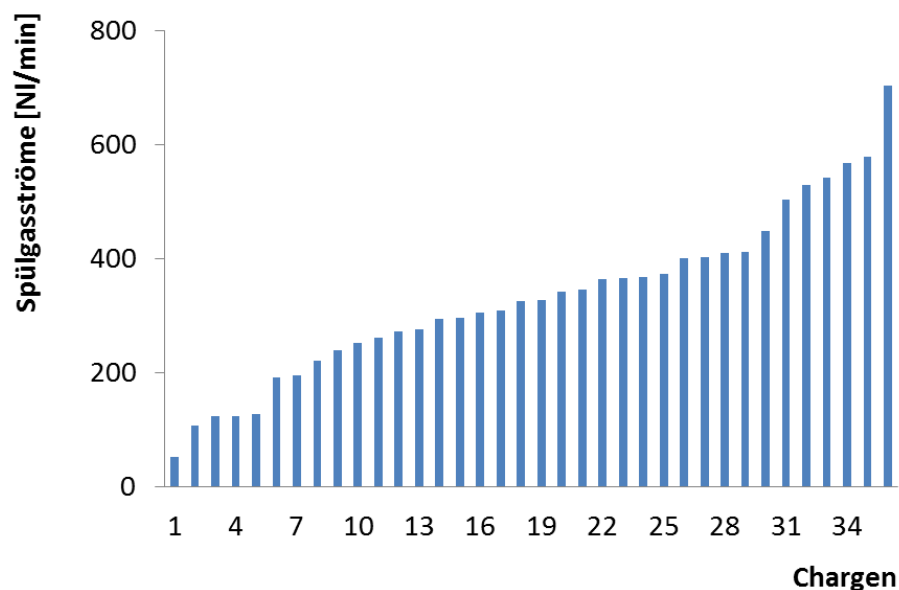


Abb. 21: Spülgasströme je Spüler in NI/min, bei 1013 mbar und 273 K

Im Mittel ergibt sich ein Spülgasstrom für einen Spülstein von 330 NI/min.

Für die Modellierung des Spülgases wird das DPM - Modell verwendet, weil es viele Möglichkeiten zur Erweiterung der Eigenschaften und des Einflusses der Partikel bzw. Gasblasen auf das umgebene Fluid bietet. So wurde der Einfluss des Druckgradienten und der virtuellen Masse mittels der gleichnamigen Modelle berücksichtigt; beide Modelle sind in Fluent bereits implementiert, siehe dazu Kapitel 3.3.4 sowie [14]. Das schwarmförmige Verhalten der Gasblasen ist mittels UDF berücksichtigt, dabei geht der Widerstandsbeiwert ein, siehe [50, 48].

Das verwendete Modell beinhaltet zwei Erweiterungen, welche die numerische Stabilität der Simulationen auch für lange Berechnungszeiten gewährleisten. So werden jene Gasblasen gelöscht, die sich in Zellen befinden die über dem Schlackenbad sind und ausschließlich Gasphase enthalten, und zudem wird die Geschwindigkeit in diesen Zellen auf null gesetzt.

Die Einflüsse der Blasenvergrößerung während des Blasenanstieges sowie die Blasengrößenverteilung sind nicht berücksichtigt.

5.1.4 Turbulenz

Zur Auffindung eines geeigneten Turbulenzmodells wurden die zwei RANS-Modelle $k-\omega$ SST und SAS mit den Ergebnissen des LES-Modells verglichen. Der Fokus des Vergleichs liegt auf der Abbildung des Spülgasstromes sowie der Grenzfläche Metall - Schlacke. Als Geometrie diente das in Abb. 19 dargestellte Rechengitter. Es wurde die Strömung in der gasgespülten Pflanze mit einem aktiven Spüler und einer Spülgasrate von 120 NI/min berechnet. Für diese Simulationen wurden auch die unter Kapitel 5.1.3 angeführten Erweiterungen im Hinblick auf die Gasspülung verwendet. Im Folgenden sind die Ergebnisse der Simulationen mit den genannten Turbulenzmodellen nach 60 Sekunden Spüldauer verglichen. Nach einer Spüldauer von 60 Sekunden ist eine vollständig ausgebildete Strömung gewährleistet. Die folgenden Simulationen wurden aus Ressourcengründen auf dem Cluster JKU Linz, Department of Particulate Flow modelling, durchgeführt. [55]

Geschwindigkeitsverteilungen in der Symmetrieebene

Die sich ergebende Geschwindigkeitsverteilungen in der Symmetrieebene des Spülers sind in Abb. 22 gegenübergestellt.

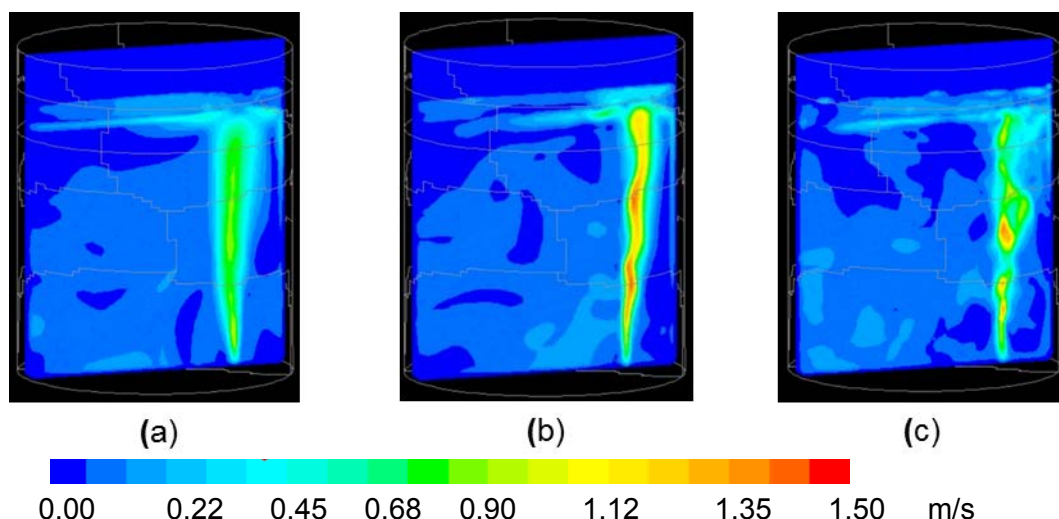


Abb. 22: Geschwindigkeiten in der Symmetrieebene des Spülers in m/s nach 60 sec berechnet mittels $k-\omega$ SST- (a), SAS- (b) und LES-Modell (c)

Das LES-Modell Abb. 22 (c) errechnet ein stark fluktuierendes Strömungsbild, wie es auch im realen Pfannenbetrieb auftritt. Vor allem entlang der Spülsteinachse kommt es zu Geschwindigkeitsfluktuationen zwischen 0.60 – 1.5 m/s. Auch das SAS-Modell bildet diese zu erwartenden Geschwindigkeitsfluktuationen ab, im Gegensatz dazu errechnet das $k-\omega$ SST Modell niedrigere Geschwindigkeiten mit geringeren Geschwindigkeitsfluktuationen.

Umwälzrate des Stahlbades

Im Folgenden werden die Turbulenzmodelle anhand des Volumenstroms durch eine zylinderförmige Fläche verglichen, wobei das negative Vorzeichen die Bewegungsrichtung zum Spülgasstrom hin anzeigt, siehe Abb. 23.

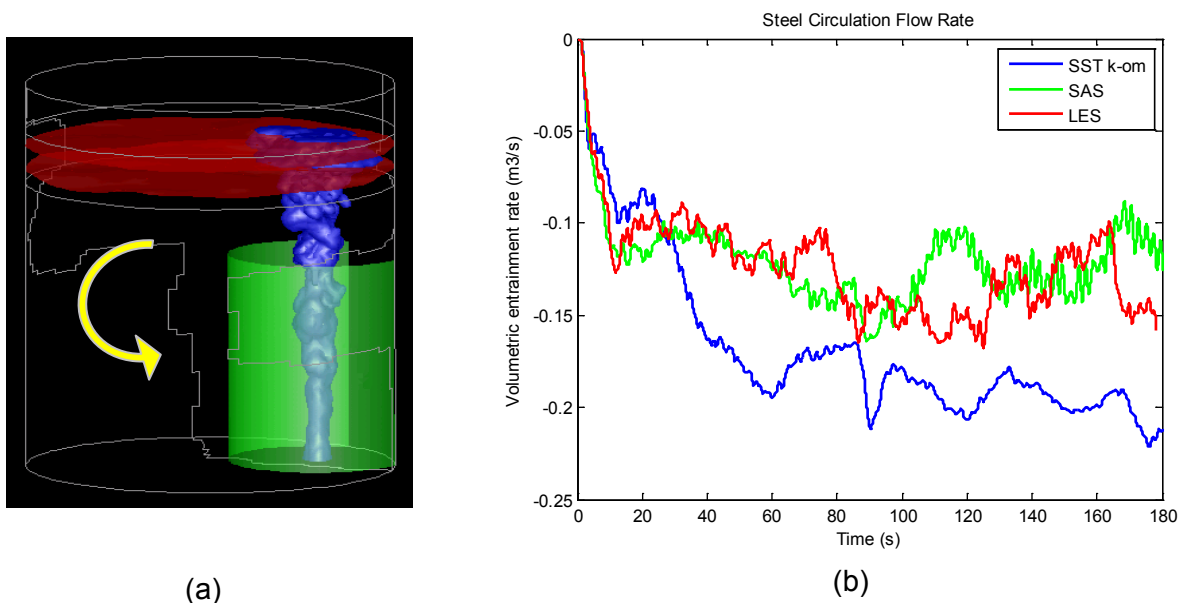


Abb. 23: Pfannengeometrie mit zylindrischer Fläche (a) und Vergleich der Volumenströme über die Zylinderfläche für das $k-\omega$ SST-, das SAS- und das LES-Modell (b)

Der Volumenstrom ist bei der Verwendung des LES- und des SAS-Modells im Bereich von -0.1 und -0.15 m³/s. Das $k-\omega$ SST Modell zeigt während der ersten 20 sec ein ähnliches Verhalten wie das LES- und das SAS-Modell und danach einen kontinuierlichen Anstieg mit geringen Fluktuationen. Mit dem $k-\omega$ SST Modell kommt es dementsprechend zu einer höheren Umwälzrate des Stahlbades.

Topologie der Phasengrenzfläche

Anhand der Höhenkoordinaten der Phasengrenzfläche lässt sich deren welliger Charakter darstellen, siehe Abb. 24. Die in dieser Abbildung dargestellte Phasengrenzfläche ist durch einen Phasenanteil von 50 % Schlacke bzw. Metall in der jeweiligen Zelle definiert. Die Skala gibt die Höhe in m vom Pfannenboden an.

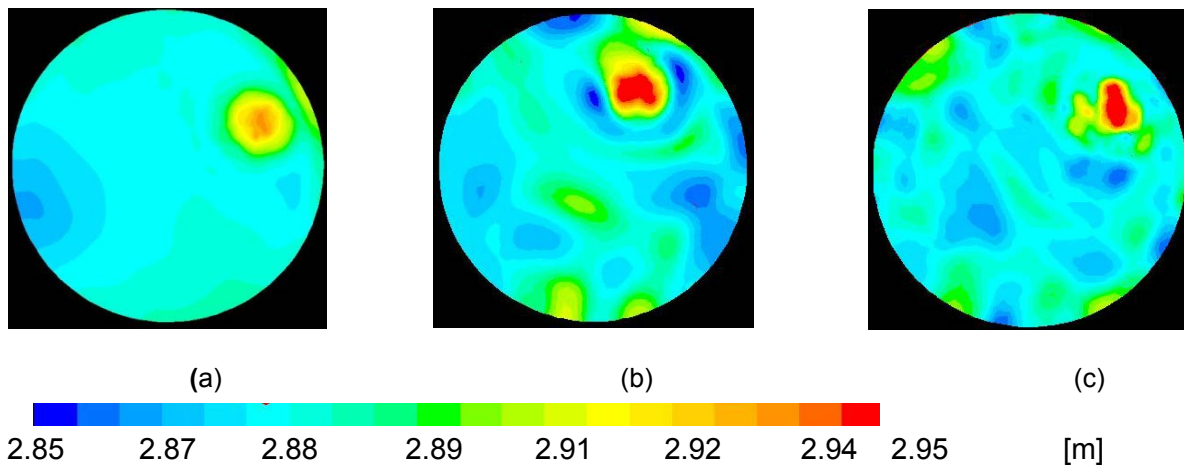


Abb. 24: Vergleich der Höhenkoordinaten der Grenzfläche Metall - Schlacke nach 60 sec zwischen $k-\omega$ SST- (a), SAS- (b) und LES-Modell (c)

Mit dem $k-\omega$ SST Modell Abb. 24 (a) bleibt die Grenzfläche auf einem Niveau und es zeigt sich eine nahezu symmetrische Erhebung über dem Spülstein. Das SAS- sowie das LES-Modell Abb. 24 (b) (c) bilden die Grenzfläche sehr wellig ab.

Wirbelstärke an der Phasengrenzfläche

Ein Maß für die Tendenz eines Fluidelements, sich um eine Achse zu drehen, stellt die Wirbelstärke dar. Bildet ein Turbulenzmodell die auftretenden Wirbel genauer ab, so ist auch eine detailliertere Abbildung der Wirbelstärke zu erwarten, siehe Abb. 25.

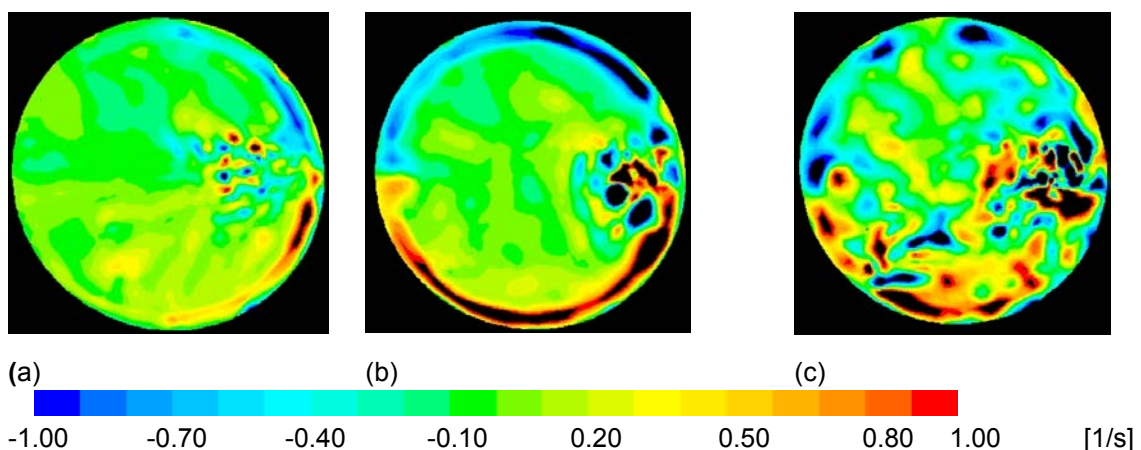


Abb. 25: Wirbelstärke senkrecht zur Metall - Schlacken Grenzfläche nach 60 s

Die Fluktuation der Wirbelstärke an der Grenzfläche ist beim LES Modell stark ausgeprägt Abb. 25 (c), während das SAS-Modell diese in abgeschwächter Form wiedergibt, Abb. 25 (b) und das $k-\omega$ SST-Modell diese Verwirbelungen nur mehr wenig abbildet, Abb. 25 (a).

Um auftretende Phänomene an der Grenzfläche detaillierter abbilden zu können, ist die Darstellung des instationären Verhaltens von großer Bedeutung. Das SAS-Modell verknüpft die Vorteile einer detaillierten Darstellung der Turbulenz, siehe dazu Abb. 22, Abb. 24 und Abb. 25, mit dem niedrigen

Berechnungsaufwand üblicher RANS-Modelle. Folglich wurde das SAS-Modell für die Simulationen in der Pfanne verwendet.

5.1.5 Überblick über die verwendeten Modelle

Tab. 2 gibt einen Überblick über die verwendeten Modelle und Modelleinstellungen.

Modelle

Stoffübergang	Stoffübergangsmodell, siehe Kap. 4
Stofftransport	Speziestransportgleichung
Mehrphasenmodelle	VOF (volume of fluid): Phasen: Schlacke, Stahl, Atmosphäre DPM (discrete phase model): Spülgasstrom; Modellierung des Widerstandsbeiwertes, Druckgradienten- und Virtuelle-Masse Modell, siehe Kap. 3.3.4
Turbulenzmodell	SAS (scale-adaptive simulation)
Zeitschrittweiten [sec] Iterationen pro Zeitschritt	zwischen 0.0001 - 0.005 max. 20
Residuen	10e-5
Pressure-velocity coupling	PISO
Diskretisierungsschema/ Relaxation Faktoren	Gradient: Least Squares Cell Based Druck: PRESTO! / 0.3 Impuls: 2 nd order upwind / 0.7 Volume fraction: Compressive / 0.1 Turbulenz: 2 nd order upwind / 0.8 Spezies: 1 st order upwind / 0.97
Umgebungsdruck	101325 Pa
Wände	“no slip condition”, isotherm, glatt
Obere Wand	“escape for DPM particle”
Seitliche Wand	“reflect for DPM particle”
Grenzflächenspannung	Stahl-Schlacke: 1N/m Zwischen Schlacke-Atmosphäre und Stahl-Atmosphäre ist diese nicht berücksichtigt

Tab. 2: Verwendete Modelle und deren Einstellungen

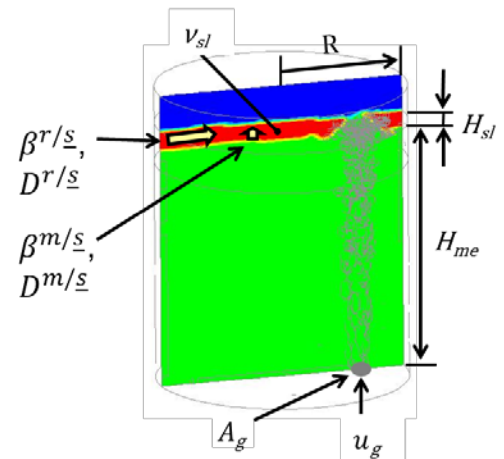
5.2 Charakterisierung der Bedingungen

5.2.1 Einflussgrößen auf den Stoffübergang

Für den Stoffdurchgang zwischen Metallbad und Schlacke sowie für den Stoffübergang vom Feuerfestmaterial in die Schlacke sind folgende Einflussgrößen von Bedeutung:

- **Diffusionskoeffizient:**
Der Diffusionskoeffizient der übergehenden Spezies vom Metallbad in die Schlacke beträgt $4.14 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ und wurde den experimentellen Daten [74, 75, 76, 77] entnommen. Der Diffusionskoeffizient ist von der Viskosität unabhängig.
- **Viskosität:**
Die Viskosität der Schlacke beträgt zwischen 0.07 und 0.77 Pas und wurde mittels des Urbain Modells [78] errechnet; in die Berechnung gehen die Schlackenzusammensetzung und die Temperatur ein. Für das Stahlbad wurde eine Viskosität von 0.0062 Pas verwendet [79].
- **Geometrie:**
Geometrische Einflussgrößen sind der Radius des freien Querschnitts der Pfanne, die Schlackenbadhöhe, siehe 5.1.1, sowie das Volumenverhältnis Metall - Schlacke. Der freie Querschnitt (Schlackenaug) und damit auch die Schlackenbadhöhe beeinflussen die sich ergebende Grenzflächengröße. Die Exzentrizität der Spülsteine und deren Lage zueinander sind im Modell fix vorgegeben, wodurch die Gültigkeit auf Modelle mit ähnlicher Geometrie eingeschränkt ist. Es ist jedoch davon auszugehen, dass übliche Pfannen ähnliche Radien/Höhen-Verhältnisse sowie ähnliche Spülsteinpositionen aufweisen.
- **Strömung:**
Durch das sich ausbildende Strömungsfeld wird die Grenzschichtausbildung sowie der Zu- und Abtransport von Spezies von der Grenzschicht beeinflusst. Die Gasspülrate sowie die Position der Spülsteine bestimmt das entstehende Strömungsfeld. Für diese Studie wurde der Spülgasstrom variiert, die Positionen der Spülsteine und Pfannendurchmesser sind vorgegeben.
- **Temperaturgradienten:**
Die Temperatur bzw. die sich ausbildenden Temperaturgradienten innerhalb der Schlackenschicht hin zur Atmosphäre, sowie zur Wand und die damit einhergehende Beeinflussung von Viskosität und Diffusionskoeffizient, wurden in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

<u>Symbol</u>	<u>Bezeichnung</u>
$D^{r/\underline{s}}$	Diffusionskoeffizienten für die von den jeweiligen Grenzflächen diffundierenden Spezies:
$D^{m/\underline{s}}$	
	Feuerfest - Schlacke und Metallbad - Schlacke
ν_{sl}	... kinematische Viskosität der Schlacke
H_{sl}	... Schlackenbadhöhe
H_{me}	... Stahlbadhöhe
R	... Pfannenradius
A_g	... Gaseintrittsfläche
u_g	... Spülgasgeschwindigkeit



Tab. 3: Einflussgrößen auf die Stoffübergangskoeffizienten Feuerfestmaterial - Schlacke $\beta^{r/\underline{s}}$ und Metall - Schlacke $\beta^{m/\underline{s}}$ für die gasgespülte Pfanne

5.2.2 Dimensionslose Kennzahlen

Durch Anwendung des Buckingham'schen Π -Theorem's und der Bildung dimensionsloser Kennzahlen lässt sich die Anzahl der Einflußgrößen reduzieren und die Ergebnisse verallgemeinern. [80, 81, 82]

Mittels Dimensionsanalyse können aus den in Tab.3 angeführten Einflussgrößen folgende dimensionslose Kennzahlen herleiten werden [2]:

$$\Gamma = \frac{H_{sl}}{R} \quad (24)$$

$$Re = \frac{u_g \cdot H_{sl}}{\nu_{sl}} \quad (25)$$

$$Sc^{r/\underline{s}} = \frac{\nu_{sl}}{D^{r/\underline{s}}} \quad (26)$$

$$Sc^{m/\underline{s}} = \frac{\nu_{sl}}{D^{m/\underline{s}}} \quad (27)$$

$$Sh^{r/\underline{s}} = \frac{H_{sl} \cdot \beta^{r/\underline{s}}}{D^{r/\underline{s}}} \quad (28)$$

$$Sh^{m/\underline{s}} = \frac{H_{sl} \cdot \beta^{m/\underline{s}}}{D^{m/\underline{s}}} \quad (29)$$

Die dimensionslosen Kennzahlen können als Kenngrößengleichung für den Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von den Grenzflächen Feuerfestmaterial - Schlacke und Metall - Schlacke geschrieben werden:

$$Sh^{r/s} = f(Re, Sc^{r/s}, \Gamma) \quad (30)$$

$$Sh^{m/s} = f(Re, Sc^{m/s}, \Gamma) \quad (31)$$

Häufig lassen sich mathematische Beziehungen in Form eines Potenzansatzes für den Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von den Grenzflächen Feuerfestmaterial - Schlacke und Metall - Schlacke, formulieren:

$$Sh^{r/s} = \alpha \cdot Re^\gamma \cdot (Sc^{r/s})^\varepsilon \cdot \Gamma^\zeta \quad (32)$$

$$Sh^{m/s} = \theta \cdot Re^\kappa \cdot (Sc^{m/s})^\lambda \cdot \Gamma^\mu \quad (33)$$

Die Unbekannten α , γ , ε , ζ , θ , κ , λ und μ werden durch eine CFD Parameterstudie ermittelt.

5.3 Parameterstudie

Zur Ermittlung des Stoffübergangs von der Grenzfläche Feuerfestmaterial - Schlacke wurde wie in [1] vorgegangen. Der Stoffübergang von der Grenzfläche Metallbad - Schlacke in die Schlacke erfolgte mit dem in Kapitel 4 beschriebenen Stoffübergangsmodell.

Für den Stoffübergang von der Grenzfläche Metall - Schlacke wurden die Anfangskonzentration der Spezies im Metallbad mit 100 ppm angenommen, jene in der Schlacke mit null. Es wurde von einer konstanten Temperatur von 1600 C ausgegangen und die Stoffdaten entsprechend dieser definiert. Die Viskosität im Metallbad wurde mit 0.0062 Pas und deren Dichte mit 7000 kg/m³ vorgegeben.

Die Feuerfestauskleidung im Schlackenbadbereich besteht aus MgO-C Steinen und im Bereich des Stahlbades aus feuerfester Masse.

Die Schlacke setzt sich wie folgt zusammen:

	Massen [%]
Al ₂ O ₃	32.5
CaO	40.4
MgO	11.0
SiO ₂	4.6
Na ₂ O	0.1
P ₂ O ₅	0.1
TiO ₂	0.1

Tab. 4: Schlackenzusammensetzung

Die Dichte der Schlacke wurde mit 2700 kg/m³ vorgegeben. Die Schlackenviskosität ist zunächst in einem Bereich von 0.07 - 0.77 Pas variiert worden und die Diffusionskoeffizient sind mit $D^{m/s} = 4.14 \cdot 10^{-10}$ [74, 75, 76, 77] bzw. $D^{r/s} = 2.50 \cdot 10^{-9}$ m²/s [1] konstant gehalten. Für den Stoffübergang von der Grenzfläche Metall – Schlacke ist der Schwefel und für den Stoffübergang von der Grenzfläche Feuerfest – Schlacke ist Magnesia als Spezies betrachtet worden.

Die Schlackenbadhöhe beträgt 10, 15 und 20 cm. Der Variationsbereich des Spülgasvolumenstroms liegt zunächst zwischen 100 - 500 NI/min. Im anschließenden Kapitel sind die Ergebnisse aus der Parameterstudie für den Stoffübergang Metall – Schlacke, siehe 4.1, sowie auf den Stoffübergang Feuerfestmaterial - Schlacke dargestellt.

5.3.1 Auswertung der Simulationen

Nach dem Erreichen eines konstanten Strömungszustandes in der Pfanne wird der jeweilige Stoffübergang gestartet. Nach einer Einschwingphase bleibt der Stoffübergang innerhalb eines Schwankungsbereichs konstant. Die Stoffübergangskoeffizienten, die Beträge der Geschwindigkeiten in den jeweiligen Grenzflächenzellen und die Grenzflächengröße stellen Mittelwerte aus 5 bis 20 sec Stoffübergang dar. Die Dauer des Stoffübergangs hängt von der Schwankungsbreite des Stoffübergangs ab. Dies ist am Beispiel des Stoffübergangskoeffizienten einer Simulation in Abb. 26 dargestellt.

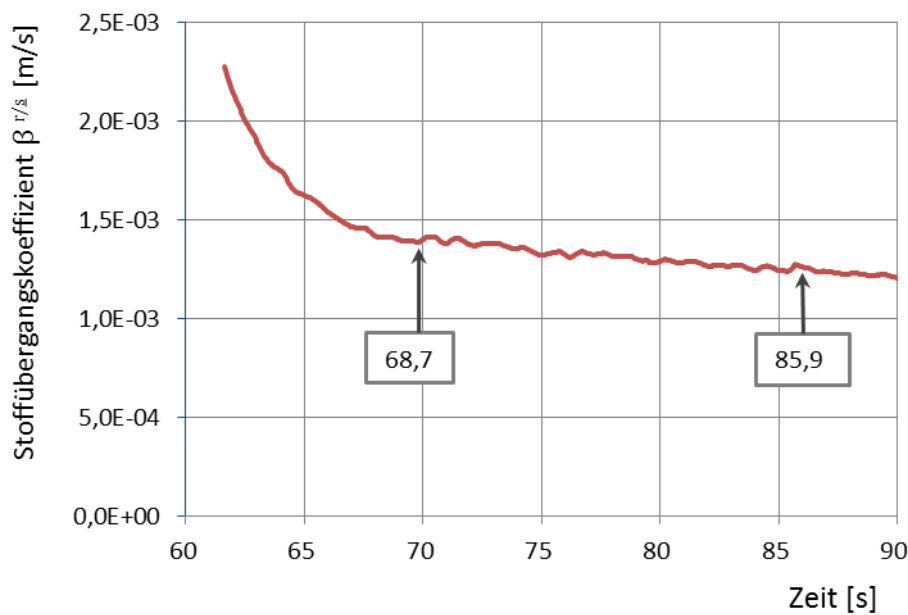


Abb. 26: Stoffübergangskoeffizient Feuerfest-Schlacke $\beta^{r/s}$ für den Fall 3 (Tab. (7)) im zeitlichen Verlauf, mit den Markierungen für den Mittelungszeitraum (68.7 - 85.9 sec)

Der Schwankungsbereich ist auf variierende Strömungsverhältnisse und einer daraus resultierenden Variation der Geschwindigkeiten und Grenzflächengrößen zurückzuführen, Abb. 26.

5.3.2 Vorstudie

Es wurden Vorstudien zur Charakterisierung der Strömungsverhältnisse durchgeführt. Es ist zu erwarten, dass mit steigender Spülgasrate die Geschwindigkeiten an den Grenzflächen Metall - Schlacke sowie Feuerfest - Schlacke ansteigen; allerdings ist auch damit zu rechnen, dass dieser Anstieg ab einer bestimmten Spülgasrate stagniert. Es kann angenommen werden, dass es eine maximale mittlere Grenzflächengeschwindigkeit gibt, die sich durch weitere Erhöhung des Spülgasstromes nicht mehr steigern lässt. Um dies festzustellen und den Variationsbereich der Parameterstudie einzuengen wurden Pfannensimulationen mit dem in Abb. 19 dargestellten Rechengitter durchgeführt.

Der Variationsbereich der Simulationen ist in Tab. 5 angeführt.

Spülgasrate je Spülstein [NI/min]	η_{sl} [Pa.s]	H_{sl} [m]
50 / 100 / 180 / 250 / 350 / 500	0.07- 0.77	0.1, 0.15, 0.20

Tab. 5: Variationsbereich der Spülgasrate, der Schlackenviskosität η_{sl} und der Schlackenbadhöhe H_{sl} .

Im folgenden Diagramm ist der Einfluss der Spülgasrate auf den Betrag der mittleren Geschwindigkeit an der Grenzfläche Metall - Schlacke dargestellt, siehe Abb. 27.

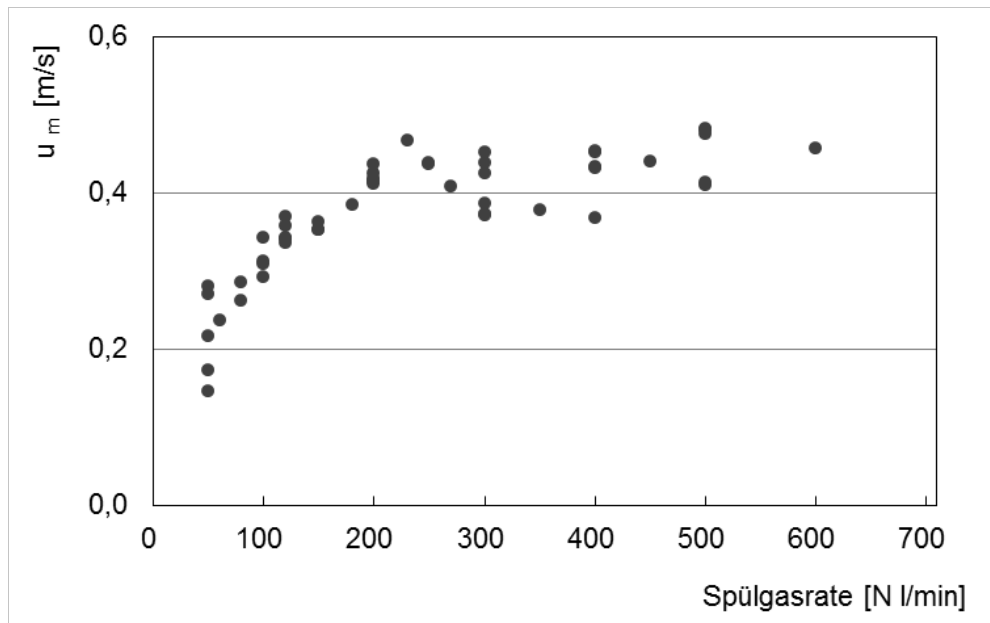


Abb. 27: Betrag der mittlere Geschwindigkeit an der Grenzfläche Metall - Schlacke u_m in Abhängigkeit von der Spülgasrate

Die mittlere Geschwindigkeit an der Grenzfläche Metall - Schlacke nimmt bis zu einer Spülgasrate von 250 NI/min zu, Spülgasraten größer 300 NI/min führen zu keiner weiteren Erhöhung der Geschwindigkeiten an der Grenzfläche.

Die Auswirkungen der verschiedenen Spülgasraten auf die Ausbreitung der Schlacke auf dem Metallbad sowie die des Spülgasstromes sind in Abb. 28 und Abb. 29 zu sehen.

In Abb. 28 - erste Reihe (a - f) - ist die Phasenverteilung an den beiden Schnittflächen durch den Spülstein nach 80 sec abgebildet und in der zweiten Reihe (g - i) sind die Bilder der ersten Reihe jeweils um die Verteilung des Spülgases ergänzt. Die dazugehörigen Spülgasströme in NI/min sind in der letzten Reihe eingetragen.

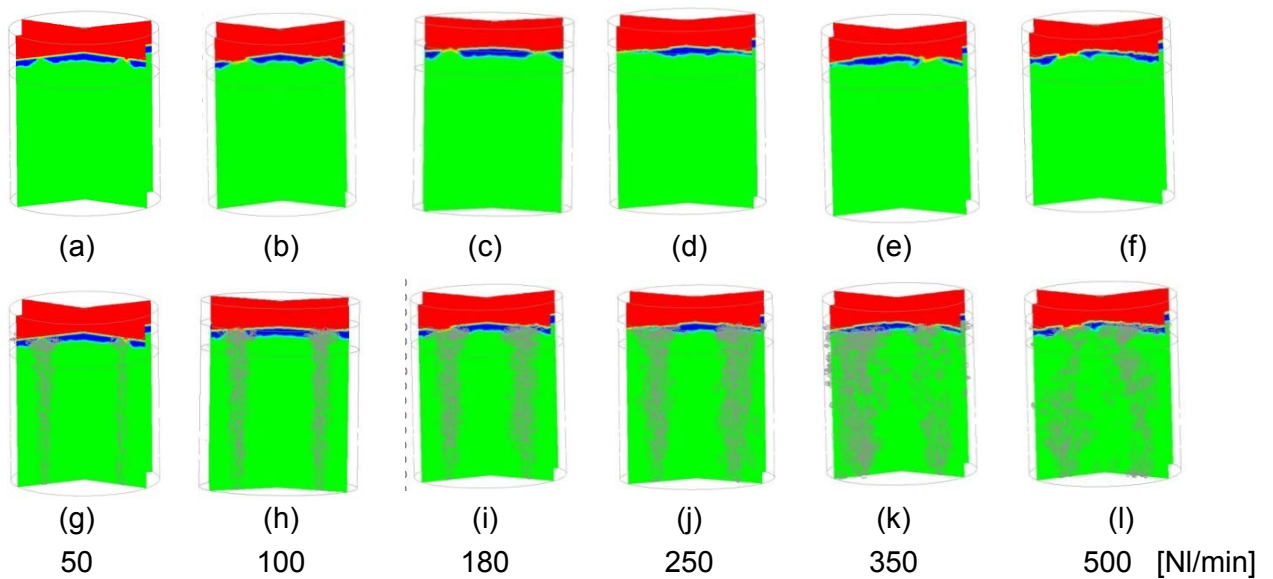


Abb. 28: Phasenverteilung bei verschiedenen Spülgasraten von 50 bis 500 NI/min, ohne (a-f) und mit (g-l) Spülgasverteilung; grün: Metall, blau: Schlacke, rot: Atmosphäre; Schlackenviskosität 0.47 Pas, Schlackenbadhöhe 15 cm

Für die Spülgasströme 50 NI/min und 100 NI/min, Abb. 28 (a, b), sind stabile, symmetrische Schlackenaugen und stabile, schmale Spülgasströme zu sehen, Abb. 28 (g, h). Das Schlackenaugen vergrößert sich zwischen 50 NI/min und 100 NI/min, wobei die Grenzfläche Feuerfestmaterial - Schlacke kaum eine Veränderung aufweist. Bei den Spülgasraten 180 NI/min und 250 NI/min, Abb. 28 (c, d), sind vergrößerte Schlackenaugen zu sehen und speziell bei der Spülgasrate von 250 NI/min, Abb. 28 (d), auch eine deutlich welligere Grenzfläche Metall - Schlacke. Die Schlacke ist in Wandnähe eingeschnürt, womit sich auch die Grenzfläche Feuerfestmaterial-Schlacke verringert. Des Weiteren sammelt sich die Schlacke zwischen den beiden Schlackenaugen und wird dort zusammengeschoben. Der dazugehörige Spülgasstrom ist instabiler, was sich in einer größeren und ungleichmäßigeren horizontalen Ausbreitung des aufsteigenden Spülgasstromes manifestiert, Abb. 28 (i, j). Diese Charakteristik des Spülgasstromes verstärkt sich noch weiter bei den Spülgasraten 350 NI/min und 500 NI/min, Abb. 28 (k, l). Die Phasenverteilung und die Form der Grenzfläche Metall - Schlacke, Abb. 28 (e, f), ist in Folge des instabilen Spülgasstromes ebenfalls instabil und wellig, die Grenzfläche Feuerfestmaterial - Schlacke wird durch das Zusammenschieben der Schlacke zwischen den Schlackenaugen beeinflusst, Abb. 28 (e).

In Abb. 29. sind die Verteilung der Phasen und der Betrag der Geschwindigkeit an der Phasengrenzfläche Metall – Schlacke abgebildet, die abgebildeten Flächen sind die beiden Schnittflächen durch den Spülstein sowie die Fläche des 50%igen Phasenanteils Metall bzw. Schlacke. Die Viskosität der Schlacke beträgt 0.07 Pas und die Schlackenbadhöhe 10 cm.

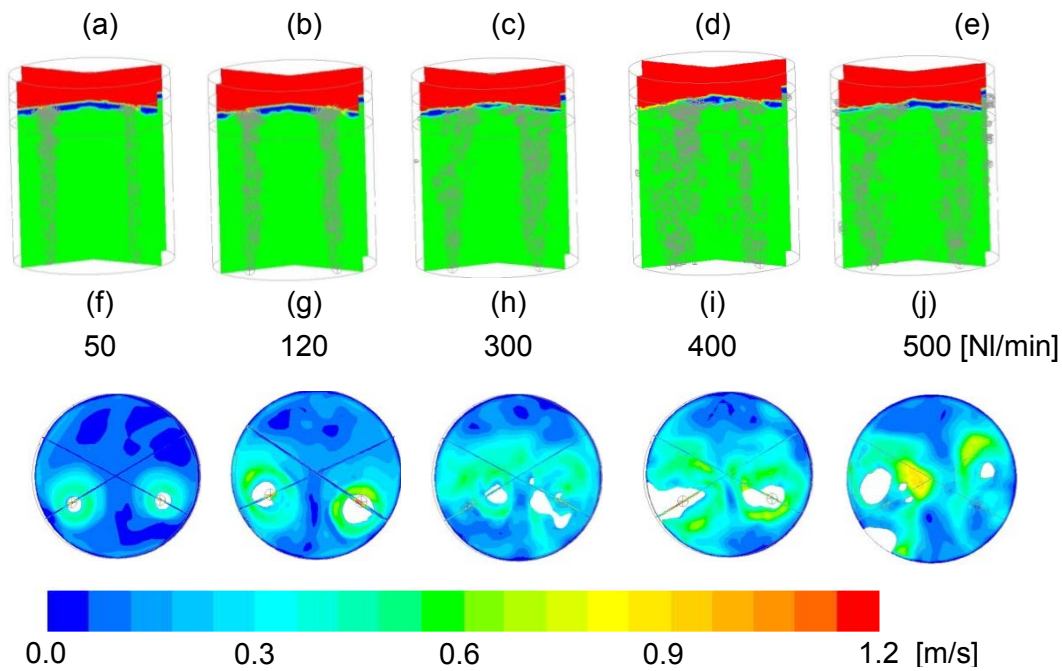


Abb. 29: Phasenverteilung mit Spülgasströme von 50 bis 500 NI/min (a-e) Geschwindigkeitsverteilung an der Phasengrenzfläche Metall – Schlacke (f-j); Schlackenviskosität 0.77 Pas, Schlackenbadhöhe 10 cm

In Abb. 29 zeigen sich für die Schlackenaugen und die Spülgasströme ähnliche Tendenzen wie in Abb. 28. In dieser Serie lassen sich größere Schlackenaugen beobachten, was auf die geringere Schlackenmenge zurückzuführen ist, und es lässt sich eine welligere Beschaffenheit der Phasengrenzfläche erkennen, verursacht durch die niedrigere Viskosität der Schlacke. Für die Geschwindigkeit an der Phasengrenzfläche ergeben sich für die Spülgasraten von 50 und 120 NI/min näherungsweise symmetrische Bereiche hoher Geschwindigkeiten rund um die Schlackenaugen. Die Spülgasraten von 300 und 400 NI/min weisen zwar die hohen Geschwindigkeiten im Schlackenaugenbereich auf, die Schlackenaugen befinden sich jedoch nicht mehr stabil über dem Spülstein. Bei Spülgasraten von 500 NI/min ist der instabile Zustand auch an der Phasengrenzfläche deutlich sichtbar, weder die Schlackenaugen noch die erhöhten Geschwindigkeiten weisen eine eindeutige Lage über dem Spülstein auf.

Daraus ergibt sich für die Detailstudie ein interessanter Spülgasbereich von 100 - 300 NI/min.

5.3.3 Detailstudie

Die Simulationen für die Detailstudie sind in einem Spülgasratenbereich von 100 - 300 NI/min, siehe 5.3.2, und für Schlackenbadhöhen von 10, 15 und 20 cm durchgeführt worden. Die Schlackenviskositäten betragen 0.44, 0.63 und 0.77 Pas, niedrigere Viskositäten führten zur Überschreitung des Gültigkeitsbereichs für die Berechnung des Stoffübergangs von der Grenzfläche Metall - Schlacke, siehe 3.1.2; eine weitere Gitterverfeinerung überschreitet die verfügbaren

Rechnerressourcen. Für die Simulationen wurde das Rechengitter laut Abb. 20 verwendet. Der Stoffübergang von der Grenzfläche Metall - Schlacke in die Schlacke wird im Folgenden auch als Stoffübergang Metall - Schlacke und jener von der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke in die Schlacke als Stoffübergang Feuerfest – Schlacke bezeichnet.

Die Variation der Parameter beruhte auf zwei Schwerpunkten:

1. Es sollen jene Parameter eruiert werden, welche einen maximalen Stoffübergang Metall - Schlacke bei gleichzeitig geringem Stoffübergang Feuerfest - Schlacke hervorrufen. Dabei basiert die Parametervariation auf dem zentral zusammengesetzten Versuchsplan [79, 80].
2. Auf der Parameterstudie aufbauend wurden Serien von Simulationen für unterschiedliche Spülgasraten bei gleicher Schlackenbadhöhe und Viskosität durchgeführt.

In Tab. 6 sind die simulierten Fälle aufgelistet.

	pgfr	η_{sl}	u_g	H_{sl}	$\beta^{m/\xi}$	$\beta^{r/\xi}$	Re	Γ	$Sc^{m/\xi}$	$Sc^{r/\xi}$
	Nl/min	Pas	m/s	m	m/s	m/s	--	--	--	--
1	100	0,44	0,15	0,15	0,002508	0,001654	140	0,097	3,936E+05	6,519E+04
2	100	0,63	0,15	0,20	0,002467	0,001727	131	0,129	5,636E+05	9,333E+04
3	100	0,63	0,15	0,10	0,001985	0,001380	65	0,065	5,636E+05	9,333E+04
4	100	0,77	0,15	0,15	0,002488	0,001471	80	0,097	6,889E+05	1,141E+05
5	140	0,63	0,21	0,10	0,002642	0,001913	91	0,065	5,636E+05	9,333E+04
6	140	0,63	0,21	0,20	0,003210	0,001774	183	0,129	5,636E+05	9,333E+04
7	140	0,44	0,21	0,15	0,003341	0,002112	196	0,097	3,936E+05	6,519E+04
8	140	0,77	0,21	0,15	0,003143	0,001878	112	0,097	6,889E+05	1,141E+05
9	140	0,63	0,21	0,15	0,002829	0,001870	137	0,097	5,636E+05	9,333E+04
10	200	0,77	0,30	0,15	0,003626	0,002026	160	0,097	6,889E+05	1,141E+05
11	200	0,44	0,30	0,10	0,003388	0,002331	187	0,065	3,936E+05	6,519E+04
12	200	0,44	0,30	0,20	0,003645	0,002058	374	0,129	3,936E+05	6,519E+04
13	200	0,44	0,30	0,15	0,003736	0,002169	281	0,097	3,936E+05	6,519E+04
14	200	0,63	0,30	0,10	0,003044	0,002264	131	0,065	5,636E+05	9,333E+04
15	200	0,63	0,30	0,20	0,003600	0,002023	261	0,129	5,636E+05	9,333E+04
16	260	0,63	0,40	0,10	0,003601	0,002327	170	0,065	5,636E+05	9,333E+04
17	260	0,63	0,40	0,20	0,003944	0,001824	340	0,129	5,636E+05	9,333E+04
18	260	0,77	0,40	0,15	0,003780	0,002197	209	0,097	6,889E+05	1,141E+05
19	260	0,44	0,40	0,15	0,003865	0,002251	365	0,097	3,936E+05	6,519E+04
20	300	0,63	0,46	0,10	0,003594	0,002338	196	0,065	5,636E+05	9,333E+04
21	300	0,77	0,46	0,15	0,003817	0,002267	241	0,097	6,889E+05	1,141E+05
22	300	0,44	0,46	0,15	0,003852	0,002339	421	0,097	3,936E+05	6,519E+04
23	300	0,44	0,46	0,10	0,003874	0,002302	281	0,065	3,936E+05	6,519E+04
24	300	0,77	0,46	0,10	0,003696	0,002133	160	0,065	6,889E+05	1,141E+05

Tab. 6: Auflistung der simulierten Fälle, Spülgasrate $pgfr$, Viskosität η_{sl} , Spülgasgeschwindigkeit u_g , Schlackenbadhöhe H_{sl} , Stoffübergangskoeffizient Metall - Schlacke $\beta^{m/\xi}$, Stoffübergangskoeffizient Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/\xi}$, Reynoldszahl Re , dimensionslose Kennzahl Γ , Schmidtzahl Metall - Schlacke $Sc^{m/\xi}$, Schmidtzahl Feuerfest - Schlacke $Sc^{r/\xi}$

In Abb. 30 sind die gemittelten Stoffübergangskoeffizienten mit den jeweiligen Variationsbereichen in Form eines Balkendiagramms aufgetragen.

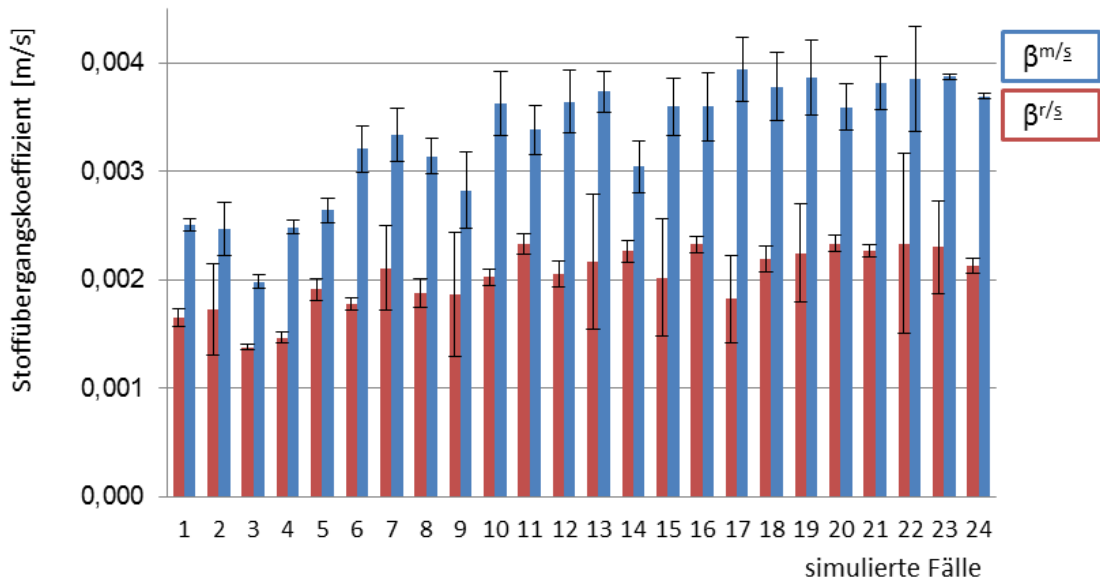


Abb. 30: Stoffübergangskoeffizient Metall - Schlacke $\beta^{m/\bar{s}}$ (blau), Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/\bar{s}}$ (rot) mit dem jeweiligen Variationsbereich

Der Stoffübergang Metall - Schlacke liegt in allen Fällen höher als der Stoffübergang Feuerfest - Schlacke.

5.3.4 Interpretation der Ergebnisse

Die aus den Simulationen ermittelten Stoffübergangskoeffizienten für den Stoffübergang in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke liegen abhängig von den Eingangsparametern zwischen $1.98 \cdot 10^{-3}$ und $3.94 \cdot 10^{-3}$ [m/s], jene für den Stoffübergang in der Schlacke ausgehend von der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke $1.38 \cdot 10^{-3}$ und $2.43 \cdot 10^{-3}$ [m/s]. Der direkte Vergleich mit Daten aus der Literatur ist aufgrund unterschiedlicher Stoffdaten, Geometrien und Strömungsverhältnissen nicht möglich.

Im Folgenden sollen jene Spülgasbereiche abgeleitet werden, welche für den Stoffübergang von den Grenzflächen Metall - Schlacke und Feuerfest - Schlacke ein Optimum bieten. Zusätzlich werden die aus der Simulation zugänglichen Geschwindigkeiten in den Grenzflächenzellen sowie die Größe der Grenzfläche analysiert.

Die Abhängigkeit des Stoffübergangskoeffizienten Metall - Schlacke und Feuerfest - Schlacke von der Spülgasrate ist in folgender Abb. 31 dargestellt.

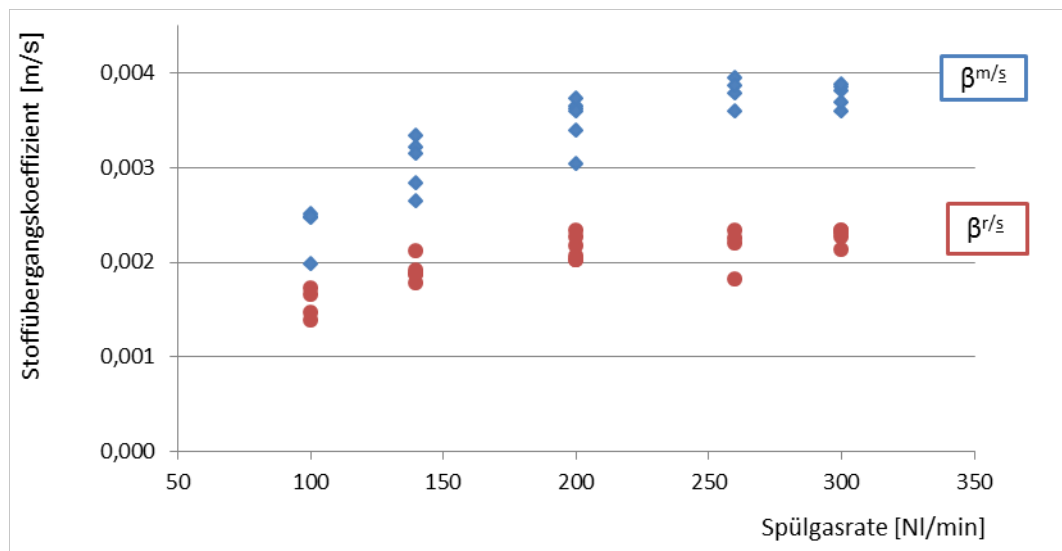


Abb. 31: Mittlere Stoffübergangskoeffizienten Metall - Schlacke $\beta^{m/s}$ sowie Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/s}$ in Abhängigkeit von der Spülgasrate

Die Stoffübergänge steigen, zwischen 100 und 200 NI/min deutlich an, eine weitere Erhöhung der Spülgasrate auf 260 und 300 NI/min führt zu einer Stagnation bzw. zu einer Verringerung der Stoffübergänge, siehe Abb. 31.

Die Stoffübergänge Metall - Schlacke sind für drei ausgewählte Fälle mit konstanten Viskosität und Schlackenbadhöhen bei unterschiedlichen Spülgasraten in Abb. 32 dargestellt.

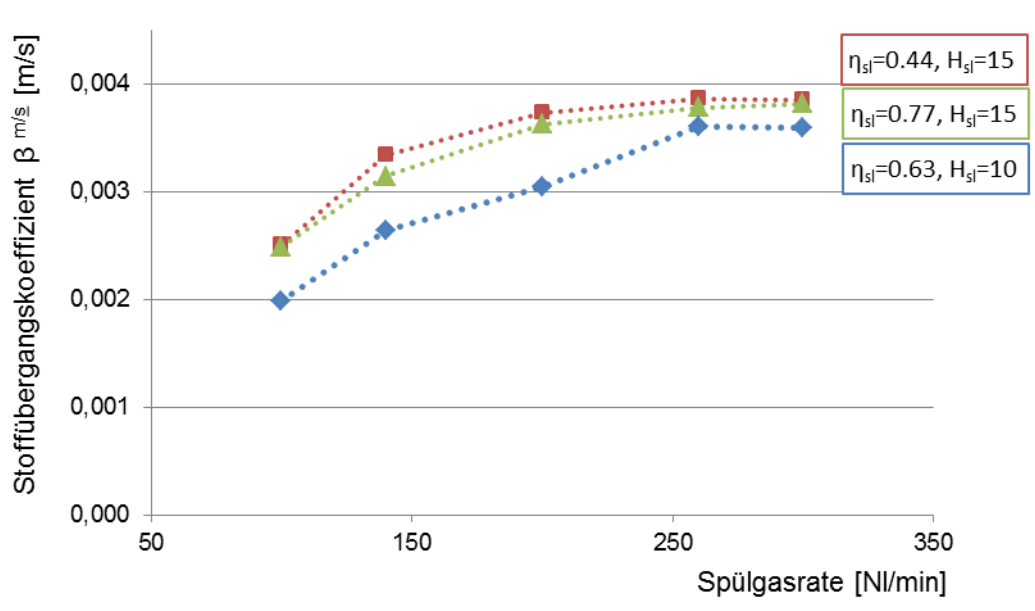


Abb. 32: Mittlere Stoffübergangskoeffizienten Metall – Schlacke $\beta^{m/s}$ in Abhängigkeit von der Spülgasrate bei konstanten Schlackenviskosität (η_{sl}) und Schlackenbadhöhe (H_s), $\dots\blacksquare\dots$ $\eta_{sl} = 0.44$ Pas, $H_s = 15$ cm, $\dots\blacktriangle\dots$ $\eta_{sl}=0.77$ Pas, $H_s = 15$ cm und $\dots\blacklozenge\dots$ $\eta_{sl} = 0.63$ Pas, $H_s = 10$ cm

Der Stoffübergang Metall - Schlacke steigt in allen Serien bei Spülgasraten von 100 bis 260 NI/min an, siehe Abb. 32. Die Serien mit 15 cm Schlackenbadhöhe und einer Viskosität von 0.44 Pas und 0.77 Pas weisen über den gesamten Spülgasratenbereich einen sehr ähnlichen Verlauf auf, wobei

die Serie mit geringer Viskosität - 0.44 Pas - insgesamt einen höheren Stoffübergang aufweist. Zudem ist für die Serie mit einer Viskosität von 0.77 Pas gegenüber jener mit 0.44 Pas bei Spülgasraten zwischen 260 und 300 NI/min ein stärkerer Anstieg des Stoffübergangs zu beobachten. Für die Serie mit einer Schlackenbadhöhe von 10 cm und 0.63 Pas ergibt sich für die untersuchten Spülgasraten in allen Fällen ein geringerer Stoffübergang als für die beiden Serien mit 15 cm Schlackenbadhöhe, in dieser Serie kommt es zwischen 260 - 300 NI/min zu einem Absinken des Stoffübergangs.

In Abb. 33 sind die Serien von Stoffübergängen Feuerfest_Schlacke $\beta^{r/\xi}$ für die untersuchten Spülgasraten dargestellt.

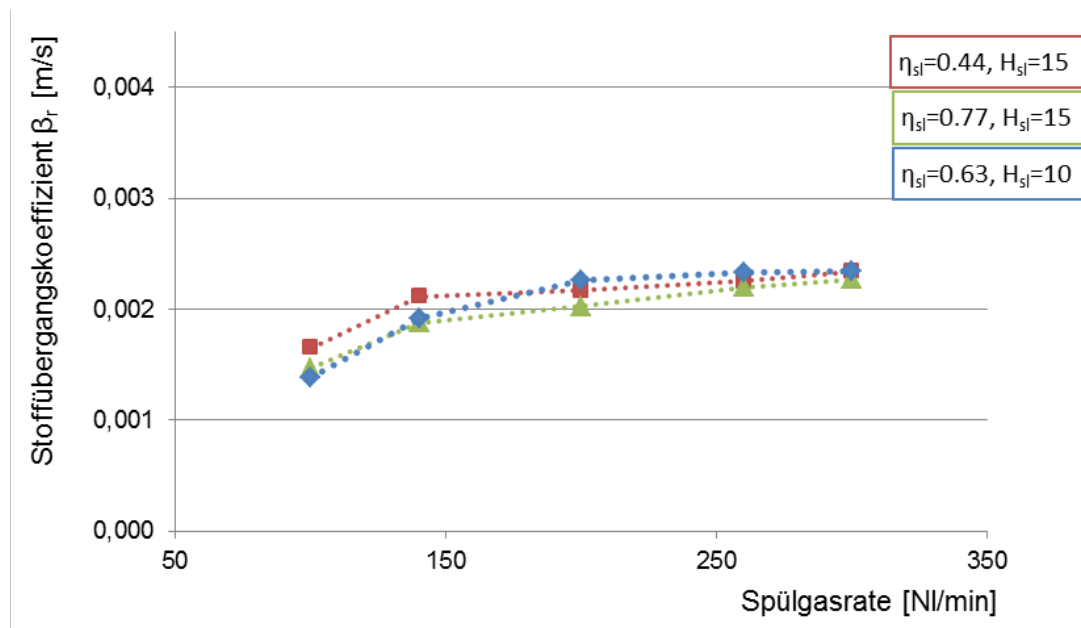


Abb. 33: Mittlere Stoffübergangskoeffizienten Feuerfest – Schlacke $\beta^{r/\xi}$ in Abhängigkeit von der Spülgasrate bei gleicher Schlackenviskosität (η_{sl}) und Schlackenbadhöhe (H_{sl}), $\cdots\blacksquare\cdots$ $\eta_{sl}=0.44$ Pas, $H_{sl} = 15$ cm, $\cdots\blacktriangle\cdots$ $\eta_{sl}=0.77$ Pas, $H_{sl} = 15$ cm und $\cdots\blacklozenge\cdots$ $\eta_{sl}=0.63$ Pas, $H_{sl} = 10$ cm

Für alle Serien in Abb. 33 ist ein starker Anstieg des Stoffübergangs Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/\xi}$ mit steigender Spülgasrate von 100 auf 140 NI/min zu beobachten. Die Serien mit einer Schlackenbadhöhe von 15 cm weist für die Viskosität von 0.44 Pas höhere Stoffübergangskoeffizienten auf als jene für eine Viskosität von 0.77 Pas. Zudem zeigt die Serie mit einer Viskosität von 0.77 Pas bei Spülgasraten von 140 bis 260 NI/min einen stärkeren Anstieg der Stoffübergänge als die Serie mit niedriger Viskosität. Die Serie mit einer Schlackenbadhöhe von 10 cm weist bei Spülgasraten von 140 und 200 NI/min einen erhöhten Stoffübergang gegenüber den Serien mit 15 cm Schlackenbadhöhe auf. Bei Spülgasraten über 200 NI/min steigt - bei der Serie mit 10 cm Schlackenbadhöhe - der Stoffübergang nur mehr wenig an.

Abb. 35 zeigt eine Gegenüberstellung der Serien des Stoffüberganges Metall - Schlacke $\beta^{m/\xi}$ mit denen des Stoffüberganges Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/\xi}$.

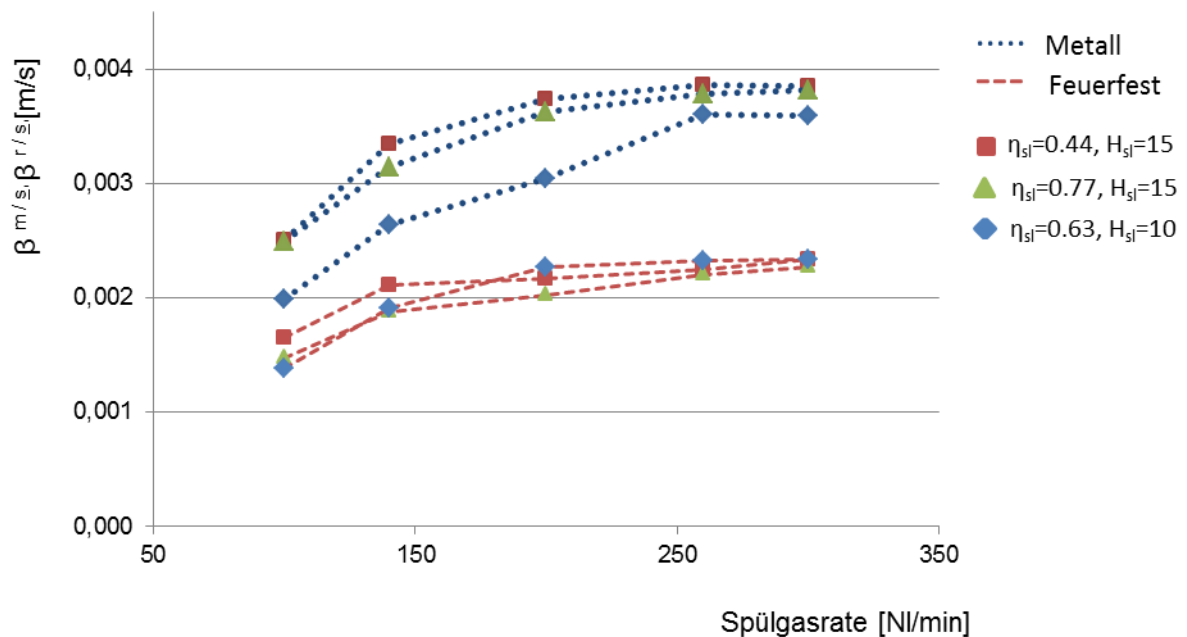


Abb. 34: Gegenüberstellung der mittleren Stoffübergangskoeffizienten $\beta^{m/s}$ Metall – Schlacke und $\beta^{r/s}$ Feuerfest – Schlacke in Abhängigkeit von der Spülgasrate bei gleicher Schlackenviskosität (η_{sl}) und Schlackenbadhöhe (H_{sl}), $\eta_{sl}=0.44$ Pas, $H_{sl} = 15$ cm, $\eta_{sl}=0.77$ Pas, $H_{sl}= 15$ cm und $\eta_{sl}=0.63$ Pas, $H_{sl} = 10$ cm

Aus Abb. 34 ist ersichtlich, dass der stärkste Anstieg des Stoffübergangs Feuerfest - Schlacke $\beta^{r/s}$ bei Spülgasraten zwischen 100 und 140 NI/min auftritt und für den Stoffübergang Metall - Schlacke ist ein deutlicher Anstieg bis zu einer Spülgasrate von 200 NI/min zu beobachten. Die niedrigere Viskosität von 0.44 Pas führt bei beiden Stoffübergängen zu erhöhten Werten, bei gleichen Schlackenbadhöhen von 15 cm. Spülgasraten von 260 - 300 NI/min bei Schlackenbadhöhen von 15 cm weisen einen leichten Anstieg des Stoffübergang Feuerfest - Schlacke auf, für den Stoffübergang Metall - Schlacke ist dies nur bei einer Viskosität von 0.77 Pas festzustellen. Die Serie mit einer Schlackenbadhöhe von 10 cm - bei einer Viskosität von 0.63 Pas - weist für den Stoffübergang Metall - Schlacke generell niedrigere Werte auf. Für den Stoffübergang Feuerfest - Schlacke ist dies nur bei der Spülgasrate von 100 NI/min der Fall, bei höheren Spülgasraten nimmt der Stoffübergang gegenüber den beiden Serien mit 15 cm Schlackenbadhöhe deutlich zu.

Für die drei untersuchten Fälle ergeben sich folgende optimale Bedingungen: Aus den Serien mit einer Schlackenbadhöhe von 15 cm - bei Viskositäten von 0.44 und 0.77 Pas - sind die Spülgasraten von 200 und 300 NI/min günstig, da der Stoffübergang Metall - Schlacke schon sehr hohe Werte erreicht und der Stoffübergang Feuerfest - Schlacke hier nur mehr wenig ansteigt. Die Serien mit einer Schlackenbadhöhe von 15 cm weisen gegenüber der Serie mit 10 cm generell höhere Stoffübergänge Metall - Schlacke auf.

Bei der Serie mit 10 cm Schlackenbadhöhe - bei einer Viskosität von 0.63 Pas - kommt es für den Stoffübergang Metall - Schlacke bei Spülgasraten von 260 und 300 NI/min zu einem Maximum; der

Stoffübergang Feuerfest - Schlacke steigt in diesem Bereich nur mehr wenig. Niedrigere Spülgasraten von 140 und 200 NI/min weisen noch einen deutlichen Anstieg des Stoffübergangs Metall - Schlacke auf.

Der Einfluss der Spülgasrate auf die Geschwindigkeit in den Grenzflächenzellen und auf die Grenzflächengröße

Die Geschwindigkeiten in den Grenzflächenzellen sowie die Größen der Grenzflächen sind für den Stoffübergang Metall - Schlacke als auch für den Stoffübergang Feuerfest - Schlacke aus den Simulationen zugänglich, siehe Abb. 35.

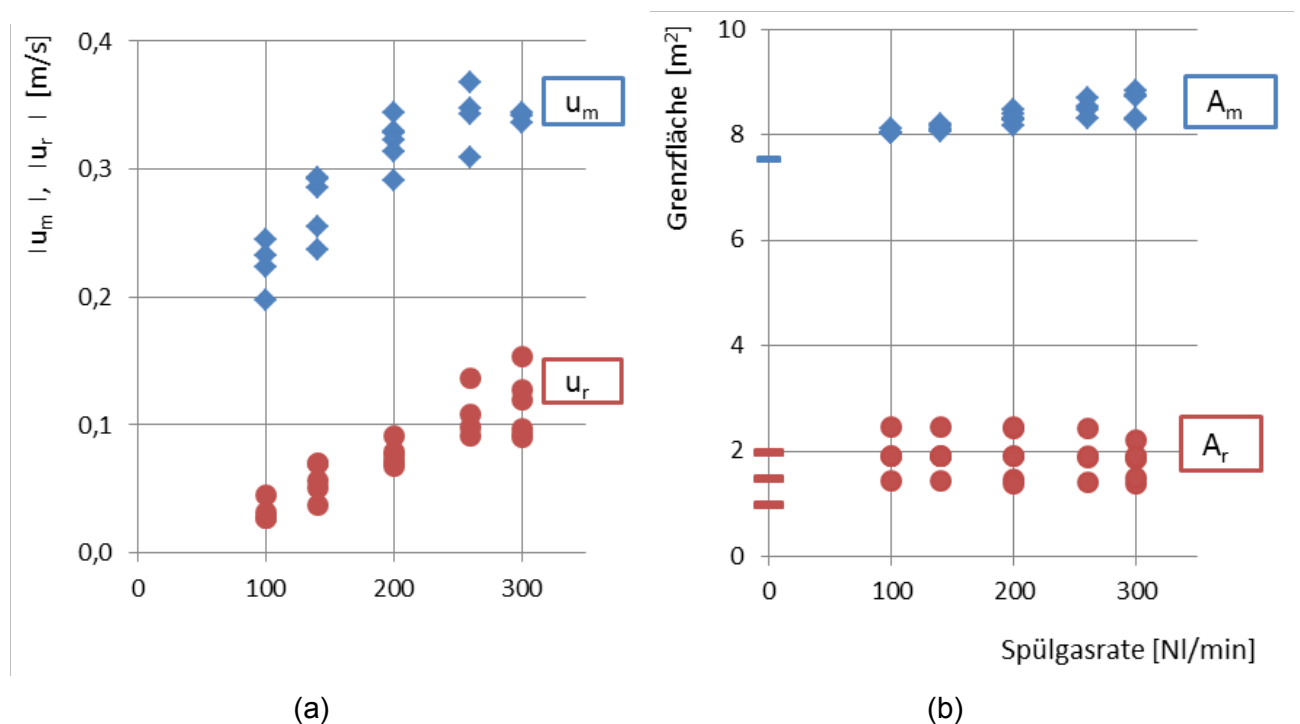


Abb. 35: Betrag der Geschwindigkeiten in den Grenzflächenzellen Metall - Schlacke u_m , Feuerfest - Schlacke u_r (a), Größe der Grenzflächen Metall - Schlacke A_m , Feuerfest - Schlacke A_r (b) in Abhängigkeit von der Spülgasrate

Die Beträge der Geschwindigkeiten Abb. 36 (a) sowie die Grenzflächengröße Abb. 36 (b) in den Metall - Schlacke Grenzflächenzellen liegen deutlich höher als jene in der Feuerfest - Schlacke Grenzflächenzellen. Die Geschwindigkeiten Metall - Schlacke, Feuerfest - Schlacke als auch die Grenzflächengröße Metall - Schlacke zeigen mit steigender Spülgasrate einen Anstieg. Die Größe der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke zeigt eine Aufteilung in drei Gruppen, diese wird von der Schlackenbadhöhe verursacht, siehe Abb. 36.

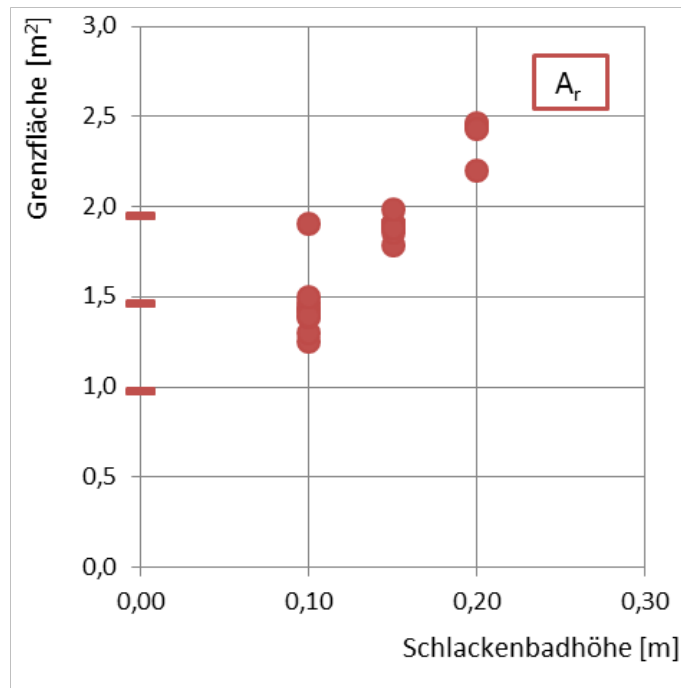


Abb. 36: Größe der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke A_r in Abhängigkeit von der Schlackenbadhöhe

Mit steigender Schlackenbadhöhe nimmt auch die Größe der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke A_r zu, siehe Abb. 36.

In Abb. 37 sind die Beträge der Geschwindigkeiten und Größen für beide Grenzflächen Metall - Schlacke und Feuerfest - Schlacke für Serien gleicher Viskosität und Schlackenbadhöhe dargestellt.

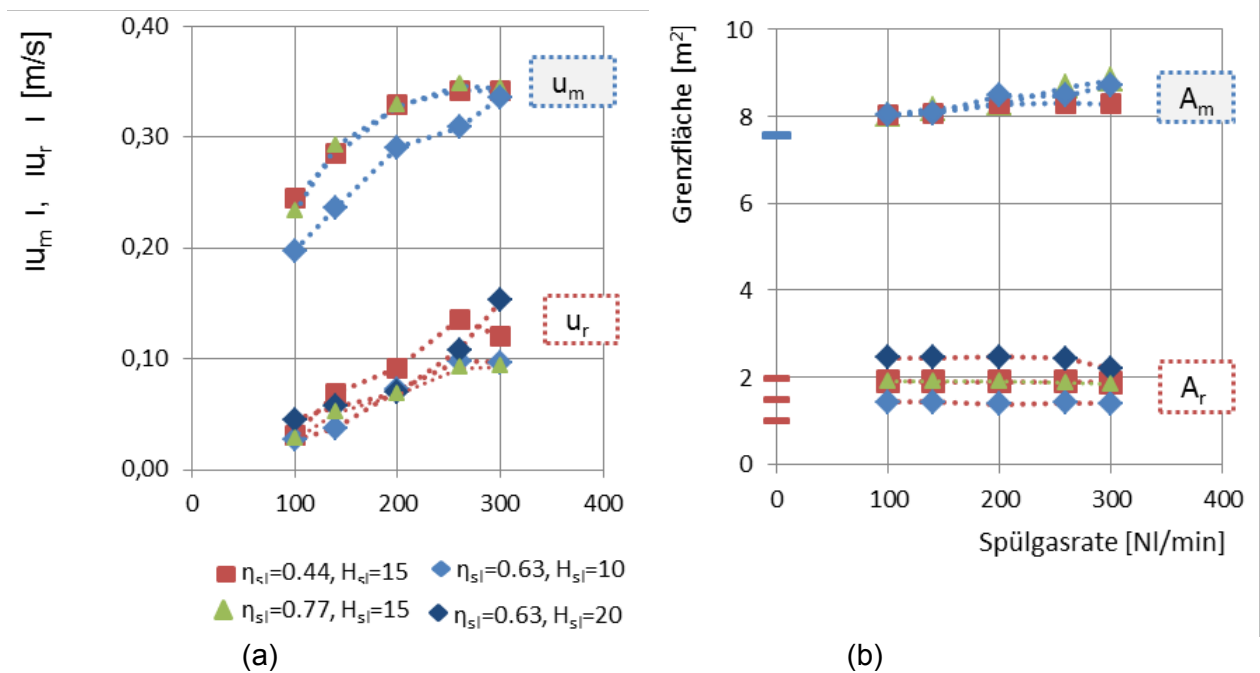


Abb. 37: Betrag der Geschwindigkeiten in den Grenzflächenzellen Metall - Schlacke u_m und Feuerfest - Schlacke u_r (a) sowie die Größen der Grenzflächen Metall - Schlacke A_m und

Feuerfest - Schlacke A_r (b) für Serien mit steigender Spülgasrate bei gleichen Viskositäten η_{sl} und Schlackenbadhöhe H_{sl}

In Abb. 37 (a) ist ein Anstieg des Betrags der Geschwindigkeit in den Grenzflächenzellen Feuerfest - Schlacke u_r für Spülgasraten von 100 - 260 NI/min zu sehen. Zwischen 260 und 300 NI/min kommt es zu einer Stagnation des Betrags der Geschwindigkeit bei den Serien mit einer Schlackenbadhöhe von 10 und 15 cm und einer Viskosität von 0.63 und 0.77 Pas. Für die Serie mit einer Schlackenbadhöhe von 15 cm bei einer Viskosität von 0.44 Pas kommt es zu einer Verringerung des Betrags der Geschwindigkeit. Für den Fall mit einer Schlackenbadhöhe von 20 cm und einer Viskosität von 0.63 Pas ist auch im Bereich hoher Spülgasraten ein Anstieg der Geschwindigkeit zu beobachten.

In den Grenzflächenzellen Metall - Schlacke steigt die Geschwindigkeit ebenfalls von 100 - 260 NI/min an. Bei Spülgasraten über 260 NI/min kommt es zu einer Stagnation des Geschwindigkeitsanstiegs in den Serien mit einer Schlackenbadhöhe von 15 cm. Für die Serie mit einer Schlackenbadhöhe von 10 cm bei einer Viskosität von 0.63 Pas steigt die Geschwindigkeit über den gesamten Spülgasratenbereich an.

Die Größe der Grenzfläche Metall - Schlacke nimmt mit steigender Spülgasrate in allen Serien zu, siehe Abb. 37 (b). Hingegen bleibt die Größe der Grenzfläche Feuerfest - Schlacke zwischen 100 und 260 NI/min in allen Serien auf ähnlichem Niveau und ist hauptsächlich von der Schlackenbadhöhe bestimmt. Zwischen 260 und 300 NI/min kommt es zu einer Verringerung der Grenzflächengröße, allerdings ist dies nur für den Fall mit 20 cm Schlackenbadhöhe deutlich ausgeprägt.

5.4 Ermittlung dimensionsloser Potenzgesetze für die Stoffübergänge Metall -Schlacke und Feuerfestmaterial - Schlacke

Für die Spülgasraten zwischen 100 - 300 NI/min, werden im Folgenden dimensionslose Gleichungen für die Stoffübergänge von der Grenzfläche Metall - Schlacke und Feuerfestmaterial - Schlacke ermittelt.

Aus der Parameterstudie, siehe Kapitel 5.3.3, ergibt sich für Glg. (32) und Glg. (33) ein überbestimmtes Gleichungssystem für die Unbekannten $\alpha, \gamma, \varepsilon, \zeta, \theta, \kappa, \lambda$ und μ . Mittels der Methode des kleinsten Fehlerquadrates lässt sich dieses lösen und es ergibt sich für den Stoffübergang Metall - Schlacke Glg. (34), die ein Bestimmtheitsmaß von 0.973 aufweist.

$$Sh^{m/\bar{s}} = 9407 \cdot Re^{0.407} \cdot (Sc^{m/\bar{s}})^{0.342} \cdot \Gamma^{0.769} \text{ mit } B = 0.973 \quad (34)$$

Für den Stoffübergang Feuerfest - Schlacke ergibt sich Glg. (35) mit einem Bestimmtheitsmaß B von 0.933.

$$Sh^{r/\bar{s}} = 19\,843 \cdot Re^{0.283} \cdot (Sc^{r/\bar{s}})^{0.161} \cdot \Gamma^{0.649} \text{ mit } B = 0.933 \quad (35)$$

Die ermittelten Gleichungen (34) und (35) gelten strenggenommen für Stahlpfannen mit dem Verhältnis der Innenabmessungen von Pfannenradius zu Pfannenhöhe von 0.381. Die geometrische Ähnlichkeit beinhaltet auch die Positionen der Spülsteine. Die Exzentrizität der Spülsteine ist bestimmt durch das Verhältnis aus dem jeweils gleichen Abstand der Spülsteine vom Pfannenmittelpunkt zum Pfannenradius von 0.615, sowie durch den Winkel von 125° der Spülsteine zueinander.

Aus der Variation der Einflussgrößen im Rahmen der Parameterstudie ergibt sich der in Tab. 7 angeführte Gültigkeitsbereich für die ermittelten Sh-Gleichungen.

Metall – Schlacke	Feuerfest – Schlacke
$60 \leq Re \leq 420$	
$393000 \leq Sc^{m/\bar{s}} \leq 688800$	$65\,200 \leq Sc^{r/\bar{s}} \leq 114\,000$
$0.060 \leq \Gamma \leq 0.130$	

Tab. 7: Gültigkeitsbereich für die ermittelten Sh-Gleichungen

5.5 Anwendung der Sherwood-Gleichungen

Mit den Sherwood-Gleichungen (34) und (35) lassen sich die Stoffübergangskoeffizienten sowie die Stoffstromdichten [1] für den Stoffübergang Feuerfestmaterial - Schlacke:

$$\beta^{r/\underline{s}} = 19843 \cdot (D^{r/\underline{s}})^{0.839} \cdot u_g^{0.283} \cdot H_{sl}^{-0.068} \cdot \nu_{sl}^{-0.122} \cdot R^{-0.649} \quad (36)$$

$$j^{r/\underline{s}} = 19843 \cdot (D^{r/\underline{s}})^{0.839} \cdot u_g^{0.283} \cdot H_{sl}^{-0.068} \cdot \nu_{sl}^{-0.122} \cdot R^{-0.649} \cdot \Delta c \quad (37)$$

sowie für den Stoffübergang Metall - Schlacke:

$$\beta^{m/\underline{s}} = 9407 \cdot (D^{m/\underline{s}})^{0.658} \cdot u_g^{0.407} \cdot H_{sl}^{0.176} \cdot \nu_{sl}^{-0.065} \cdot R^{-0.769} \quad (38)$$

$$j^{m/\underline{s}} = 9407 \cdot (D^{m/\underline{s}})^{0.658} \cdot u_g^{0.407} \cdot H_{sl}^{0.176} \cdot \nu_{sl}^{-0.065} \cdot R^{-0.769} \cdot \Delta c \quad (39)$$

bestimmen. Bei der Anwendung der Gleichungen sind die Gültigkeitsbereiche sowie die geometrischen Abmessungen zu berücksichtigen. Ziel dieser Arbeit ist es jene Kombination aus Spülgasrate, Schlackenbadhöhe und Viskosität festzustellen, welche einen maximalen Stoffübergang Metall - Schlacke bei einem minimalen Stoffübergang Feuerfest - Schlacke bewirkt. Die in 5.4 hergeleiteten dimensionslosen Gleichungen für den Stoffübergang Metall - Schlacke Glg. (34) und Feuerfest - Schlacke Glg. (35) sind zur Berechnung der Stoffübergänge aller Kombinationen aus einer Viskosität von 0.44, 0.63 und 0.77 Pas, der Schlackenbadhöhen von 10, 15 und 20 cm und Spülgasraten von jeweils 100, 140, 200, 260 und 300 NI/min verwendet worden. Die resultierenden dimensionslosen Stoffübergangskoeffizienten sind in Abhängigkeit von der Spülgasrate in Form einer Matrix aus Diagrammen für die jeweiligen Kombinationen aus Viskosität und Schlackenbadhöhe dargestellt, siehe Abb. 38.

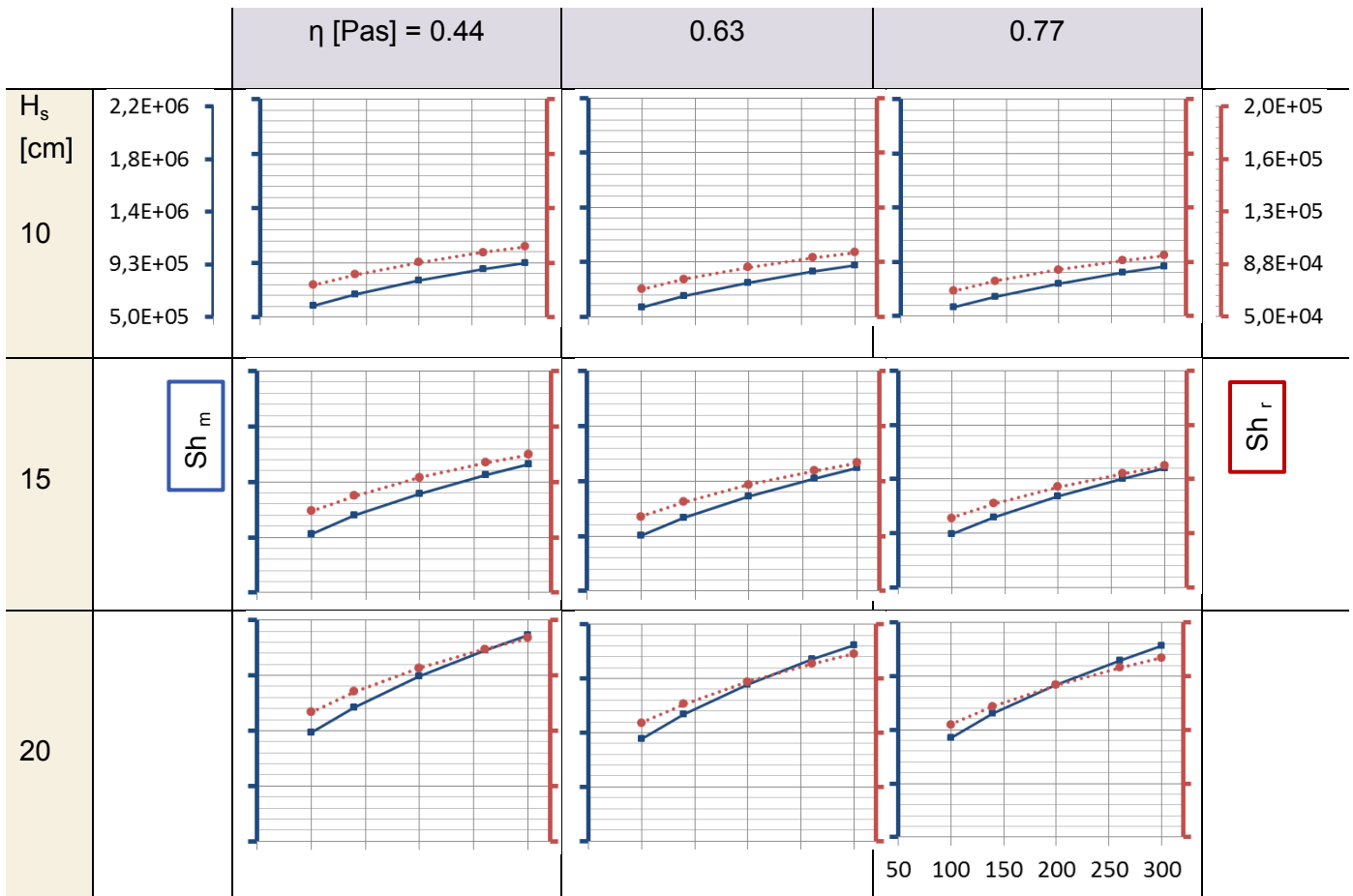


Abb. 38: Anwendung der dimensionslosen Gleichungen (34) und (35) für den Stoffübergang Metall - Schlacke $\text{---}\blacksquare\text{---}$ und den Stoffübergang Feuerfest - Schlacke $\text{---}\bullet\text{---}$ in Form einer Matrix aus Diagrammen für die dimensionslosen Stoffübergangskoeffizienten $Sh^{m/s}$ und $Sh^{r/s}$ in Abhängigkeit von der Spülgasrate, Spalten gleicher Viskosität (0.44, 0.63, 0.77 Pas), Reihen gleicher Schlackenbadhöhe (10, 15, 20 cm)

Die Stoffübergänge steigen mit steigender Spülgasrate in allen Fällen an, siehe einzelne Diagramme von 100 - 300 NI/min. Mit zunehmender Schlackenbadhöhe nehmen die Stoffübergänge generell zu - Spalten von oben nach unten. Mit zunehmender Viskosität sinken die Stoffübergänge - von links nach rechts. Des Weiteren kommt es zu einer Zunahme des Gradienten der Sherwood-Zahlen mit zunehmender Viskosität und Schlackenbadhöhe, wobei der Gradient des Stoffüberganges Metall - Schlacke stärker steigt als jener des Stoffüberganges Feuerfest - Schlacke.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Mit der vorliegenden Arbeit werden für eine gasgespülte Stahlpfanne jene optimalen Prozessbedingungen aufgezeigt, bei denen der Stoffübergang zwischen dem Metallbad und der Schlacke ein Maximum erreicht bei einem gleichzeitig möglichst geringen Stoffübergang zwischen dem Feuerfestmaterial und der Schlacke.

Zur Darstellung des Stoffübergangs in der Schlacke, ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke, wurde ein Modell entwickelt, das auf dem Modell für den Stoffübergang von der Wand in eine flüssige Phase [14, 15, 16, 18, 19] und auf dem 2nd Fick'schen Gesetz beruht. Damit können strömungsbestimmte Prozesse, in dreidimensionalen Geometrien abgebildet werden und in weiterer Folge einer Optimierung zugänglich gemacht zu werden.

Bei der Validierung des Stoffübergangsmodells wurde die eindimensionale Lösung der Diffusionsgleichung mit der Methode der Finiten Differenzen den dreidimensionalen CFD Lösungen gegenübergestellt. Dabei zeigte sich, dass die Anwendung einer Differenzenapproximation der Diffusionsgleichung für die Konzentration an der Phasengrenzfläche bei der CFD Simulation mit der eindimensionalen Lösung der Diffusionsgleichung nach der Methode der Finiten Differenzen übereinstimmt. Eine Prüfung zeigte, dass die Ergebnisse in ausreichend großen Bereichen nahezu zeitschrittweiten- und gitterunabhängig sind. Darüber hinaus zeigte die Überprüfung des Diskretisierungsverfahrens sowie die Erprobung des Einflusses der Konvektion ein stimmiges Ergebnis.

Um eine realitätsnahe Darstellung der Strömung in der gasgespülten Stahlpfanne bei gleichzeitig kurzen Simulationszeiten zu gewährleisten erfolgte die Abbildung der Turbulenz mit dem SAS-Modell (scale adaptive simulation). Die Ergebnisse des SAS-Modells sind in guter Übereinstimmung mit jenen, die eine LES (large eddy simulation) liefert. Des Weiteren wurde die Modellierung des Spülgasstroms mit Erweiterungen zur Blasenform (unter Einbeziehung des Widerstandbeiwerts) und zum Schwarmverhalten versehen, beides in Form von UDF's (user defined functions). Zudem wurde der Stoffübergang vom Feuerfestmaterial in die Schlacke modelliert. Für die Parameterstudie sind zwei aktiven Spülsteinen verwendet worden. Spülgasraten je Spülstein, Schlackenviskosität, Diffusionskoeffizienten in der Schlacke und Schlackenbadhöhen sind jenen in der Praxis vorherrschenden Bedingungen angepasst. Die Variation der Parameter beruht auf dem zentral zusammengesetzten Versuchsplan sowie auf Serien mit ansteigender Spülgasrate bei gleicher Viskosität und Schlackenbadhöhe.

In der Vorstudie konnte der Variationsbereich der Parameter eingeschränkt werden. Zwischen 100 - 300 Nl/min kommt es zu einem Anstieg der Geschwindigkeit, womit auch eine Beschleunigung des Stoffübergangs zu erwarten ist. Für die Schlackenverteilung zeigt sich in diesem Spülgasbereich sowohl ein stabiles Schlackenauge als auch ein stabiler Spülgasstrom, höhere

Spülgasraten sowie sehr geringe Schlackenviskositäten führen zu instabilen Bewegungen des Schlackenbads und der Spülgasströme. Spülgasraten unter 100 NI/min bewirken die Entstehung und Vergrößerung der Schlackenaugen und sind in der Praxis unüblich.

Die Geschwindigkeiten in den Grenzflächenzellen Metall - Schlacke als auch Feuerfest - Schlacke sowie die Grenzflächengröße Metall - Schlacke steigen bei Spülgasraten zwischen 100 – 300 NI/min an. Die Grenzflächengröße Feuerfest - Schlacke ist hauptsächlich von der Schlackenbadhöhe abhängig und bleibt recht unverändert außer für hohe Spülgasraten; hier ist eine geringere Grenzflächengröße Feuerfest - Schlacke zu beobachten.

Für den Spülgasbereich zwischen 100 – 300 NI/min wurde eine dimensionslose Gleichung für den Stoffübergang in der Schlacke ausgehend von der Grenzfläche Metall - Schlacke und ein weiterer für die Grenzfläche Feuerfest - Schlacke hergeleitet, Glg. (34) und (35). Diese lassen im entsprechenden Gültigkeitsbereich eine Abschätzung der Stoffübergänge zu und ermöglichen die Ermittlung günstiger Prozessparameter hinsichtlich eines geringen Stoffübergangs Feuerfest - Schlacke und eines hohen Stoffübergangs Metall - Schlacke.

Es konnte gezeigt werden, daß die berechneten Stoffübergangskoeffizienten Metall - Schlacke und Feuerfest - Schlacke mit ansteigenden Spülgasraten, steigender Schlackenbadhöhe und sinkender Viskosität einen Anstieg aufweisen.

Aus den Serien von Simulationen bei Viskositäten von 0.44 und 0.77 Pas und einer Schlackenbadhöhe von 15 cm ist zu sehen, dass hohe Stoffübergänge Metall - Schlacke bei gleichzeitig geringen Stoffübergängen Feuerfest - Schlacke bei Spülgasraten von 200 – 300 NI/min auftreten. Die Serie von Simulationen mit einer Schlackenbadhöhe von 10 cm bei einer Viskosität von 0.63 Pas zeigt ein gemeinsames Optimum zwischen 260 – 300 NI/min.

Die hier entwickelte Modellierung bildet die Basis für Optimierungsarbeiten an unterschiedlichsten Aggregaten, in denen es zu Stoffübergängen zwischen flüssigen Phasen kommt. Strömungsbereiche können festgestellt werden, die einen optimalen Stoffübergang zwischen den flüssigen Phasen bei gleichzeitiger Reduktion des Verschleißes des Feuerfestmaterials erwarten lassen.

7 Literatur

- [1] S. Vollmann, „Einfluss der Strömungsmechanik auf den Verschleiss feuerfester Baustoffe,“ Montanuniversität, Leoben, 2010.
- [2] H. Harmuth, *Continuous Refractory Wear*, Leoben: Montanuniversität, 2016.
- [3] M. Andersson, M. Hallberg, L. Jonsson und P. Jönsson, „Slag-metal reactions during ladle treatment with focus on desulphurisation,“ *Ironmaking and Steelmaking Vol. 29 No. 3*, pp. 224-232, 2002.
- [4] F. Oeters, *Metallurgie der Stahlherstellung*, Düsseldorf: Verlag Stahleisen, 1989.
- [5] S. D. Clinton und J. J. Perona, „Mass transfer in a bubble-agitated liquid-liquid system,“ *Ind. Eng. Chem. Fundam. 21*, pp. 269-271, 1982.
- [6] S. Asai, M. Kawachi und I. Muchi, „Mass transfer rate in ladle refining processes.,“ in *3rd International Conference on Refining of Iron and Steel by Powder Injection.*, 1983.
- [7] H. D. Baehr und K. Stephan, *Wärme- und Stoffübertragung*, Berlin Heidelberg: 5. Auflage, Springer Verlag, 2006.
- [8] F. P. Incropera, D. P. Dewitt, T. L. Bergman und A. S. Lavine, *Fundamentals of heat and mass transfer*, 6. Auflage. John Wiley & Sons, 2007.
- [9] J. Crank, *The mathematics of diffusion*, 2. Auflage. Oxford science publications, 1975.
- [10] D. Mazumdar und R. I. L. Guthrie, „The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems, Review,“ *ISIJ International Vol. 35/1*, pp. 1-20, 1995.
- [11] P. Sulasalmi, V. V. Visuri, A. Kärnä und T. Fabritius, „Simulation of the effect of steel flow velocity on slag droplet distribution and interfacial area between steel and slag,“ in *Steel research international 85*, 2014.
- [12] S.-H. Kim und R. J. Fruehan, „Physical modeling of liquid/liquid mass transfer in gas stirred ladle,“ *Metallurgical Transaction Vol. 18B*, pp. 381-390, 1987.
- [13] M. Ishii und T. Hibiki, *Thermal-Fluid Dynamics of two-phase flow*, USA : Springer New York Dordrecht Heidelberg London, 2011.
- [14] *Ansys Fluent Theory Guide. Release 14.5.*, 2012.
- [15] V. C. L. Jayatilleke, The influence of prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sub-layer to momentum and heat transfer, *Prog. Heat Mass*

-
- Transfer. 1. 193 -321, 1969.
- [16] B. E. Launder und D. B. Spalding, „The numerical computation of turbulent flows,“ *Computer methodes in applied mechanics and engineering*, Bd. Vol. 3, pp. 269-289, 1974.
- [17] H. Harmuth, *Modeling and Simulation in Building Materials Technology*, Leoben: Montanuniversität Leoben, 2014.
- [18] S. Martens, *Strömungsmechanik und Stoffaustausch*, TU - Graz: Institut für chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, 2014.
- [19] S. Pirker, *Numerische Methoden in der Strömungsmechanik*, Linz: Johannes Kepler Universität, 2013.
- [20] R. Teppner, „Blasenentstehung an porösen Wänden,“ Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung der technischen Universität Graz, Graz, 2004.
- [21] Y. Tang, G. Lukesch und S. Tiede, „Purging beam investigation with the aid of numerical simulation,“ in *Proceedings 51st International Colloquium on Refractories*, Aachen, Germany, 2008.
- [22] A. Alexiadis, P. Gardin und J. F. Domgin, „Spot turbulence, breakup and coalescence of bubbles released from a porous plug injection into a gas-stirred ladle,“ *Metallurgical and materials transactions B Vol. 35B*, pp. 949-956, 2004.
- [23] S. Ganguly und S. Chakraborty, „Numerical modelling studies of flow and mixing phenomena in gas stirred steel ladles,“ *Ironmaking and Steelmaking Vol. 35*, pp. 524-530, 2008.
- [24] S. M. Pan, Y. H. Ho und W. S. Hwang, „Three-dimensional fluid flow model for gas-stirred ladles,“ *Journal of materials engineering and performance Vol. 6 (3)*, pp. 311-318, 1997.
- [25] B. König, „Multiscale experimental investigations of flow pattern and slag interaction in a bubble stirred water basin during unsteady operation,“ Johannes Kepler Universität, Linz, 2016.
- [26] P. Valentin, C. Bruch, Y. Kyrylenko, H. Köchner und C. Dannert, „Influence of the stirring gas in a 170-t ladle on mixing phenomena formation and on-line control of open-eye at an industrial LD steel plant,“ *Steel Research Int. 80 No. 8*, pp. 552-558, 2009.
- [27] J. X. Deng , Stoffübergang von Schwefel zwischen flüssigem Eisen und Kalk - Tonerde

-
- Schlacken., Technische Universität Berlin: Dissertation, 1988.
- [28] M. Hirasawa, K. Mori, M. Sano, A. Hatanaka, Y. Shimatani und Y. Okazaki, „Rate of mass transfer between molten slag and metal under gas injection stirring,“ *Transaction of the Iron and Steel Institute of Japan*, Bd. Vol. 27, pp. 277-282, 1987.
- [29] M. Hirasawa, K. Mori, M. Sano, Y. Shimatani und Y. Okazaki, „Correlation equation for metal-side mass transfer in a slag-metal reaction system with gas injection stirring,“ *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, Bd. Vol. 27, pp. 283-290, 1987.
- [30] L. Muhmood, N. N. Viswanathan und S. Seetharaman, „Studies of dynamic mass transfer at the slag-metal interface interfacial velocity measurements,“ *Int. J. Mat. Res.* 103 / 7, 2012.
- [31] Y. Chung und A. W. Cramb, „Dynamic and equilibrium interfacial phenomena in liquid steel-slag systems,“ *Metallurgical and materials Transactions B Vol. 31 B*, pp. 957-971, 2000.
- [32] H. Weller, „www.openfoam.com,“ 2018. [Online].
- [33] D. Bothe und S. Fleckenstein, „A Volume-of-fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles,“ *Chemical Eng. Science* 101, pp. 283 - 302, 2013.
- [34] D. Bothe, M. Koebe, K. Wielage, J. Prüss und H. J. Warnecke, „Direct numerical simulation of mass transfer between rising gas bubbles and water,“ *Heat and Mass transfer* , pp. 159 - 174, 2004.
- [35] W. Lou und M. Zhu, „Numerical simulation of desulfurization behavior in gas-stirred systems based on computation fluid dynamics-simultaneous reaction model (CFD-SRM) coupled model,“ *Metallurgical and Materials Trans. B Vol. 45 B*, pp. 1706 - 1722, 2014.
- [36] W. Lou und M. Zhu, „Numerical simulation of slag-metal reactions and desulfurization efficiency in gas-stirred ladles with different thermodynamics and kinetics,“ *ISIJ Int. Vol. 55, No. 5*, pp. 961 - 969, 2015.
- [37] P. G. Jönsson und L. T. I. Jonsson, „The use of fundamental process models in studying ladle refining operations. Review,“ *ISIJ Int. Vol. 41 No. 11*, pp. 1289-1302, 2001.
- [38] A. Kharicha und A. Vakhrushev, „Grundlagen und Anwendung der Mehrphasensimulation,“ Lehrstuhl für Modellierung und Simulation metallurgischer Prozesse, Leoben, 2013.
- [39] O. Ubbink, „Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces,“ Imperial

College of Science, Technology & Medicine , London, 1997.

- [40] K. Krishnapisharody und G. A. Irons, „A critical review of the modified froude number in ladle metallurgy,“ *Metallurgical and materials transactions B*, Vol. 44B, pp. 1486 - 1498, 2013.
- [41] K. Krishnapisharody und G. A. Irons, „A unified approach to the fluid dynamics of gas-liquid plumes in ladle metallurgy,“ *Journal of the Japan Institue of metals and materials* Vol. 50 No. 10, pp. 1413 - 1421, 2010.
- [42] K. Krishnapisharody und G. A. Irons, „An Extended model for slag eye size in ladle metallurgy,“ *ISIJ Int. Vol. 48, No. 12*, pp. 1807 - 1809, 2008.
- [43] J. Olsen und S. Cloete, „Coupled DPM and VOF model for analyses of gas stirred ladles at higher gas rates,“ in *7th Int. Conference on CFD in the minerals and process industries CSIRO*, Melbourne, Australia, 2009.
- [44] U. Sand, H. Yang, J. Eriksson und R. Fdhila, „Numerical and experimental study on fluid dynamic features of combined gas and electromagnetic stirring in ladle furnace,“ *Steel research int. 80 No.6*, pp. 441 -449, 2009.
- [45] H. Liu, Z. Qi und M. Xu, „Numerical simulation of fluid flow and interfacial behavior in three-phase argon-stirred ladles with one plug and dual plugs,“ *Steel research Int. 82 No. 4*, pp. 441 - 458, 2011.
- [46] M. Iguchi, H. Takeuchi und Z. Morita, „The flow field in air-water vertical bubbling jets in a cylindrical vessel,“ *ISIJ Int. Vol.31 No.3*, pp. 246 - 253, 1991.
- [47] M. Sommerfeld, „Theoretical and experimental modelling of particulate flows, Lecture Series 2000 -06,“ Karman Institue of fluid dynamics, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Germany, Halle (Saale), 2000.
- [48] M. Ishii und N. Zuber, „Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows,“ *American Institue of chemical engineers Journal Vol. 25*, pp. 843-855, 1979.
- [49] S. A. Morsi und A. J. Alexander, „An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems,“ *Journal of fluid mechanics Vol.55, Iss. 02* , pp. 193 - 208, 1972.
- [50] C. Li, S. C. P. Cheung, G. H. Yeoh und J. Tu, „Influence of drag florces on a swarm of bubbles in isothermal bubbly flow conditions,“ in *Seventh International conference on CFD in the minerals and process industries*, Melbourne, 2009.

-
- [51] S. Schneiderbauer und M. Krieger, „What do the Navier-Stokes equations mean?“, *European Journal of Physics* 35, 2014.
- [52] H. J. Odenthal, M. Javurek und M. Kirschen, „CFD Benchmark for a single strand tundish (Part I)“, Steel Institute VDEh - Working group "Fluid mechanics and fluid simulation", 2009.
- [53] F. R. Menter und Y. Egorov, „The scale-adaptive simulation method for unsteady turbulent flow predictions. Part 1: Theory and model description“, *Flow Turbulence Combust* 85, pp. 113 - 138, 2010.
- [54] S. M. Salim, K. C. Ong und S. C. Cheah, „Comparison of RANS, URANS and LES in the prediction of airflow and pollutant dispersion Vol II“, in *Proceedings of the world congress on engineering and computer science* , San Francisco, USA, 2011.
- [55] M. Doletschek, S. Pirker und H. Harmuth, „The role of turbulence modelling in picturing gas stirred steel ladle flow“, in *SteelSim 10.-12. September*, Ostrava, Tschechien, 2013.
- [56] S. Pirker , B. König, S. Puttinger, M. Doletschek und H. Harmuth, „A glance on turbulence modelling in simulating bubble stirred ladle flow“, *Berg- und Hüttenmännische Monatshefte Heft 11*, pp. 472 - 474, 2013.
- [57] S. Taniguchi, S. Kawaguchi und A. Kikuchi, „Fluid flow and gas-liquid mass transfer in gas-injected vessels“, *App. Math. Modelling* 26, pp. 249 - 262, 2002.
- [58] S. Pirker, „CFD-a design tool for a new hot metal desulfurization technology.“ *Applied Mathematic Modelling*. 26, pp. 337-350, 2002.
- [59] M. Radune, A. Radune, F. Assous und M. Zinigrad, „Modelling and computer simulation of reagents diffusion in high temperature diffusion controlled heterogeneous reactions“, *Computational materials science and surface engineering Vol.1 Issue 4*, pp. 225 - 231, 2009.
- [60] C. Albert, H. Marschall und D. Bothe, „Direct numerical simulation of interfacial mass transfer into falling films“, *Int. Jour. of Heat and Mass Transfer* 69 , pp. 343 - 357, 2014.
- [61] M. Kröger, A. Alke, D. Bothe und H. J. Warnecke, „A VOF-based approach for the simulation of reactive mass transfer from rising bubbles“, in *4th Int. Berlin workshop on transport phenomena with moving boundaries* , Berlin , 2007.
- [62] G. Venturini und M. Goldschmit, „Gas-liquid reaction model in gas-stirred systems: part 1. numerical model“, *Metallurgical and Materials Transactins B Vol. 38 B*, pp. 461 - 475,

-
- 2007.
- [63] J. M. van Baten und R. Krishna, „CFD simulations of mass transfer from Taylor bubbles rising in circular capillaries,“ *Chem. Eng. Science* 59, pp. 2535 - 2545, 2004.
- [64] L. Jonsson, D. Sichen und P. Jönsson, „A new approach to model sulphur refining in a gas-stirred ladle - a coupled CFD and thermodynamic model,“ *ISIJ Int. Vol. 38 No. 3*, pp. 260-267, 1998.
- [65] A. Shankar, „Sulphur partition between hot metal and high alumina blast furnace slag,“ *Ironm. and Steelm. Vol. 33 No. 5*, pp. 413 - 417, 2006.
- [66] M. Al-Harbi, H. V. Atkinson und S. Gao, „Gas stirred ladle: Multi-phase-species mathematical model,“ *AIS Tech - Iron and steel technology conference proceedings Vol. 1*, pp. 1311 - 1318, 2007.
- [67] M. Al-Harbi, H. V. Atkinson und S. Gao, „Modeling methodology to simulation of molten steel refining in a gas-stirred ladle using a coupled CFD and thermodynamic model,“ *Modeling of casting, welding and advanced solidification Processes-XI Vol.2*, pp. 1089 - 1096, 2006.
- [68] K. B. Deshpande und W. B. Zimmerman, „Simulation of interfacial mass transfer by droplet dynamics using the level set method,“ *Chem. Eng. Science* 61, pp. 6486 - 6498, 2006.
- [69] Z. S. Mao, T. Li und J. Chen, „Numerical simulation of steady and transient mass transfer to a single drop dominated by external resistance,“ *Int. Jour. Heat and Mass Transfer*, pp. 1235 - 1247, 2001.
- [70] A. Paschedag, W. Piarah und M. Kraume, „Grenzbetrachtungen zum Stofftransport am Einzeltropfen - Validierung numerischer Ergebnisse,“ *Chem. Ing. Technik (73)*, pp. 1431 - 1435, 2001.
- [71] A. Hassanvand und S. H. Hashemabadi, „Direct numerical simulation of mass transfer from Taylor bubble flow through a circular capillary,“ *Int. Jour. of Heat and Mass Transfer* 55, pp. 5959 - 5971, 2012.
- [72] M. R. Davidson und M. Rudman, „Volume-of-fluid calculation of heat or mass transfer across deforming interfaces in two-fluid flow,“ *Num. Heat Transfer, Part B* 41, pp. 291 - 308, 2002.
- [73] M. Javurek, *Fluent 5 Programmierung*, Linz: Johannes Kepler Universität, 1999.

-
- [74] M. Luckman, N. V. Nurni, I. Masanori und S. Seshandri, „Evaluating the Diffusion Coefficient of sulfur in low-Silica CaO-SiO₂-Al₂O₃ Slag,“ *Metallurgical and Materials Transaction V 42 B*, pp. 274-280, 2011.
- [75] L. Muhmood, „Investigation of thermophysical properties of slags with focus on slag-metal interface,“ Doctoral Thesis, Royal Institute of Technology, Schweden, 2010.
- [76] L. Muhmood, A. Semykina, M. Iwase und S. Seetharaman, „Some novel studies of thermodynamics, kinetics and transport phenomena in slags,“ *High Temperature Material Processes 32(4-5)*, pp. 351 - 358, 2012.
- [77] L. Muhmood, N. N. Viswanathan, M. Iwase und S. Seetharmana, „Evaluation the diffusion coefficient of sulfur in low-silica CaO-SiO₂-Al₂O₃ slag,“ *Metallurgical and Materials Transactions B 42*, pp. 274 - 280, 2011.
- [78] V. D. Eisenhüttenleute, Schlackenatlas, Düsseldorf: Verlag Stahleisen, 1981.
- [79] W. F. Gale und T. C. Totemeier, Smithells Metals Reference, Book. 8. Auflage. Elsevier Butterworth-Heinemann, 2004.
- [80] F. Durst, Grundlagen der Strömungsmechanik, Springer, 2006.
- [81] M. Zlokarnik, *Scale-up*, Leoben: Institut für Verfahrenstechnik MUL, 2008.
- [82] B. Zohuri, *Dimensional Analysis and Self-Similarity Methods for Engineers and Scientists*, Switzerland: Springer, 2015.
- [83] S. Seetharaman, L. Teng, M. Hayashi und L. Wang, „Understanding the properties of slags,“ *ISIJ International 53*, pp. 1-8, 2013.
- [84] T. Saiton und Y. Kawai, „Diffusion of sulphur in molten CaO-SiO₂-Al₂O₃ slags,“ *Journal of the Japan Institute of metals and materials 17*, pp. 434-438, 1953.
- [85] G. Shannon, L. White und S. Sridhar, „Modeling inclusion approach to the steel/slag interface,“ *Materials Science and Engineering A 495*, pp. 310-315, 2008.
- [86] M. Neifer, „Modellversuche und Simulationsrechnungen zur Strömung, Vermischung und Temperatur in gasgerührten metallurgischen Pfannen,“ Fakultät für Bergbau, Hüttenwesen und Geowissenschaften der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule , Aachen , 1993.
- [87] B. Li, H. Yin, C. Zhou und F. Tsukihashi, „Modeling of three-phase flows and behavior of slag/steel interface in an argon gas stirred ladle,“ *ISIJ Int. Vol. 48, No. 12*, pp. 1704 - 1711, 2008.

-
- [88] X. Li, Z. S. Mao und W. Fei, „Effects of surface-active agents on mass transfer of a solute into single buoyancy driven drops in solvent extraction systems,“ *Chem. Eng. Science* 58, pp. 3793 - 3806, 2003.
- [89] D. C. Montgomery, Design and analysis of experiments, Arizona State University: John Wiley & Sons, 1997.
- [90] W. Kleppmann, Versuchsplanung, Produkte und Prozesse optimieren, Aalen: Hanser Verlag, 2013.