

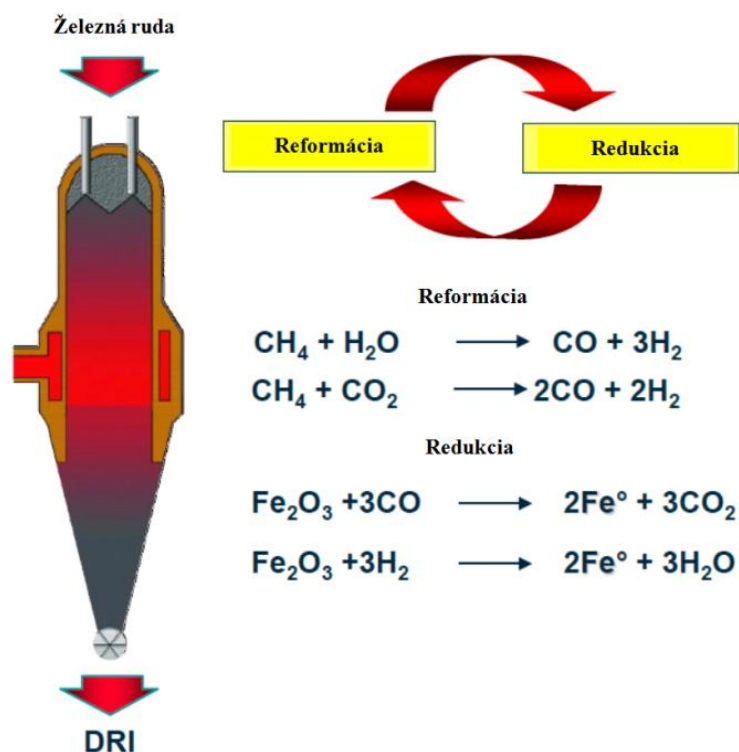
Softvérová simulácia redukčných procesov za použitia vodíka (SIM H2)

Úvod

Midrex technológia, ako najviac používaná metóda priamej redukcie, má potenciál využívania redukčných zložiek syntéznych plynov na báze CO a H₂ v celom intervale. Z toho dôvodu si riešitelia APVV projektu zvolili tento agregát pre tvorbu simulácie redukcie železonosnej vsádzky vodíkom a analýzu vplyvov vstupných parametrov na procesné ukazovatele. Výpočtové simulácie všeobecne predstavujú silný nástroj pre predikcie správania sa systémov a v prípade metalurgických procesov sú matematické modely majoritne založené na prebiehajúcich reakčných a transportných javoch. Modelovanie priamej redukcie (DR) oxidov železa je náročné kvôli dynamickým charakteristikám reakcií plyn-pevná látka. Tuhá vsádzka prechádza štruktúrnymi a chemickými transformáciami, čím sa menia lokálne fyzikálne vlastnosti a komplikuje matematickú formuláciu systému. V dôsledku toho sa k modelovaniu pristupuje s rôznymi úrovňami zjednodušenia, pričom sa zahŕňajú rôzne matematické modely, redukčné kroky a zohľadnenie fyzikálno-chemických javov.

Popis procesu Midrex pre účely simulácie

Proces prebieha v šachtovej peci, kde pelety alebo hrudky železnej rudy vstupujú zo zásobníka cez násypku do hornej časti reaktora (predohrievacia zóna) a kontinuálne klesajú gravitáciou, zatiaľ čo horúce (cca 950°C) redukčné plyny (CO a H₂) vstupujú do takzvanej redukčnej zóny v spodnom horizonte valcovej časti, kde je osadený prstencový rozvádzač a trysky, **Obr.1**. Častice vsádzky sú ohrievané a redukované horúcim prichádzajúcim plynom. Prúd plynu teda prenáša teplo konvekciou na častice, čo znamená, že častice sa zahrievajú, zatiaľ čo plyn sa ochladzuje. Zhutnená vrstva a najmä jednotlivé častice vytvárajú pokles tlaku pre prúdenie. Naopak, prúdenie plynu vyvíja na častice odporovú silu. Termodynamicky je redukcia oxidu železa s CO exotermická, zatiaľ čo s vodíkom je endotermická. Prechody v tuhej fáze hematitu, magnetitu, wustitu a železa sa medzi týmito dvoma redukčnými plynmi líšia so zmenou teploty.



Obr. 1 Technologická schéma procesu Midrex

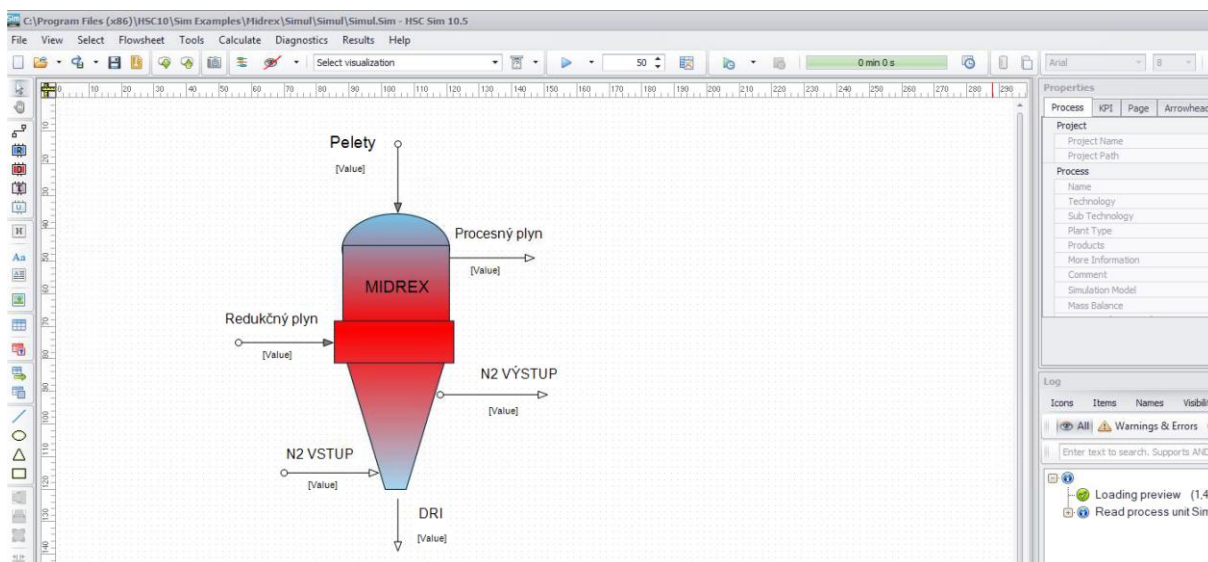
V skutočnosti, napriek nepriaznivým termodynamickým faktorom, vysoká difuzivita vodíka vo vzťahu k CO prevláda pri určovaní reakčnej kinetiky. Rozsiahly výskum v laboratórnom meradle však ukázal, že kinetické správanie priamej redukcie s použitím H_2 sa výrazne líši od použitia zmesi H_2/CO . Štúdie ukázali, že redukčná rýchlosť s použitím čistého vodíka je podstatne vyššia ako s použitím čistého CO, takže dochádza k zvýšenej reakčnej rýchlosti s vyšším pomerom $\text{H}_2:\text{CO}$ vo vstupnom prúde. Pod redukčnou zónou je zóna chladenia vyredukovaného DRI pomocou inertného dusíka. Chladenie prebieha v závislosti od požadovaného produktu (CDRI, HDRI, HBI) s rôznou intenzitou keďže výstupné produkty môžu byť buď horúce (600°C) alebo schladzované na teplotu cca 60°C .

Charakteristika simulačného modulu HSC Sim všeobecne

Pre našu simuláciu bol zvolený modul HSC Sim, ktorý je súčasťou termodynamického programu HSC Chemistry 10. Tento modul slúži na dynamické a stacionárne modelovanie chemických a metalurgických procesov s dôrazom na materiálovú a energetickú bilanciu. Modul je plne integrovaný s databázou HSC (priamo využíva termochemické dáta ako sú entalpia, Gibbsová energia, fázové prechody, rovnovážne konštanty, atď.), a okrem rovnovážnych výpočtov umožňuje modelovať reakcie založené na kinetike a mechanizmoch reakcie. Pomocou dynamickej simulácie je možné modelovať správanie systémov v čase — napr. reakčné kinetiky, zmeny teplôt, zloženia, prietokov.

Popis vlastného simulačného modelu Midrex

Simulácia predstavuje šachový typ reaktora Midrex, zostrojeného ako statický model (Static Distribution Unit) s príslušnými vstupno -výstupnými tokmi (Streams), **Obr.2**. V rámci modelu môžu byť menené parametre vsádzky (chemické zloženie a prietochné množstvá kovonosnej vsádzky a redukčného plynu, ako aj teplotné podmienky. Pre daný model bolo potrebné, okrem návrhu geometrie agregátu, zadefinovanie vstupných parametrov (chemické zloženie kovonosnej vsádzky a redukovača, množstvá vstupov aj charakteristiku požadovaných výstupov ako je zloženie DRI a výstupného procesného plynu. Vstupno-výstupné karty modulu sú vzájomne prepojené a proces výpočtov je založený na termodynamických rovnováhach systému. **Obr.3** ukazuje prostredie programu pri editovaní jednotlivých kariet pre materiálovo-teplnú bilanciu predmetnej simulácie Midrex.



Obr. 2 Okno programu zobrazujúce model pece Midrex

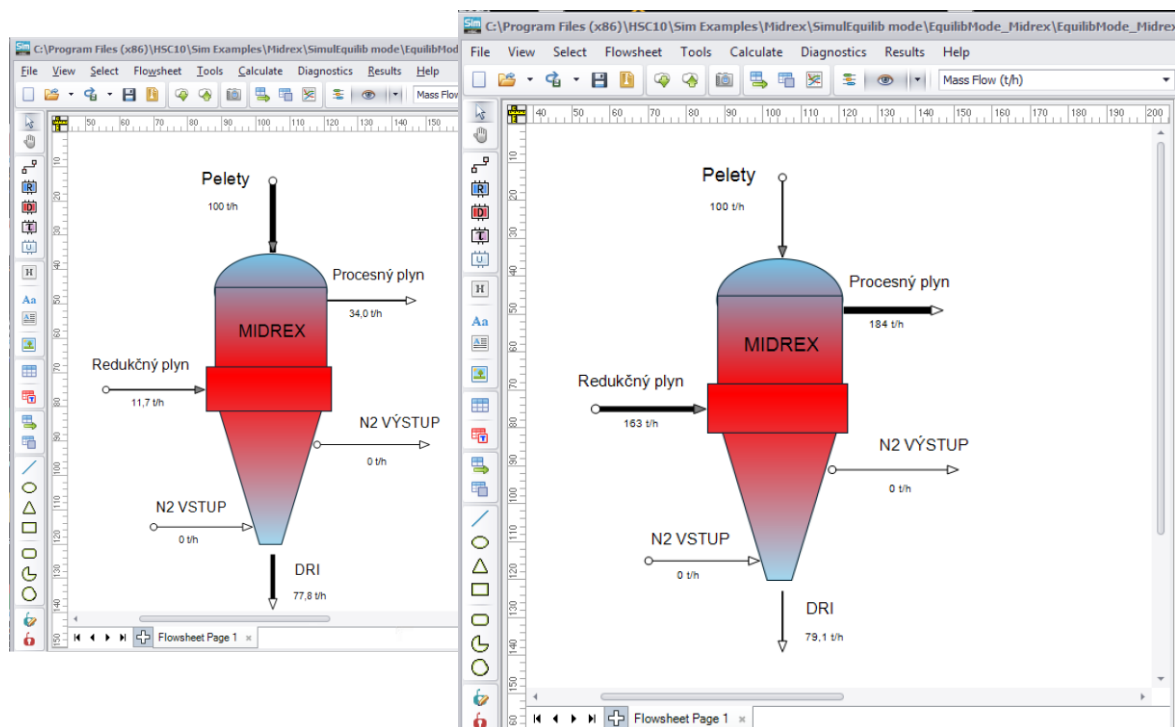
Output streams	Value	Units	Flow Rates	Thermal E Flow To
Total Gas Flow	0,00	Nm ³ /h		
Total Condensed Flow	111,73	t/h	111 725,52	132 112,15
			7 078,13	78 126,13
DRI	77,76	t/h		
Temperature	930,00	°C		
Pressure	1,30	bar		
Total	100,00	wt-%	77 757,50	12 15 1 261,55
				14 686,91
FeO	37,15		28 890,01	5,07 402,12
Fe	56,99		44 317,11	5,64 793,57
Fe3O4	1,35		1 050,38	0,20 4,54
Fe3C	0,00		0,00	0,00 0,00
SiO2	3,22		2 500,00	0,96 41,61
Al2O3	0,26		200,00	0,05 1,96
CaO	0,39		300,00	0,09 5,35
MgO	0,64		500,00	0,14 12,41
				149,45
Procesný plyn	33,97	t/h		
Temperature	930,00	°C		
Pressure	1,30	bar		
Total	100,00	wt-%	33 968,02	132 100,00
				5 816,58
				63 441,22
H2O(g)	26,27		8 923,03	100 527,04
				4 426,37
H2O(l)	73,73		25 044,99	31 572,96
				1 390,21
CO(g)	0,00		0,00	0,00 0,00
CO2(g)	0,00		0,00	0,00 0,00

INPUT ELEMENTS	kg/h	kmol/h
Al	105,85	3,92
C	0,00	0,00
Ca	214,41	5,35
Fe	87 333,30	1 209,80
H	11 725,32	11 633,15

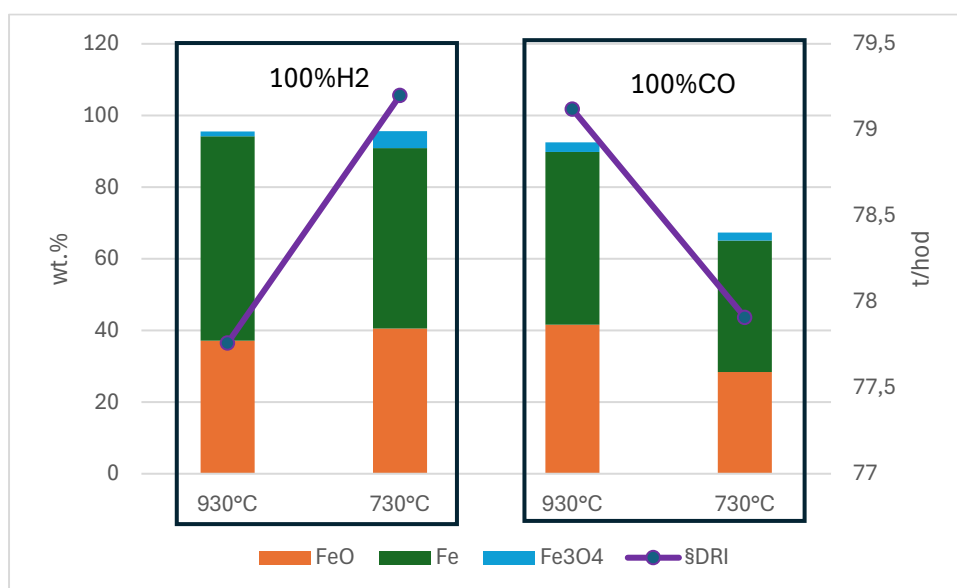
Obr. 3 Okno programu znázorňujúce výpočtové dáta a karty pre materiálovo-tepelnú bilanciú

Na základe zostrojeného modelu a simulácie v HSC Sim je možné analyzovať rôzne vplyvy na výrobné parametre procesu a kvalitatívne ukazovatele produktu/-ov. Získané dáta sa dajú exportovať a spracovávať aj v externej aplikácii alebo priamo v prostredí HSC, pričom každé má svoje obmedzenia. Model je možné rozširovať na tzv. dynamický, ktorý popisuje bilanciú v závislosti od času, pričom môžu byť implementované aj konkrétne kinetické parametre priebehov dejov. **Obr. 4** demonštruje možnosti porovnávania výstupov priamo v prostredí HSC Sim pre dva extrémne redukčných plynov. **Obr. 5** je výsledkom analýzy získaných dát

porovnávania redukcie vodíkom alebo oxidom uhoľnatým pri dvoch izotermách (930°C a 730°C).



Obr. 4 Efekt redukcie peliet pri H₂:CO (90:10) (vľavo) a 10:90 (vpravo)



Obr. 5 Vplyv teploty a typu redukovaďla na redukciu a produkciu DRI