

1. Inleiding

Direkte reduksie in komposiet korrels is 'n komplekse heterogene reaksie sisteem. Hitteoordrag en massaoordrag moet beide deeglik in berekening gebring word. Die ontwikkeling van temperatuur, druk en samestellings gradiënte binne-in 'n mengsel van erts en een of ander reduseermiddel (steenkool of kooks) sal in die studie aangetoon word en in ag geneem word in 'n wiskundige model wat dan die situasie in wiskundige terme beskryf.

Die doel van die studie is om die kinetika van die reaksiesisteem te ondersoek en dan redelik akkuraat te kan beskryf.

In die praktyk gaan dit om 'n gewenste produk wat genoegsaam gemetalliseer is, teen die hoogste praktiese produksie tempo te lewer. Om die produktiwiteit te kan optimeer of dit te kan voorspel en beheer, moet daar in besonder na die kinetika van so 'n sisteem gekyk word. Twee dinge moet bepaal word:

- 1) Die belangrikste faktore wat die produksietempo en aard van die produk beïnvloed moet geïdentifiseer word
- 2) Die produksietempo en produksamestelling moet bereken kan word.
Daarvoor is 'n wiskundige vergelyking of model nodig.

In die studie is eksperimentele en modelleringswerk gedoen om van die belangrikste faktore aan te wys. Die model wat as hulpmiddel gedien het in die interpretasie van die eksperimentele resultate kan eindelik ook gebruik word in die praktyk om die gedrag van so 'n reaksiesisteem te kan voorspel of beheer.

Die heel eerste vraag wat opgekom het was: Wat gaan binne-in so 'n korrel aan?

Van die korrels wat gereageer was, is middeldeer gesny en die snitoppervlak voorberei vir mikroskopiese ondersoek. Daar is waargeneem dat daar na verskillende reaksietye 'n samestellingsgradiënt binne-in die korrels ontstaan het (paragraaf 5.5). Daar is aanvanklik vermoed dat dit die gevolg was van 'n temperatuurgradiënt binne-in 'n korrel. 'n Ander reeks toetse is gedoen waarin 'n heelwat groter "korrel" gebruik is. Dieselfde mengsel as wat in korrels gebruik is, is in 'n silinder met diameter 60 mm en hoogte 120 mm gevorm. Baie groot temperatuurgradiënte in die silinders gemeet. Die geometrie van die silinders verskil egter heelwat van die korrels. Om die resultate van die twee stelle eksperimente in verband te bring is 'n wiskundige model nodig.

Ten eerste moes al die beginsels wat ter sprake is nagevors word en korrelasies en vergelykings vir verskillende termodinamiese en kinetiese verbande nagespeur word. Massa en energiebalanse moes opgestel word en numeries opgelos word. Hierdie teoretiese gedeelte behels 'n baie groot deel van die verhandeling (Hoofstuk 2 tot 4)

Om 'n model te kan gebruik moes daar eers aangetoon word dat dit wel 'n betroubare voorstelling kan gee van die werklikheid.

Met 'n redelik betroubare model kan daar dan resultate "gegenereer" word wat kan dien as aanduiding van die aard van die kinetika is die betrokke reaksiesisteem.



In hoofstuk 5 en 6 word daar gepoog om die volgende aan te toon:

- Die wiskundige model is 'n goeie weergawe van die werklikheid
- Die reaktiwiteit van die reduseermiddel is 'n belangrike faktor
- Die tempo van hitteoordrag na 'n sferiese korrel is die belangrikste faktor wat die algehele reaksietempo bepaal
- Die tempo van hitteoordrag binne 'n korrel is minder belangrik.
- Die geometrie van komposiet (grootte van korrels of geometriese vorm van komposiet) is van belang. Hoe groter die verhouding van volume tot blootgestelde area is, hoe groter rol speel die tempo van hitteoordrag in die komposiet
- Vlugstowwe neem nie beduidende deel aan chemiese reaksies in die sferiese korrels nie.
- Al die swaer wat in die toevoermateriale gebruik is eindig in die produk

Vir die normale korrel blyk dit uit die verhandeling dat hitteoordrag na die korrel toe die tempobepalende stap is. Die tempo van die Boudouard reaksie speel egter ook 'n beduidende rol. Die ontstaan van 'n konsentrasie profiel in die korrels word toegeskryf aan die ontwikkeling van druk in korrels aangesien die temperatuurgradiënt in die korrels te klein is om dit te kon veroorsaak.

1.1 Titel van verhandeling

Om aan te dui waaroor die verhandeling gaan word die terme waaruit die titel saamgestel is kortliks toegelig:

Tempo:

Dit is 'n kinetiese studie. Die belang van tempo in die bedryf is dat dit die verband tussen produksietempo en koste per eenheidsprodukhoeveelheid gee

Direkte Reduksie:

Dit is waar 'n metaliese produk vanaf 'n erts geproduseer word. Gewoonlik word met direkte reduksie bedoel dat 'n vaste reduseermiddel en 'n oksied in direkte kontak met mekaar is. Alhoewel die proses eintlik deur middel van gas tussenprodukte plaasvind verskil dit van ander reduksie prosesse waar die reduseermiddel as 'n gas van buite af toegevoer word.

Komposiet korrels:

Die materiaal wat gereduseer word (erts) en die reduseermiddel is beide in 'n fyn vorm (-500 mikrometer) 'n Metode wat gebruik word om sulke materiaal meer hanteerbaar te maak is deur dit te verkorrel. Wanneer die redusermiddel en die erts gemeng en dan verkorrel word, is die korrels 'n komposiet van reduseermiddel en erts. Waar die reduseermiddel 'n koolstof bron is vind vergassing van die koolstof plaas. Die CO gas reduseer dan die erts. Beide reaksies vind dus binne in die korrel plaas. Al wat toegevoeg moet word is energie.



1.2 Oorsprong van die studie

In 1994 is 'n projek geloods by YSKOR proefaanleg om 'n Fastmet tipe oondjie te bou en die proses te toets op rou materiale van YSKOR. Omdat dit 'n “nuwe” proses is, het die behoefte ontstaan om die proses te wiskundig te modelleer. Die proefskaaalse oond was egter eers teen einde 1995 voltooi en met die eerste proeflopies is meganiese probleme ondervind wat die proefnemings eindelijk tot stilstand gebring het. Geen verder fondse was na 1997 deur YSKOR begroot vir werk op die proses nie. Die studie het dus wat YSKOR betref gevaar geloop om in die lug te bly hang. Die benadering is dus verander na 'n studie wat nie op spesifieke rou materiale of die Fastmet tipe oondjie toegespits is nie maar meer op die teoretiese aspekte van direkte reduksie in die vorm waarin die materiaal die soort oond toegevoer word naamlik komposiet korrels. Dit is ook moontlik om met die wiskundige ontledings en ontwikkelings wat gedoen is, die model te verander om van toepassing te wies in ander nuwe ystervervaardigingsprosesse wat deur YSKOR beoog word.

1.3 Direkte reduksie

Direkte reduksie kan oor die algemeen gedefinieer word as enige proses waarin daar metaliese yster vervaardig word vanaf ystererts of enige ysteroksied by temperature laer as die smeltpunt van enige van die materiale betrokke.

'n Nouer definisie is alle proses waar die koolstof en ystererts of oksied met mekaar gemeng word en verhit word sodat die koolstofvergassing en reduksiereaksie in dieselfde reaktor plaasvind. Dit is wat in die studie bedoel word.

Die produk word gewoonlik genoem direk gereduseerde yster (DRY) of in Engels: *direct reduced iron* (DRI) Vroër was die produk sponsyster genoem vanweë die poreuse geaardheid daarvan.

DRY het veral die volgende waardevolle eienskappe

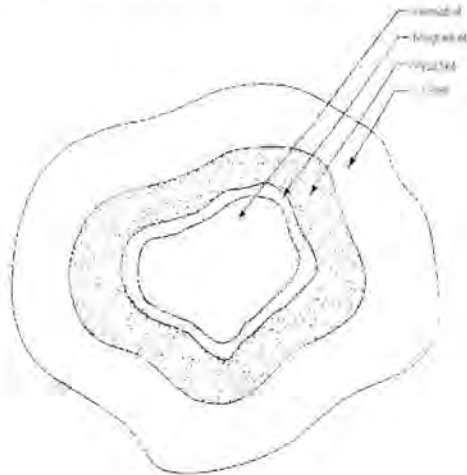
1. Dit is relatief vry van elemente soos koper, sink, tin, chroom, molibdeen en wolfram wat algemeen in skroot aangetref word.
2. Dit het 'n baie lae swaelinhoud
3. Laegraadse brandstowwe wat ongeskik is vir die konvensionele ystervervaardiging kan gebruik word
4. DRY is meer geskik vir sekere spesiale metallurgiese toepassings soos die presipitasie van koper uit oplossing.

Hoë pryse en onbesikbaarheid van geskikte skroot maak die gebruik van DRY 'n aangewese toevoermateriaal tot staalvervaardiging.

Gasreduksie van of poreuse ertskorrels of stukerts is al in besonderhede ontleed en deeglik en eenduidig met wiskundige modelle beskryf. Die meganismes wat betrokke is word goed verstaan en tog word daar vandag nog verdere navorsing daarop gedoen. Die handboek van Szekely et al (1976) gee 'n goeie uiteensetting van al die elemente van gas-vastestof reaksies in die algemeen.

Die kinetika van reduksie van ysteroksiedes is gewoonlik 'n geval van stapsgewyse reduksie van die erts na oksiedes met al minder suurstof. Die tempo word in meeste gevalle beperk deur die diffusietempo van waterstof of koolstofmonoksied deur die produklae wat vorm. 'n Tipiese voorstelling van hoe 'n ertspartikel lyk na dit gedeeltelik gereduseer is word getoon in Figuur 1-1 (Riggion, 1956) Hoe kleiner die ertspartikels word hoe minder belangrik word die tempo van diffusie van die gas. Op 'n sekere punt word die chemiese reduksietempo beperkend op die algehele tempo.

Figuur 1-1 Gedeeltelik gereduseerde ertspartikel



In die geval waar die gas wat vir die reduksie moet sorg reg teen die ertspartikel geproduseer word, is die effek van diffusie nog veel minder. Die tempo's van die verskillende reduksiestappe asook die tempo van vergassing raak dus van belang.

1.4 Ander modelle

Verskeie studies (Rao, 1971; Fruehan, 1977; Sharma, 1993 ; Seaton et al, 1983; Donskoi et al, 1996 ;Sun and Lu, 1996) is al gedoen op sisteme waar een of ander ystererts gemeng is met een of ander koolstofbevatende reduseermiddel.

Verskeie meganismes kan 'n rol speel in die proses. Chemiese reaksies op die vastestofoppervlakke, massaordragtempo's van die tussenprodukke, vorming van produkke in die reduksie van die ystererts en die verskillende meganismes van hitteoordrag is alles van belang. Dan is daar ook studies (Fruehan,1977; Seaton et al, 1983) wat aantoon dat verskillende onsuiverhede ook 'n drastiese effek op die reduksietempo's kan hê.

'n Groot variasie in die sogenaamde skynbare aktiveringsenergie van direkte reduksie word gerapporteer. Die waardes varieer van 56kJ to 335kJ. Daar is ook gevind dat die aktiveringsenergie ook verander met verloop van die reaksie. Die effek van partikelgrootte en temperatuur blyk ook duidelik uit die verskillende studies wat gedoen is. Van die vroegste studies is die gedoen deur Fruehan (1977). Hy het onder andere toe reeds uitgewys dat die Boudouard reaksie se tempo 'n belangrike rol speel in die algehele tempo.

Die waardevolste studie is waarskynlik die onlangse navorsing van Sun en Lu (1996). Deur gebruik te maak van 'n rigiede nie-isotermiese en nie-isobariese wiskundige model en 'n eenvoudige goed ontwerpte eksperimentele opstelling, is veel duidelikheid verkry oor die aard van dit wat in so 'n komplekse sisteem aangaan. Hulle het naamlik temperature so wel as gasdrukke in 'n komposiet mengsel op verskillende posisies vanaf 'n verhitte kant van die mengsel gemeet.

In ons departement is ook reeds studie van soortgelyke aard gedoen deur Van Niekerk et al (1994). In daardie geval was die kinetiese model gebaseer op die aanname dat hitteoordrag nie 'n rol speel nie en dat toestande binne so 'n korrel as homogeen benader kan word.

Die huidige studie sluit in 'n mate aan daarby deurdat dit probeer om die effek van hitteoordrag en nie-homogeniteit in ag te neem. Die beskrywing van die chemiese reaksietempo's van die reduksie reaksies in die studie is soortgelyk aan die van Van Niekerk et al (1994). Terugwaartse reaksies word egter ook in ag geneem. Alhoewel die oksidasie reaksies nie altyd van belang is nie, sorg dit in die oplossing van die vergelykings vir berekeningstabilditeit.



1.5 Agtergrond oor die FASTMET Proses

Die proses word in meer besonderhede hier bespreek omdat die studie 'n direkte toepassing in die proses kan vind.

1.5.1 Proses beskrywing

'n Beskrywing van die proses word gegee deur Lepinsky in verskeie artikels. Die FASTMET proses is 'n ystervervaardigingsproses. Die binder, ystererts en reduseermiddel word gemeng en verkorrel. Daarna word dit gedroog by ongeveer 120°C, en in die roterende herdoond ingevoer. Die korrels word in 'n enkellaag of 'n dubbellaag gelaai. Die grootte van die korrels is nie groter as 20mm in diameter nie. In die proses word die korrels tot tussen 1250°C en 1350°C verhit en die ysteroksiedes in die korrels word gereduseer. Die retensietyd van 6 tot 18 minute is baie kort in vergelyking met die 4 tot 18 ure van ander direkte reduksie prosesse. Die hoër reaksietempo word toegeskryf aan die hoë reduksietemperatuur.

Die direk gereduseerde yster (DRY) word kontinu onttrek met 'n skroefvoerder. Hiervandaan kan dit warm na staalsmeltery gaan of dit kan in stikstof afgekoel of warm gebrikketeer word.

'n Wye verskeidenheid van toevoermateriale kan gebruik word in die proses bv. magnetiet, hematiet, ilmeniet en boogoondstof. Die materiaal moet egter verkieslik fyn wees (ongeveer 80% - 44µm) en die ganggesteente inhoud moet so laag moontlik wees om die afsmeltkoste in die staalwerke te beperk. Verskeie koolstofreduseermiddels kan gebruik word. Die asinhoud moet egter om dieselfde rede laag wees en die vastekoolstofinhoud verkieslik hoër as 65%. Die swaelinhoud moet so laag moontlik wees. (<1%)

Hitte word in die oond verskaf deur direk gevuurde branders. Poeiersteenoolbranders kan hier gebruik word. Die asinhoud van die poeiersteenool behoort laer as 20% en die vlugtige inhoud hoër as 30% te wees.

Die gassamestellings, en temperature in die oond kan gemonitor word. Deur die hoeveelhede van lug en brandstof toevoer vir elke brander te verstel kan die gassamestelling en temperatuur in elke sone vasgelê word.

Die beskrywing van die demonstrasieaanleg by Kakogawa gee duideliker aanduiding van die proses. (paragraaf 1.5.8)

1.5.2 Voordele van FASTMET Proses

- Dit is 'n eenvoudige en ekonomiese alternatief om direkgereduseerde yster te produseer.
- Die lae retensietyd laat goeie beheer toe. Tydige verandering van bedryfsparameters is dus moontlik. Dit minimeer verliese.
- Hoë ysteropbrengs is moontlik omdat die fynstof hersirkuleerbaar is.
- Hoë % metallisasie kan verkry word (tot 94%)
- FASTMET aanlegte kan naasliggend aan staalvervaardigingsaanlegte gebou word waar die gebruik van warm DRY energiebesparing kan bewerk.
- As 'n FASTMET aanleg naasliggende aan bestaande verkorrelingsaanlae gebou word kan daar ook op kapitaalkoste bespaar word deur van die bestaande infrastruktuur gebruik te maak.
- Ysterertse wat in prosesse soos die hoogood moeilik reduseerbaar is kan suksesvol in die proses gebruik word.
- Bestaande beproefde toerusting word gebruik.
- Die proses het 'n lae impak op die omgewing.

1.5.3 Nadele van die proses

- Die swael wat in die steenkool is beland in die produk. Vir gebruik as voermateriaal in staalvervaardiging moet die swaelinhoud binne perke wees. Die swaelinhoud van die reduseermiddel wat gebruik word moet dus relatief laag wees.
- Die ganggesteentes beland in die produk. Daarom moet die as van die steenkool wat gebruik word so laag moontlik wees.

1.5.4 Voorgangers van die FASTMET proses.

Die roterende herdoond is gebruik in 1960 deur die Midland Ross Corp. (Later Midrex) in die ontwikkeling van die sg. "Heat Fast Direct Reduction Process" (Lepinski, 1993) Die proses was uiteindelik opgeskaal na 2 ton per dag. Daar het dit egter gestop weens die gelyktydige ontwikkeling van 'n ander gasgebaseerde proses wat 'n laer swaelinhoud en laer bedryfskoste tot gevolg gehad het.

Van 1967 tot 1968 is soortgelyke toerusting gebruik maar om oksiedkorrels i.p.v. DRY te vervaardig. Magnetiet en binder is gemeng en geoksideer om hematietoksied korrels te vorm. Die aanleg is egter toegemaak weens sekere tegniese probleme. Die tegniese probleme wat hier waargeneem is kon dus in die ontwikkeling van die FASTMET proses vooraf in ag geneem word.



1.5.5 Opskaling

Die FASTMET proses maak gebruik van konvensionele toerusting wat betref materiaalhantering en voorbereiding, afgashantering, waterbehandeling, en prosesbeheer. Die roterende herdoond word orals in die metallurgiese bedryf gebruik, veral vir hittebehandeling. Opskaling van die proses is tweedimensioneel. Dit kan aan die hand van die volgende paar vergelykings aangetoon word.

$$\text{Produksietempo} = \frac{\text{Bedarea} \times \text{Lading}}{\text{Retensietyd}}$$

Produksietempo = kilogram DRI per uur geproduseer

Lading = massa DRI afgeskep per eenheidsarea (kilogram per vierkante meter)

Bedarea = Totale area van herd wat deur korrels beslaan word (vierkante meter)

Retensietyd = gemiddelde tyd wat korrels in oond bly om voldoende te reageer (uur)

Vir die doel van opskaling word die Lading en Retensietyd terme gekombineer as die volgende:

$$\text{Produktiwiteit} = \frac{\text{Lading}}{\text{Retensietyd}}$$

Produktiwiteit word dus uitgedruk in terme van $\text{kg/h} \cdot \text{m}^2$ en is 'n funksie van hoe die erts gelaai word en die retensietyd. Die retensietyd word natuurlik bepaal vir wat nodig is om 'n gegewe vlak van metallisasie te verkry.

Vir 'n gegewe temperatuurbehandeling en erts kan die produksietempo dus bepaal word vir oonde van verskillende groottes.

$$\text{Produksietempo} = \text{Produktiwiteit} \times \text{Bedarea}$$

1.5.6 Bedryf

Die bedryfsparameters vir 'n volskaal FASTMET aanleg word in **Tabel 1-1** gegee. Volgens Lepinsky (1993) sal vir 'n 450 000 ton per jaar FASTMET aanleg die volgende nodig wees per ton DRY.

Tabel 1-1 Bedryfsparameters vir RHO (per ton DRY geproduseer) (Lepinsky, 1991)	
Droë ystererts-konsentraat	1.26 ton
Droë reduseermiddel	0.34 ton
Natuurlike gas	2.7 GJ
Binder	20 kg
Elektrisiteit	60 kWh
Water	1 m ³
Instandhouding en onderdele	\$ 5.00
Arbeid	0.2 manure

Bogenoemde syfers is bereken vir die gebruik van 'n magnetieterts met 70% Fe en 'n reduseermiddel wat 75% vaste koolstof bevat.

1.5.7 Nuutste oor Midrex se Fastmet proses

Op 13 Augustus 1998 verskyn 'n artikel in Metal Bulletin (Balacerek, 1998) Daarvolgens beplan Midrex hul eerste kommersiële volskaal Fastmet aanleg. Midrex het aan verskeie geïntegreerde staalwerke aangebied om 'n Fastmet proses op te rig en te bedryf om yster te herwin uit afvalstowwe van die werke. Die noodsaak van afvalstofherwinning sal waarskynlik kan lei tot die oprigting van die eerste volskaal Fastmet aanleg. Midrex glo dat 'n suksesvolle afvalstof herwinningsaanleg van 150000 tot 500000 kort ton yster per jaar sal lei tot aanvaarding van die steenkoolgebaseerde proses vir algemene gebruik in die staalvervaardiging vir verskaffing van yster eenhede. Midrex glo dat die Fastmet proses in staat is om yster te lewer van die gehalte van hoogoonde maar met 'n baie kleiner kapitaaluitset.

Midrex en Cobe Steel het 'n demonstrasie aanleg wat 1 - 2.5 ton per uur lewer (Balacerek, 1998) vir die afgelope twee jaar by Kakogawa staalwerke in Japan bedryf.

Van 1991 af is 'n proses simulator bedryf by Midrex se tegniese sentrum by Charlotte in Noord Carolina.

Dit blyk dus dat ten spyte van sekere probleme die proses wel tot 'n volskaal aanvaarde proses sal ontwikkel.

1.5.8 FASTMET Demonstrasieaanleg by Kakogawa

Hoffman en Harada (1997) doen verslag oor die aanleg. Die aanleg is voltooi in 1995. Korrels met diameters van 9 tot 20 mm word gevoer teen 4 tot 5 ton per uur om 1.5 tot 2 ton per uur DRY te lewer. Die metallisasie was gewoonlik hoër as 85 persent en die koolstof inhoud 3 tot 4 persent. Die oondtemperatuur wissel tussen 1300°C en 1400°C Die komponente van die aanleg sluit in:

- (1) Grondstofhantering
- (2) Verkorreling
- (3) Korreldroging
- (4) Roterende herdoond
- (5) Afgashantering
- (6) Produkhantering
- (7) Warm brikkettering
- (8) Brandstofgasmenging

Aanvanklik is magnetiet gebruik maar later hematiet. Die chemiese analises van die materiale word gegee in **Tabel 1-2** en **Tabel 1-3** Die reduseermiddel word eers verpoeier tot 80% -75 um. Daarna word dit vermeng met erts en binder en korrels word gevorm. Die korrels word gedroog tot 0.5% voginhoud. Ondergrootte of oorgrootte korrels word teruggevoer na die mingerstap toe.

Tabel 1-2 Tipiese chemiese samestelling van ertse gebruik in Midrex se Fastmet toets (persentasie) (Hoffman en Harada, 1997)

Ertse	T.Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	P	S	Na ₂ O +K ₂ O	TiO ₂	FeO	CaO	MgO	MnO	VV
Magnetiet	69.3	1.69	0.44	0.022	0.023	0.08	0.11	29.85	0.49	0.45	0.08	0.35
Hematiet	67.61	1.06	0.51	0.034	0.022	N/B	0.07	0.14	0.14	0.06	0.31	N/B

VV: vlugverlies

NB: nie beskikbaar

Tabel 1-3 Tipiese chemiese samestelling van steenkool gebruik in Fastmet toets

C	H	N	O	Vog	As	VM	Swael	Vaste C
80.9	4.2	0.9	4.5	8.3	9.3	18.8	0.23	71.9

VM: vlugstowwe

Die roterende herdoond het 'n buitenediameter van 8.7 m en binnenediameter van 5.8 m Die aktiewe herdwidte is 1.25 m. Die oond het vier sones waar elkeen deur 'n gasbrander verhit word. Die gasmengsel is 'n vaste verhouding kooksoondgas

en LP gas. Die droë korrels word kontinuu gevoer. Na voltooiing van metallisasie beweeg die korrels oor 'n afkoelplaat wat die korrels vinnig na onder 1000°C afkoel. 'n Waterverkoelde skroef onttrek die materiaal uit die oond. Die korrels word in N₂ gevulde houers geplaas en vervoer na waar dit warm gebriketteer word. Die afgas word afgekoel en 'n deel van die hitte word gebruik om die toevoerlug na die branders te verhit tot 470°C. Die afgas word volkome afgekoel en skoongemaak in 'n direkte waterkontak gasskropper.

Die volgende punte van belang het uit die toetse na vore gekom:

- Die aanleg kan kontinuu bedryf word.
- Die aantal produksie ure oor 'n tydperk van 6 maande was 2100 uur. Dit beteken 'n benutting van ongeveer 50 %
- In daardie tyd is 3550 ton DRY vervaardig
- Negentig persent metallisasie is gereeld verkry teen produksietempo's van 1.5 tot 2.2 ton per uur
- Die swaai in die gedroogde korrels is gedeeltelik verwyder in die oond sodat die produk minder as 0.1% bevat.
- Brikettering is suksesvol toegepas met digtheid wat wissel van 4.2 tot 5 g/cm³.

1.5.9 Voorgestelde Vooraf toetswerk

Hier word verwys na sekere laboratoriumskaaltoetse, deur Midrex voorgestel, om sekere parameters vas te stel voordat met produksie of toetswerk op proefaanleg skaal voortgegaan kan word. Dit behels die uitvoer van enkelkorreltoetse in 'n elektriese buisoond waar die volgende gevarieer word:

- Reduksietyd, temperatuur en oondatmosfeer
- Ystererts tipe en grootteverspreiding
- Reduseermiddel tipe, grootte verspreiding en hoeveelheid bygevoeg
- Binder tipe en hoeveelheid bygevoeg
- Korrelgrootte

Sommige van die aspekte is aangeroei in die eksperimentele werk wat vir die doel van die studie uitgevoer is. Aangesien die 'n fundamentele studie is en nie 'n ondersoek waar optimum bedryfsparameters gesoek word nie, is volledige reekse toetse in al bogenoemde aspekte nie uitgevoer nie.

YSKOR het in 1994 monster na Midrex gestuur vir toetsing in hulle apparate. Die resultaat van die toetse was egter teleurstellend omdat die korrels wat oorgestuur is amper almal tydens die toetse gedisintegreer het. Dit word toegeskryf aan vog wat die korrels moontlik tydens vervoer soontoe opgetel het.



1.6 Ten slotte

Behalwe vir die werk gedoen deur Sun en Lu (1996) en Donskoi (1996) bestaan daar blykbaar geen fundamentele modelle wat so 'n roterende herdoond verhittingsproses beskryf nie. Die huidige studie behels wel nie die modellering van die herdoond as sulks nie maar die resultaat is van toepassing in die suksesvolle modellering daarvan. Alhoewel die studie spruit uit 'n beskouing van die sg Fastmet proses is dit so dat die model wat ek ontwikkel het eintlik net enkelkorrels behels en nie afhanklik is van die tipe reaktor waar dit in plaasvind nie. Die manier waarop die korrels verhit word is ook net by benadering soos in 'n Fastmet tipe proses. Die aspek word verder bespreek onder hitteoordrag in paragraaf 3.4

2. Wiskundige Modelling

Eerstens moet daar uiteengesit word hoe daar te werk gegaan is in die ontwikkeling van die model. Dit behels die volgende twee hoofstukke. Hierdie hoofstuk dien alleenlik as inleiding en uiteensetting. Soos in die inleiding van hoofstuk 1 gemeld is dit nodig om 'n berekeningsmetode of model daar te stel wat is werktuig kan dien in voorspelling en beheer van metallurgiese prosesse wat van die reaksiesisteme gebruik maak.

2.1 Ontwikkelingsproses

In die ontwikkeling van 'n model moet daar deur sekere stappe gegaan word.

- a) **Probleemdefinisie:** Die vasstel van wat is die tekort aan inligting of wiskundige gereedskap wat benodig word. Dit is, 'n metode om, met 'n gegewe mengsel van fyn ystererts en steenkool in 'n korrel van sekere grootte wat dan aan 'n hoë temperatuur (1300°C) blootgestel word die verband tussen die graad van reduksie en tydsverloop te kry. Die funksie kan dan in die simulatie van 'n proses wat van die korrels gebruik maak, ingewerk word om sodoende beplanning en beheer van die proses op industriële skaal te kan uitvoer. Daar moet in dié stadium ook vasgestel word wat die parameters is wat van belang is. Op dié punt was dit ook belangrik om te kies wat die hoof uitgangspunt is in die opstel van die model.
- b) **Wiskundige modellering:** Die metallurgiese beginsels van die prosesse wat in die sisteem plaasvind moet in die vorm van differensiaal en ander empiriese en semi-empiriese vergelykings gestel word. Motivering van die gebruik van die vergelykings en sub-modelle is ook belangrik. Die werk hieroor is gedoen in hoofstuk 3.
- c) **Organisasie van vergelykings:** Die differensiaalvergelykings en ander vergelykings moet in 'n vorm geskryf word wat moontlik is om algebraïes of numeries op te los. Hierdie werk word in hoofstuk 4 bespreek.
- d) **Berekening:** Die toevoer van parameters, die oplos van vergelykings en die rapportering van berekeningsresultate word in 'n rekenaarprogram georganiseer. Die wyse waarop programmering word in die bylae gegee.
- e) **Interpretasie van resultate:** Deur die verskillende parameters te verander word die sensitiwiteit van die model vir variasie in sekere parameters bepaal. Sekere vereenvoudigings in die model kan hierdeur geregtig word of verdere vereenvoudigings kan aangebring word. Sekere leemtes kan ook hieruit na vore kom. Die resultate van die model moet eers ge-evalueer word aan die hand van eksperimentele getuienis. Die effek wat verskillende parameters op die resultaat het word aangewend in prosesbeplanning. Die bespreking hiervan word gevind in hoofstuk 6.



2.2 Die Beginsels van Simulasie wat van toepassing is:

2.2.1 Dinamiese balanse

Die studie is die beskouing van dinamiese balanse. Dit is mol en energiebalanse. Die balanse wat in die studie opgestel word is 'n kombinasie van makroskopies en mikroskopiese balanse. Op makroskaal kan beskou word die toevoer van die materiaal tot die oond en die produksietempo. Die verbruik van brandstowwe, vrystel van gasse, is byvoorbeeld deel van die makrobalans wat opgestel kan word vir 'n oond waarin die korrels verhit en gereduseer word. Die hittebalans oor die oond sluit in die energiebalans van die korrels en die verhitting in die oond, hitte in die afgasse en verliese deur die oond wande.

Op mikroskopiese skaal is daar die reaksies en prosesse van die enkelpartikels erts of steenkool. Aspekte hiervan sluit in die chemiese ewewigsgasdrukke, die gasdruk van die omgewing, al die verskillende soorte diffusie van die reagensgasse en produksgasse en die tempo van hitteoordrag binne die partikels.

Die balanse wat beskou word, neem sekere van beide van bg balanse in ag. Die balanse word gedoen oor 'n korrel. Die mikroskopiese prosesse van diffusie en reaksietempo's in die steenkool of ertspartikels self word vervat in gekombineerde tempovergelykings. Die beginsels van makrobalanse word toegepas in die oplos van die balansvergelykings.

2.2.2 Statistiese balanse “Black Box” en rekonsiliasie van data

Die data verkry uit die eksperimentele werk is gebruik om seker van die parameters in die modelle aan te pas om nader aan die werklikheid te kom. Die benadering om die diffusie prosesse in die partikels saam met die chemiese tempo's as 'n enkele vergelyking te beskryf, is 'n tipe “black box” benadering.

2.2.3 Meganismes en parameters

Daar is verskeie meganismes toegepas in die verskillende aspekte van die balanse byvoorbeeld die meganisme van hitteoordrag of die van gasvloei deur 'n gepakte bed. Die meganismes word alle in besonderhede bespreek in die volgende hoofstukke

2.3 Voordele van modellering:

Volgens Ramivex (1989) is daar die volgende voordele:

- a) Dit is ekonomies by ontwerp van nuwe prosesse
- b) Dit is gerieflik vir die ondersoek van die invloed van sisteemparameters
- c) Ekstrapolasie en opskaling kan daaruit volg alhoewel eksperimentele werk in meeste gevalle onmisbaar sal bly
- d) 'n Beter begrip van die proses spruit voort uit die modellering daarvan omdat dit in besonderhede uitgepluis moet word en omdat die gedrag daarvan uit die oplossing te voorskyn kom

2.4 Beperkings van modellering:

Volgens Ramivex (1989) is daar die volgende beperkings:

- a) Onvoldoende data en kennis van die prosesmeganismes: Die modellering leun swaar op basiese inligting wat beskikbaar is oor die proses.
- b) Oplos van moeilike nie-lineêre algebraïese en differensiaalvergelykings: Dit kan in sommige gevalle 'n taamlike probleem wees, veral as die stelsel vergelykings neig om te divergeer.
- c) Die gevaar bestaan altyd dat die aannames wat gemaak is in die modelleringsproses vergeet word: Dit kan daartoe lei dat te veel klem op die resultate van die model geplaas word.

3. Beginsels en Vergelykings vir Berekening van Chemiese en Temperatuurveranderinge in 'n Komposiet Korrel

3.1 Inleiding

Om die berekening te kan deurvoer is dit nodig dat sekere basiese balansvergelykings opgestel moet word nl. molbalansvergelykings vir elke spesie betrokke en 'n energiebalans vir die sisteem. Die korrel word beskou as 'n sfeer wat in die radiale rigting opgedeel is in elemente: Vir elke dop word nou balanse opgestel. Die balansvergelykings word dan gelyktydig opgelos. Dit is die eerste stap van diskretisering van die differensiaalvergelykings wat die balans oor die hele korrel beskryf. Verder word in die hoofstuk die aspekte wat uit die opstel van die balanse na vore kom in besonderhede bespreek.

3.2 Balanse

Daar is twee soorte balanse ter sprake. Komponentbalanse, dit is molbalanse van al die vastestof en gaskomponente, en die energiebalans. Eers word die balanse gegee en daarna word verskillende aspekte wat uit die balansvergelykings voortspruit bespreek.

3.3 Molbalans

Beskou ten eerste die molbalanse vir al die elemente behalwe die heel buitenste en die heel binneste element. Elke element word as 'n klein terugmengreaktor beskou. Dit beteken dat die konsentrasies van alle spesies en temperatuur en druk homogeen is binne 'n element. Verder is die eienskappe van die uitgaande stroom dieselfde as in die element. 'n Molbalansbenadering word gevolg volgens Fogler (1990) se metodes.

Die algemene spesiebalansvergelyking word toegepas:

$$\frac{dN}{dt} = F_{in} - F_{uit} + rV \quad (1)$$

N = molhoeveelheid van spesie in element (mol)

t = tyd (sekondes)

r = netto generasietempo per volume van spesie (mol per sekonde per m^3)

V = volume van element (kubieke meter)

F = invloei of uitvloeitempo van spesie in element (mol per sekonde)

Ten eerste is dit nodig om te bepaal watter spesies daar balanse voor opgestel moet word. Alhoewel daar geringe hoeveelhede onsuiverhede en ook koolwaterstowwe in die praktyk teenwoordig is word vir die doel van die model slegs die volgende spesies in ag geneem naamlik:

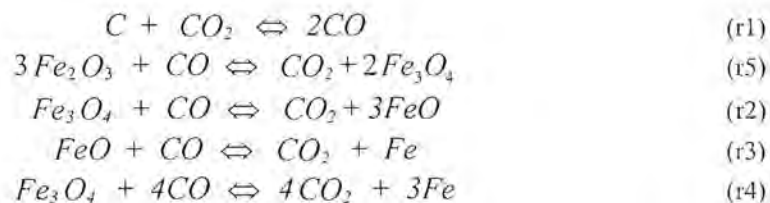
C
CO
CO₂
Fe
FeO
Fe₃O₄
Fe₂O₃
Inerte stowwe

L.W die inerte stowwe neem nie aan reaksies deel nie maar neem wel hitte op en het 'n effek op die geleidingsvermoë. Vervolgens is dit dan nou ook nodig om vas te stel watter reaksies sal plaas vind waarvoor daar tempovergelykings voor moet wees. Aangesien daar met magnetiet as beginmateriaal gewerk word, en die oksidasie daarvan as weglaatbaar beskou word onder die reduserende toestande word die volgende reaksies gebruik. Die direkte reduksie van magnetiet na yster by laer temperature word as weglaatbaar beskou. In die toepassing van die model op die eksperimentele werk wat gedoen is hoef dus net drie reaksies in ag geneem te word.

Volledigheidshalwe word hematiet reduksie ook in die ontwikkeling van die model gebruik.

3.3.1 Reaksies:

Daar is twee basiese tipe reaksies wat plaasvind. Vergassing van steenkool, en die verskillende stappe van reduksie van magnetiet na ystererts. Die keuse van tempovergelykings is bepaal met inagnome van tempovergelykings wat deur ander navorsers (Van Niekerk et al, Sun and Lu) gebruik is vir reduksie van ystererts met gas en die vergassing van steenkool.



Aangesien daar met magnetiet as beginmateriaal gewerk is en die oksidasie daarvan as weglaatbaar beskou word onder reduserende toestande, en so ook die direkte reduksie van magnetiet na yster by laer temperature, hoef dus net drie reaksies (r1,r2 en r3) in die toepassing van die model op die eksperimentele werk in ag geneem word.

Volgens die ideale terugmengreaktormodel kan daar nou vir elk van die ses spesies 'n molbalans opgestel word: Vir die vastestowwe C, Fe, FeO en Fe₃O₄ is daar nie 'n invloed en uitvloeiterm nie. Volgens die vier betrokke reaksies is dit duidelik dat al die spesies behalwe koolstof by meer as een reaksie betrokke is. Die gasse is by al die reaksies betrokke.

Dit kom voor asof die stel reaksies onvolledig is omdat al die moontlike reaksies van waterstof uitgesluit is. Dit is gedoen onder die aanname dat die vlugstowwe van die steenkool afkom sonder om met die ysteroksiedes te reageer. Die motivering hiervoor word bespreek in paragraaf 3.8.3

In 'n kontrolevolume is die molbalanse dus as volg:

$$\begin{aligned}\frac{dN_{Fe_3O_4}}{dt} &= (-3r_3)V \\ \frac{dN_{Fe_3O_2}}{dt} &= (-r_2 - r_4 + 2r_3)V \\ \frac{dN_{FeO}}{dt} &= (3r_2 - r_3)V \\ \frac{dN_{Fe}}{dt} &= (r_3 + 3r_4)V \\ \frac{dN_C}{dt} &= -r_1V \\ \frac{dN_{CO}}{dt} &= (2r_1 - r_2 - r_3 - 4r_4 - r_5)V + F_{CO_{in}} - F_{CO_{out}} \\ \frac{dN_{CO_2}}{dt} &= (-r_1 + r_2 + r_3 + 4r_4 + r_5)V + F_{CO_2_{in}} - F_{CO_2_{out}}\end{aligned}$$

N_i = aantal mol van spesie i [mol]

r_j = tempo van reaksie j (vgl's) [mol/s/m³]

V = volume van kontrole element [m³]

3.3.2 Reaksietempo's:

Vir die vyf chemiese vergelykings word die tempo van die reaksies met r_1 tot r_5 uitgedruk. Die vergelykings word hier slegs weergegee. Die rede vir keuse van die vergelykings word in besonderhede in opvolgende paragrawe behandel. In die volgende vergelykings verwys r_{CO} , r_C , r_{Fe} , ens. na die tempo's van vorming van die betrokke spesie deur die betrokke reaksies (aangedui met voetskrifte)

$$\begin{aligned}r_1 &= -r_{C(1)} = -r_{CO_2(1)} = \frac{1}{2}r_{CO(1)} \\ r_2 &= -r_{Fe_3O_4(2)} = -r_{CO(2)} = r_{CO_2(2)} = r_{FeO(2)}\end{aligned}$$



$$r_3 = -r_{FeO(3)} = -r_{CO(3)} = r_{CO_2(3)} = r_{FeO(3)}$$

$$r_4 = -r_{Fe_3O_4(4)} = -\frac{1}{4}r_{CO(4)} = \frac{1}{4}r_{CO_2(4)} = \frac{1}{3}r_{Fe(4)}$$

$$r_5 = -\frac{1}{3}r_{Fe_2O_3(5)} = -r_{CO(5)} = r_{CO_2(5)} = \frac{1}{2}r_{Fe_3O_4(5)}$$

Die reaksietempo's in die balansvergelykings word as volg bereken:

$$r_1 = r_c = \frac{I_1 P_{CO_2}}{1 + I_2 P_{CO} + I_3 P_{CO_2}}$$

$$r_2 = k_2 C_{Fe_3O_4} (P_{CO} - P_{CO}^{\circ}(2)) \text{ indien } P_{CO} > (P_{CO}^{\circ})_2$$

$$r_2 = k_2 C_{FeO} (P_{CO} - P_{CO}^{\circ}(2)) \text{ indien } P_{CO} < (P_{CO}^{\circ})_2$$

$$r_3 = k_3 C_{FeO} (P_{CO} - P_{CO}^{\circ}(3)) \text{ indien } P_{CO} > (P_{CO}^{\circ})_3$$

$$r_3 = k_3 C_{Fe} (P_{CO} - P_{CO}^{\circ}(3)) \text{ indien } P_{CO} < (P_{CO}^{\circ})_3$$

$$r_5 = k_5 C_{Fe_2O_3} P_{CO}$$

In vergelykings tot verwys (P_{CO}°), met $i=1,2,3,4$ na die ewewigsdruk van betrokke reaksie by die heersende totale druk en temperatuur.

P_{CO} verwys na die partiële druk van die koolstofmonoksied. Dit mag wel voorkom asof die tempo van die terugwaartse reaksie 'n funksie van P_{CO} is in plaas van P_{CO_2} soos 'n mens sou verwag omdat CO_2 dan die reagens sal wees. Die vorm spruit egter uit die aanname dat CO en CO_2 die enigste twee gasse is wat in die proses voorkom. Die terugwaartse reaksie vir bv ysteroksidasie na wustiet dien as voorbeeld.

Volgens aanvaarde konvensies vir eerste - orde tempomodelle is terugwaartse reaksie

$$r_3 = -k_3 C_{Fe} (P_{CO_2} - P_{CO_2}^{\circ}(3))$$

maar

$$P_{CO_2} = P_T - P_{CO}$$

en

$$P_{CO_2}^{\circ}(3) = P_T - P_{CO}^{\circ}(3)$$

dus

$$r_3 = -k_3 C_{Fe} \left((P_T - P_{CO}) - (P_T - P_{CO}^{\circ}(3)) \right)$$

dit is

$$r_3 = k_3 C_{Fe} (P_{CO} - P_{CO}^{\circ}(3))$$

Verder word die vastestof konsentrasies van die spesies magnetiet, wustiet, yster en koolstof met C aangedui. Die eenhede is mol per kubieke meter.

Die konstantes k_1 , k_2 , k_3 , k_4 en k_5 is 'n funksie van temperatuur volgens die Arrhenius vergelyking

$$k = A e^{\frac{E}{RT}}$$

3.3.3 Die orde van die reaksies

Die orde van die reaksie ten opsigte van die partiële CO drukverskil is in navolging van verskillende navorsers gekies. (Fruehan, 1977; Van Niekerk et al, 1994)

Hierdie studie se resultate (hoofstuk 5) is ook nie duidelik genoeg om aan te toon of dit wel 'n ander orde het nie. Verder is dit eenvoudigheidshalwe so gekies. Die oplosmetode wat gevolg word sal egter met geringe aanpassings hoër orde modelle kan hanteer.

Die orde van die reaksie wat betref die vaste reagense is aanvaar dat vanweë die fynheid van die materiaal die reaksietempo eweredig is aan die hoeveelheid vastestof wat beskikbaar is. Daar word aanvaar dat die reaksietempo hoofsaaklik bepaal word deur die vastestofarea per volume wat beskikbaar is. Verder word aanvaar dat die area beskikbaar per volume van 'n komponent eweredig is aan die hoeveelheid daarvan. Die aanname dat vastestof produkte en reagense almal ewe goed "gesien" kan word deur die gasreagense.

By "normale" reduksietemperature (1000°C) soos in die hoogoond het partikelgrootte geen effek op die reduksietempo's vir partikels kleiner as ongeveer 1 mm nie. Die tempo's van massaordrageffekte binne die partikels is relatief heelwat vinniger as die chemiese reaksiestappe en die diffusie van gasse na en van die oppervlak. (Szekely, 1976; Sun and Lu, 1996) Die tempo van diffusie na en van die oppervlaktes van die reagense word in die geval van 'n komposiet korrel as weglaatbaar gereken omdat die afstande baie kort is. Die oorhoofse tempo word dit hoofsaaklik deur die chemiese reaksietempo beheer.

Die chemiese reaksietempo's word weer beperk deur die tempo waarteen hitte die reagense bereik. Veral endotermiese reaksies soos die Boudouard reaksie sal sterk geraak word deur die effek. As die Boudouard reaksie afgerem word, skuif die gassamestelling op daardie punt in die rigting van die toepaslike of gekombineerde ewewig van die reduksiereaksies. As die tempo van die reduksiereaksies beperkend is, skuif die gassamestelling in die rigting van die ewewigsgasdruk van die Boudouard reaksie. In die volgende hoofstuk oor die metode van oplossing word die verdere stappe van wat gedoen is om die balansvergelykings op te los behandel

3.4 *Energiebalans*

3.4.1 *Inleiding*

Die reaksies wat plaasvind en die verhitting van die inhoud van die korrel vereis dat hitte (energie) op een of ander wyse na binne toe gedra moet word. Daar is natuurlik drie wyses van hitteoordrag en al drie is hier ter sprake. Watter een die belangrikste is, word vasgestel deur die posisie in die korrel en die aard van die stof.

As 'n mens heel buite begin dan kan 'n mens sien dat die korrel aan 'n gekombineerde konveksie en straling omgewing blootgestel is. Die konveksie-straling omgewing is of 'n steenkool of gasbrander saam met 'n warm oppervlak van vuurvaste materiaal of 'n elektries verhitte buismond. Na binne in die korrel in word 'n komplekse geleiding/straling konveksie hitte-oordrag aangetref. Die vastestof gelei die hitte na binne. Die gas voer weer hitte na buite deur konveksie. Endotermiese reaksies verbruik energie.

3.4.2 *Geleiding*

Die effektiewe geleidingskonstante word as 'n funksie van konnektiwiteit, porositeit en die geleidingsvermoëns en hoeveelhede van al die vastestof komponente bepaal. Die effektiewe geleidingsvermoë ondergaan 'n drastiese verandering deur die verloop van die proses. Die geleidingsvermoë van die vastestof is in die geval hoog genoeg sodat die effek van straling binne die pore weglaatbaar is. Sun en Lu (1993) het tot dieselfde gevolgtrekking gekom uit vergelyking van die waardes van straling geleiding en konveksie in 'n poreuse struktuur. Ook die effek van straling binne in kooks is onbeduidend volgens Akito Kasia et al. (1993) Ook in 'n baie akkurate benadering deur gebruikmaking van mikroskopiese beelde toon Nishioka et al (1996) aan dat straling binne in pore by temperature onder 1300°C weglaatbaar is.

3.4.3 *Konveksie*

Vanweë die uitwaartse beweging van gas is die hitteoordrag in die gas baie meer 'n konveksie-effek as 'n geleidingseffek. Daar word aangeneem dat vanweë die relatief lang smal pad, waarlangs die gas moet uitbeweeg, die gas-vastestof kontak so goed is dat die temperatuur daarvan deurgaans identies is aan die van die vastestof. Daar word nou aanvaar dat die hitteoordrag tussen gas en vastestof honderd persent effektief is. Alle gas verlaat dus die korrel teen die oppervlak temperatuur van die korrel.

Die situasie is dus as volg: Hitte beweeg na die oppervlak deur middel van straling en konveksie. Van die oppervlak van die korrel tot by die kern beweeg

die hitte deur middel van geleiding in die vastestof. Vanaf die kern tot by die oppervlak word die hitte deur die gas wat gegenereer word na buite gedra.

3.4.4 Industriële situasie

In 'n industriële situasie soos in 'n roterende herdoond, word die korrels op 'n effens meer kompleks wyse verhit. Korrels word in 'n enkellaag op 'n bewegende bed gelaai. Die korrels word primêr van bo af verhit deur straling en konveksie. Die vuurvaste vloer is nog warm van die vorige siklus en verhit dus die korrels ook van onder af. Hitteoordrag vind plaas deur straling en ook in 'n mate deur geleiding. Die korrels skerm mekaar ook effens af aan die kante. Aangesien die vuurvas wat die korrels van onder verhit slegs die interne hitte bevat wat dit in die vorige siklus opgetel het, sal die korrels gou heelwat warmer word aan die bokant as aan die onderkant en sykante. Uiteindelik wanneer die korrels dwarsdeur verhit is word die vuurvaste bodem ook al meer verhit deur hitte wat deur straling en geleiding van die korrels en ook van die omgewing af oorgedra word.

Om die situasie te simuleer moet die effek van wedersydse straling van die betrokke komponente (korrels, vuurvaste bodem en omgewing) deeglik beskou moet word. Sigfaktore sal gebruik moet word. Daarby sal dit nodig wees om die vuurvaste bodem en die hele siklus as 'n geheel te modelleer om die bewegende temperatuurprofiel van die vuurvaste bodem vas te stel. Die mate waartoe die industriële situasie met die eksperimentele opstelling ooreenstem hang af van die temperatuur wat die vuurvaste materiaal bereik gedurende die proses, asook die hoeveelheid hitte wat oorgedra word na die vuurvas. Hoe dit ook al sy, sal daar altyd meer hitte van bo af aan die korrels oorgedra word aangesien die bodem hoofsaaklik deur die korrels verhit word.

Donskoi et al van Queensland University of Technology (1996) het 'n wiskundige model ontwikkel wat spesifiek op die FASTMET proses van toepassing is. Hulle het die reaksiemeganismes en reaksietempobeskrywing op 'n baie vereenvoudigde wyse benader en meer aandag gegee aan hitteoordrag berekeninge. Hulle het 'n dubbellaag korrels in 'n FASTMET oond benader as 'n dubbellaag "stene" waar die straling dan tussen boonstes kan deurkom om die onderstes ook te verhit. Die model is eendimensioneel. Hulle bring 'n sterk mate van krimpings in hulle berekening in wat in dié studie egter nie waargeneem is nie. Die resultate van Donskoi et al (1996) se model is nie ge-evalueer aan fisiese toetse nie. Die resultate van hulle berekening lewer antwoorde wat in dieselfde orde grootte val as industriële en eksperimentele waardes.

Dit is duidelik dat die situasie van 'n korrel wat hang in 'n buisoond glad nie die hitteoordragssituasie van korrels wat in 'n roterende herdoond gelaai word naboots wat betref temperatuurprofiel in die korrels nie.



'n Ander tipe eksperimentele opstelling kan egter gebruik word om 'n nabootsing onder beheerde toestande van die roterende herdoond situasie te verkry. Dit is 'n oond waar 'n laag korrels op 'n na onder geïsoleerde en na bo verhitte vuurvaste plaat geplaas word. Die oond is verhit op so 'n wyse dat die omgewing waaraan die korrels blootgestel is by die oondtemperatuur is maar die vuurvaste plaat by die verwagte temperatuur wat die oppervlak in die roterende herdoond sal wees op die punt waar die korrels gevoer word.

3.4.5 Eksperimentele werk in die studie

In 'n meer teoretiese studie is dit verkieslik om die eksperimentele toestande te kies wat beter beheer en makliker gesimuleer kan word, en steeds al die basiese komponente van die sisteem bevat. Indien dit dan volg dat die simulasië geslaagde resultate kan lewer vir die eenvoudige opstelling sal dit maklik wees om die resultate met sekere aanpassings van toepassing te maak op die industriële situasie.

3.4.6 Vergelykings vir tempo waarteen hitte by rand oorgedra word

Die eksperimentele werk is gedoen in 'n elektries verhitte buisoond waardeur N_2 gas gevoer is. Sien Tabel 3-2 Die temperatuur van die gas het minimaal verskil van die temperatuur van die oondwand op die posisie in die oond waar die korrel getoets is. Die gasvloeiensnelheid was bekend en sodoende kan 'n hitteoordragskoëffisiënt bereken word vir die gegewe gasvloei-toestande. Daar is aanvaar dat die produkgas nie veel versteur het aan die hitteoordrag effek van die N_2 gas na die korrel nie. Dit word aangeneem omdat die tempo waarteen N_2 oor die korrel vloei heertyd groter is as die tempo waarteen gas uit die korrel uitbeweeg. Met die hitteoordragskoëffisiënt en 'n aanvaarde emisiwiteitswaarde vir die oppervlak van die korrel is 'n tempo van hitte-oordrag na die korrel se oppervlak bepaal as 'n funksie van die oppervlaktemperatuur.

Die berekening van die hoeveelheid hitte wat na die korrel toegevoer word deur konveksie en straling is as volg berekenbaar:

3.4.7 Stralingshitteoordrag

Die hitte oorgedra deur straling word as volg bereken:

$$Q_s = \epsilon \sigma A (T_{omg}^4 - T_s^4)$$

Q_s = hitte oorgedra aan korrel per tydseenheid [Watt]

ϵ = emisiwiteit van korreloppervlak

σ = Stefan-Boltzmann se konstante [$W/m^2/K^4$]

T_{omg} = temperatuur van die oond se wand [Kelvin]

T_s = temperatuur van die korrel se oppervlak [Kelvin]
 A = oppervlakarea van korrel [m^2]

Die hitte oorgedra deur straling is 'n sterk funksie van die oppervlaktemperatuur en is op die meeste 49 W vir 'n standaard grootte korrel by oondtemperatuur van 1300°C as die korrel nog koud is. (Die motivering vir die gebruik van die model word gegee in paragraaf 3.4.9)

3.4.8 Konveksiehitteoordrag

Die hitte wat oorgedra word deur konveksie is heelwat minder as die stralingshitteoordrag, en kan vir alle praktiese doeleindes eintlik weggelaat word. Die berekening daarvan geskied egter as volg.

Eerstens word die gasvloei-toestande rondom die korrel vasgestel. Daarmee word dan die Reynoltsgetal bepaal vir die betrokke situasie. Met die lae gasvloei-snelheid van stikstof wat gebruik is in die buisondopstelling (ongeveer 0.1 m/s, is die Reynoltsgetal ongeveer 6 wat dui op laminêre gasvloei-toestande. Met behulp van 'n empiriese verwantskap kan die hitteoordragskoeffisiënt bereken word (Holman, 1989, Hoofstuk 5). Met 'n oppervlaktemperatuur van tussen 300 en 1573 K varieer die hitteoordragskoeffisiënt van 7.7 na 6 W/m²/K. Dit beteken dat die hitte oorgedra deur konveksie nie hoër as 1.7 W is nie.

$$Re = \frac{\rho u d}{\mu_\infty}$$

ρ = digtheid van gas

u = spoed van gas

$$Nu = 2 + \left(0.4 Re_d^{1/2} + 0.06 Re_d^{2/3} \right) Pr^{0.4} \left(\frac{\mu_\infty}{\mu_w} \right)^{1/4}$$

μ_∞ = viskositeit van gas in vrystroom

μ_w = viskositeit van gas op oppervlak

Re = Reynoltsgetal

Pr = Prandtl getal

Die hitteoordragskoeffisiënt kan nou bereken word

$$h_{konv} = \frac{Nu k_f}{d}$$

k_f = geleidingsvermoë by die filmlaag (by temperatuur gemiddeld van oppervlak en vrystroom)

d = diameter van korrel

$$Q_{tr} = hA(T_{omg} - T_s)$$

Die volgende tabelle toon 'n voorbeeld van die moontlike waardes wat verkry word met die berekening van hitteoordrag na 'n korrel:

Tabel 3-1 Tipiese waardes wat in eksperimentele opstelling en model gebruik is

Die waardes van konstantes is verkry uit Heat Transfer van Holman

Korrel eienskappe		
Diameter	D=	0.015 m
Buitearea	A=	0.00017671 m ²
Emisiwiteit	e=	0.8 []
Oondtemperatuur		
	Tomg=	1573 K
Stefan-Boltzmann		
	S=	5.669E-08

Tabel 3-2 Gasvloei in oondbuis se eienskappe

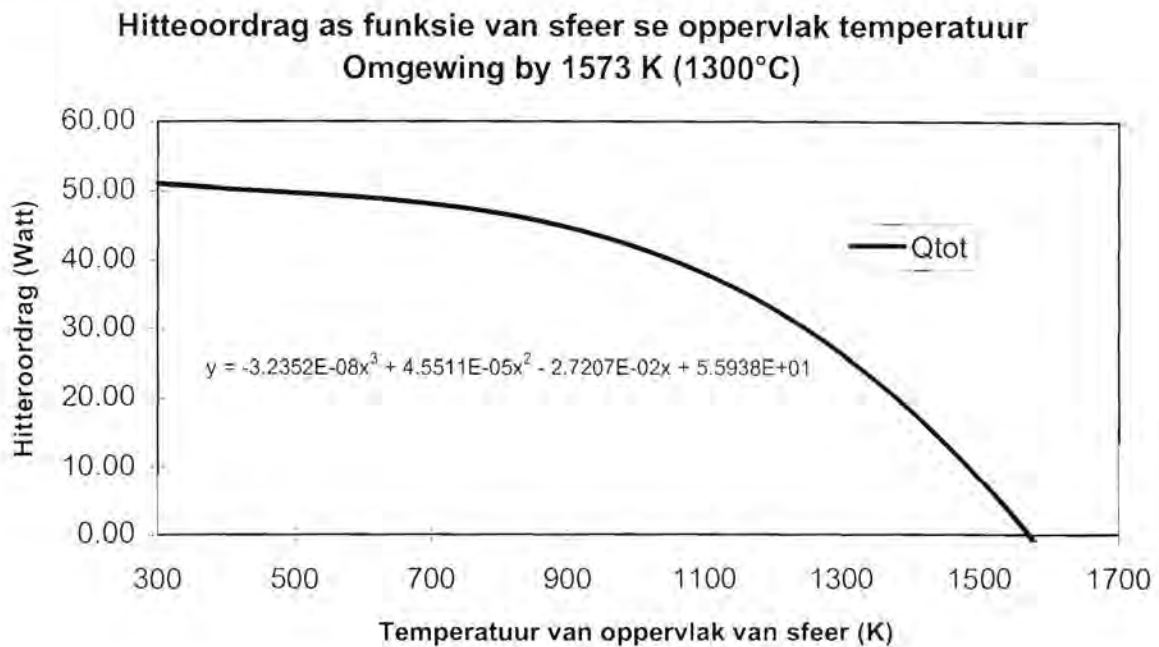
Vrystroom gaseienskappe		
Samestelling		100% N ₂
Temperatuur	Tomg=	1573 K
Prandtl	Pr=	0.72 []
Gasspoed	v=	0.1049 m/s
Renaultsgetal	Re=	6.348 [-]
Geleidingsvermoe	k=	0.0788 W/m/K

Tabel 3-3 Tipiese waardes verkry vir tempo van hitteoordrag na 'n sferiese korrel by verskillende temperature van die korrel se oppervlak (Oondtemperatuur 1300 °C)

Korrel-oppervlak-temperatuur	Gas viskositeit op oppervlak van korrel	Nussult getal bereken volgens vlg (6-30) in	Hitteoordragkoeffisient	Stralings hitteoordrag	Hitte deur konveksie	Hitte deur straling	Totale hitte oorgedra
[K]	[kg/m/s]	[-]	[W/m ² /K]	[W/m ² /K]	[W]	[W]	[W]
T _s	u _s	Nu	h	h Straling	Q _h	Q _s	Q _{tot}
300	1.77E-05	1.466	7.70	218	1.7	49.0	50.7
400	2.17E-05	1.393	7.31	236	1.5	48.9	50.4
500	2.54E-05	1.338	7.03	256	1.3	48.6	49.9
600	2.89E-05	1.296	6.81	279	1.2	48.0	49.2
700	3.21E-05	1.262	6.63	306	1.0	47.1	48.2
800	3.51E-05	1.235	6.49	335	0.9	45.8	46.7
900	3.78E-05	1.212	6.37	368	0.8	43.8	44.6
1000	4.02E-05	1.194	6.27	405	0.6	41.1	41.7
1100	4.23E-05	1.178	6.19	447	0.5	37.3	37.8
1200	4.42E-05	1.166	6.12	492	0.4	32.4	32.9
1300	4.58E-05	1.156	6.07	543	0.3	26.2	26.5
1400	4.71E-05	1.147	6.03	598	0.2	18.3	18.5
1500	4.82E-05	1.141	5.99	658	0.1	8.5	8.6
1600	4.90E-05	1.136	5.97	724	0.0	-3.5	-3.5

Die waardes van gaseienskappe is verkry uit Holman (1989, bylae 2).

Figuur 3-1 Hitteoordrag na sfeer



Die randvoorwaarde vir die hittebalans by die buiterand van die korrel kan dus geskryf word as

$$k \frac{\partial T}{\partial r} = \sigma \epsilon (T_{omg}^4 - T^4) \quad (2)$$

3.4.9 Stralingshitteoordrag in 'n buisoond

Aangesien straling duidelik 'n belangrike rol speel in die verhitting van die korrel is dit nodig om seker te maak dat die stralingstoestand waaraan die korrel blootgestel word tydens die toetse wel ooreenstem met die model. Dit wil sê hoe geldig is die argument dat die korrel 'n homogene temperatuur van bv 1300°C sien? Uit die eksperimentele opstelling is dit duidelik dat die temperatuur van die oond sleg reg by die middel van verhitte deel van die buis 1300°C sal wees.

Temperatuurmeting in die buis as funksie van posisie dui aan dat die temperatuurprofiel van die oondwand baie goed deur 'n parabool benader word met 'n draaipunt in die middel, soos in vergelyking (3)

$$T = T_o + (T_m - T_o) \left(1 - \frac{x^2}{h^2} \right) \quad (3)$$

T = wandtemperatuur

T_o = wandtemperatuur van bo of onderpunt en van endpunte

x = afstand vanaf middel

h = helfte van verhitte lengte van buis

Om nou te bepaal wat die korrel sien wat in die warmste punt in die buis geplaas word moet die wêreld vanuit daardie oogpunt beskou word. Volgens Figuur 3-2 geld die volgende twee verwantskappe

$$x = r \tan \theta$$

en

$$\alpha = \arctan \frac{h}{r}$$

Hieruit kan die temperatuur wat die korrel sien in terme van die rigting waarin hy "kyk" uitgedruk word. Dit wil sê in terme van θ . Van $\theta=0$ tot by $\theta = \alpha$ is die temperatuur wat die korrel sien

$$T = T_o + (T_m - T_o) \left(1 - \frac{r^2}{h^2} \tan^2 \theta \right)$$

Vanaf $\theta = \alpha$ is $T = T_o$

Die effektiewe area wat na die korrel toe wys speel ook 'n rol.

'n Infinitesimale area word gebruik gesien vanaf die korrel se oppervlak. Daar word aanvaar dat elke punt op die korrel slegs in een rigting kyk en dit is loodreg op die oppervlak.

Dan is vir $\theta \in [0, \alpha]$

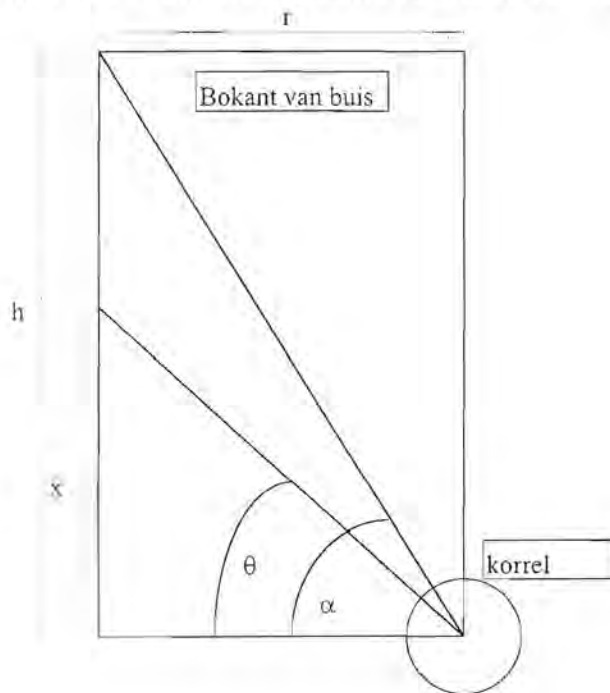
$$dF = \cos \theta \, d\theta$$

en vir $\theta \in (\alpha, \frac{\pi}{2}]$ is

$$dF = \sin \theta \, d\theta$$

F is die fraksie van die oond se wand wat na die korrel toe wys op 'n spesifieke posisie

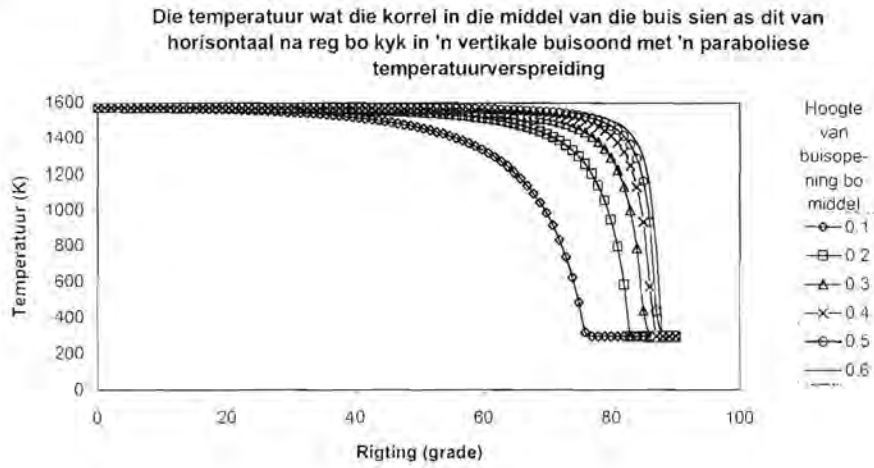
Figuur 3-2 Skematiese voorstelling van 'n snit deur die helfte van die boonste helfte van die buisoond



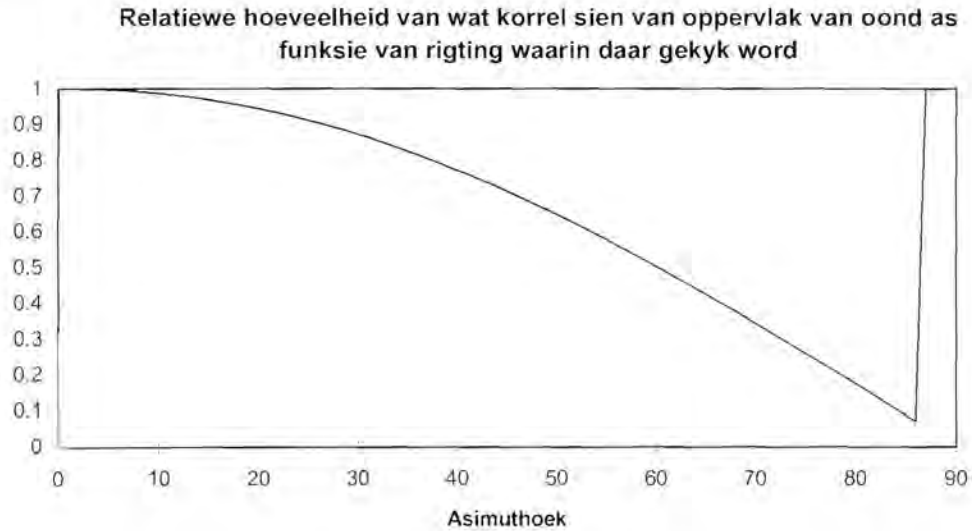
Figuur 3-2 toon aan wat die korrel "sien" as dit van horisontaal af boontoe kyk. Die temperature is bereken vir 'n oondbuis met diameter 5 cm en verskillende lengtes. Die hoogtes aangegee in die figuur is in meter. Uit die grafieke is dit duidelik dat die korrel eintlik baie meer sien van die temperature wat relatief naby aan die maksimum temperature is. In 'n buis van omtrent 0.8 m lengte is die koue kol wat die korrel sien taamlik klein.

Die prentjie is egter nie volledig as die hoeveelheid stralingshitte ontvang vanaf die oond nie ook as funksie van rigting beskou word nie. Onder die aannames hierbo gemaak en met 'n korrel wat nog by kamertemperature is, is die hittevloed na die korrel as funksie van asimut hoek (θ) bereken. Figuur 3-4 toon aan hoeveel van die oppervlak wat in 'n sekere rigting lê gesien word deur die korrel.

Figuur 3-3 Temperature soos gesien deur korrel in buisoond

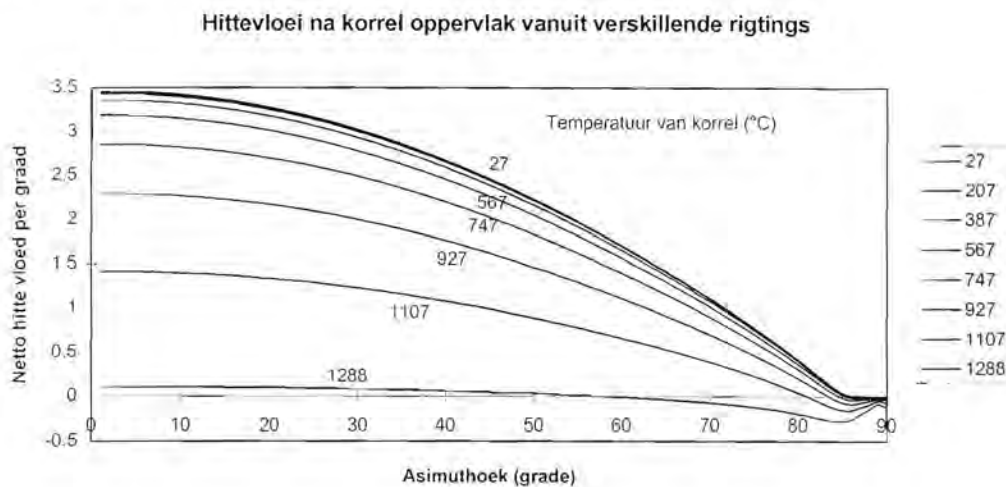


Figuur 3-4 Relatiewe hoeveel van wat korrel sien van oondoppervlak

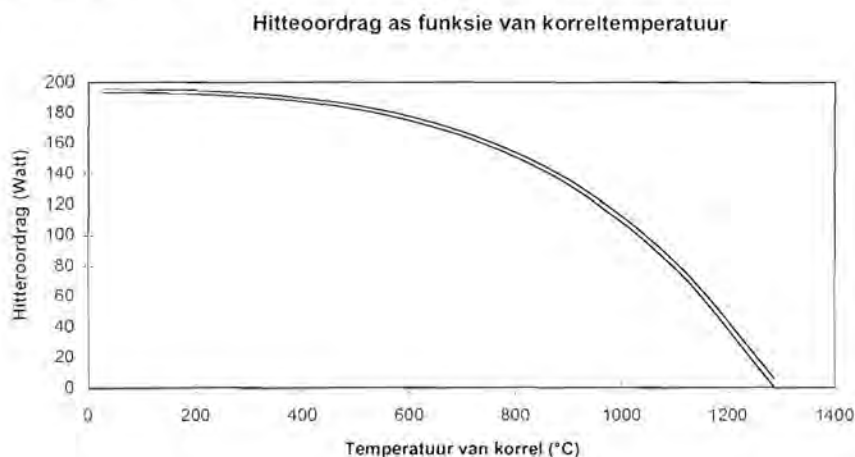


Die volgende figuur toon die hittevloed na die korrel as 'n funksie van rigting met verskillende korreloppervlak temperature

Figuur 3-5 Hittevloed na korreloppervlak



Figuur 3-6 Effek van koue ente



Figuur 3-6 toon die verskil wat die inagneming van die effek het. Die onderste lyn is die aangepaste funksie. Dit kan aangetoon word dat vanwee die verlies na die ente toe die maksimum gemiddelde temperatuur van die korrel 12°C kouer sal wees oond se wand.

Die gevolgtrekking wat uit die analise gemaak word is dat die effek van stralingsverlies na die koue endpunte van die oond is relatief klein, alhoewel die effek op die meeste amper die helfte soveel hitte behels as wat deur konveksie gelewer word. Die twee kanselleer mekaar dus in 'n mate uit. Dus sal dit 'n goeie aanname wees om te aanvaar dat die korrel slegs aan 'n enkeltemperatuur stralingsomgewing blootgestel is.

Hierdie berekening is egter 'n benadering aangesien die effek van weerkaatsing buite rekening gelaat is.

3.4.10 Algemene hittebalans vergelyking

Die vergelyking hieronder is die eenvoudigste vorm van die hittebalansvergelyking vir hitteoordrag binne in die korrel.

Daar word meerdere geometrieë beskou in die studie. Daar kan onderskei word vir watter geometrie 'n vergelyking ter sprake is deur te let op die simbool wat vir dimensionele parameter gebruik word. Waar x gebruik word is dit vir die eendimensionele korrel lineêre model. Dit is dus die model van die staaf met konstante deursnitarea. Waar r gebruik word is dit die sferiese geometrie wat van toepassing is.

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{ef} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (4)$$

E = die totale som van interne energiekonsentrasie van die materiaal in die korrel. [J/m^3]

t = tydsverloop [s]

x = posisie vanaf verhitte ent [m]

k_{ef} = effektiewe geleidingsvermoë. [$W/m^{\circ}C$] Die term is sterk afhanklik van temperatuur en posisie

T = temperatuur van die materiaal

(Met materiaal word bedoel die mengsel van verskillende gasse en vastestowwe)

Vergelyking (4) moet egter in sy verder komponente verdeel word om nuttig te kan wees. Daar sal opgelet word dat die vergelyking nie invloei en uitvloei hitteterme het nie alhoewel daar in werklikheid baie hitte deur gas wat deur die korrel vloei oorgedra word. Dit sal aangetoon word dat die terme vervat is in die linkerkant van vergelyking (4). Ook die hoeveelheid energie wat opgeneem word deur die materiaal en die energie betrokke by die reaksies wat plaasvind is vervat in die term.

Drie ander energiet Terme word egter doelbewus weggelaat.

- 1) Die potensiële energie van die druk waaronder die gas verkeer. Die term word weggelaat omdat die hoeveelheid energie weglaatbaar klein is in verhouding tot die energie betrokke by verhitting van die materiaal en die reaksies.
- 2) Die tweede is die kinetiese energie van die bewegende gas deur die pore. Die is ook weglaatbaar klein
- 3) Ook die wrywingsverliesenergieterm is weglaatbaar.

Die totale energiekonsentrasie kan as volg geskryf word

$$E = \sum_{k=1}^n C_k H_k \quad (5)$$

k = nommer van komponent in die sisteem

n = aantal komponente

C = konsentrasie van komponent k [mol/m^3]

H = temperatuurafhanklike entalpie waarde van spesie k [J/mol]

In die model sal as volg wees:

$$E = N_C H_C + N_{CO} H_{CO} + N_{CO_2} H_{CO_2} + N_{Fe_3O_4} H_{Fe_3O_4} + N_{FeO} H_{FeO} + N_{Fe} H_{Fe}$$

Deur nou vergelyking (5) in die linkerkant van vergelyking (4) in te vervang en die produkreël toe te pas word die volgende verkry

$$\frac{d\left(\sum_{k=1}^n C_k H_k\right)}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{cf} \frac{\partial T}{\partial x} \right)$$

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{\partial C_k}{\partial t} + u_k \frac{\partial C_k}{\partial x}$$

$$\frac{dH_k}{dt} = \frac{\partial H_k}{\partial t} + u_k \frac{\partial H_k}{\partial x}$$

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k H_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{cf} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - u_k \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k H_k}{\partial x} \right)$$

In die sferiese geometrie:

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k H_k}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_{cf} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - u_k \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k H_k}{\partial r} \right) \quad (6)$$

Die vergelyking kan verder uitgebreid geskryf word maar dit is nie nodig nie omdat vergelyking (6) volledig genoeg is om te gebruik in die oplos van die energiebalans in die model.

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k}{\partial t} H_k + \sum_{k=1}^n C_k \frac{\partial H_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{cf} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - u_k \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial C_k}{\partial x} H_k + \sum_{k=1}^n C_k \frac{\partial H_k}{\partial x} \right)$$

3.4.11 Ten laaste

Die enkelkorrel is opgedeel in doppe: balanse, ewewigte, tempo's en ander eienskappe word dan beskou per dop. Die doppe word vir die doel van die numeriese berekeninge klein genoeg gekies sodat elke dop as 'n ideale terugmengreaktor beskou kan word. Die besonderhede van die numeriese ontplouing van die vergelykings word in die volgende hoofstuk oor berekeningsmetode bespreek

3.5 Geleiding

3.5.1 Geleidingsvermoë van suiwer komponente

In die berekening van die model is daar gebruik gemaak van die geleidingsvermoëns van die verskillende betrokke suiwer stowwe naamlik:

- (i) koolstof as grafiet of kooks (C)
- (ii) yster (Fe)
- (iii) Magnetiet (Fe_3O_4)
- (iv) Hematiet (Fe_2O_3)
- (v) Wüstiet (FeO)
- (vi) Inerte materiaal (Inert) Hier word die eienskappe van silika en allumina gebruik omdat dit die hoof onsuiverheid is in die toetse wat gedoen is (sien chemiese analise van grondstowwe gebruik)

Die geleidingsvermoë van suiwer yster:

$$k_{\text{Fe}} = 2.54 \cdot 10^{-5} T^2 - 0.0553T + 65.3$$

Hierdie vergelyking is verkry deur 'n kwadratiese passing te doen op die data wat die geleidingsvermoë van α yster en γ yster beskryf. Die data is verkry uit Holman (1989).

Akiyama et al (1991) het die geleidingsvermoë van digte hematiet magnetiet en wüstiet gemeet oor 'n temperatuur bereik van kamertemperatuur tot 1273 K. Die laserflitsmetode is gebruik om die waardes te bepaal. Die data is vervat in die vergelykings van die vorm $k=1/(AT + B)$.

Die geleidingsvermoë van die ysteroksiedes het die merkwaardige eienskap dat die aard van die temperatuurafhanklikheid by 'n sogenaamde Tammann temperatuur skerp verander. Elk van die oksiedes het sy eie Tammann temperatuur. Die termiese resistiwiteit, $1/k$, verander liniêr as 'n funksie van temperatuur tot by die Tammann temperatuur.

Fe_2O_3 :	Temperatuurgebied (Kelvin)
$k = 1/(1.844 \cdot 10^{-4} T)$	$298 < T < 912$
$k = 1/(8.319 \cdot 10^{-5} T + 9.243 \cdot 10^{-2})$	$912 < T < 1500$

Fe_3O_4 :	Temperatuurgebied (Kelvin)
$k = 1/(1.693 \cdot 10^{-4} T)$	$298 < T < 906$
$k = 1/(2.967 \cdot 10^{-6} T + 1.508 \cdot 10^{-1})$	$906 < T < 1500$

FeO:	Temperatuurgebied (Kelvin)
$k = 1/(2.335 \cdot 10^{-4} T + 1.136 \cdot 10^{-1})$	$298 < T < 825$
$k = 1/(-1.047 \cdot 10^{-4} T + 3.926 \cdot 10^{-1})$	$825 < T < 1500$

Die geleidingsvermoëns van die inerte komponente is die van SiO_2 en Al_2O_3 . Die waardes verkry uit die handboek van Kaye (p. 60, 1973) is gebruik. Onderstaande vergelykings is passings op die data.

$$k_{\text{SiO}_2} = 806T^{-0.803}$$

$$k_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 30241T^{-1.183}$$

Die termiese geleidingsvermoë van die steenkool is baie moeiliker om te voorspel as die van die ysteroksiedes. Gedurende verhitting word vlugstowwe uit die steenkool vrygestel. Dit bring drastiese samestelling en struktuurveranderinge van die steenkool. Die sintel wat so ontstaan is het bv. 'n baie hoë porositeit. Omdat reaksies eers by 'n temperatuur begin plaasvind waar die vlugstowwe reeds afgedryf is, word hier gebruik gemaak van waardes uit die literatuur vir die geleidingsvermoë van kooks of sintel (Sintel is enige koolstof waarvan die vlugstowwe afgedryf is deur dit in die afwesigheid van lug te verhit). Kooks verander min as dit verhit word solank as dit nog nie begin oksideer nie.

Kasia et al (1993) het waardes vir die effektiewe geleidingsvermoë van kooks op mikrovlak bepaal as 'n funksie van temperatuur en die porositeit van die kooks. Hulle het dit bepaal oor 'n temperatuurgebied van 100°C tot 1400°C met behulp van die laser flits metode. Die effektiewe geleidingsvermoë van die kooks neem toe met toename in temperatuur en neem af met toename in porositeit. Die effek van straling binne die kooks is baie klein. Hulle het 'n empiriese vergelyking bepaal vir die effektiewe geleidingsvermoë k (W/mK) as 'n funksie van temperatuur T (K) en porositeit ε :

$$k = \{0.973 + 6.34 \cdot 10^{-3} (T-273)\} (1 - \varepsilon^{2/3})$$

Daar is min in die literatuur oor die geleidingsvermoë van kooks en steenkool. Die waardes in die verskillende publikasies verskil met ordegrottes. Kasai et al (1993) het dertien kookse gebruik om 'n empiriese vergelyking te bepaal. Die porositeit van die kookse wat ingesluit was in hulle studie was tussen 0.3 en 0.6. Die materiale wat in Kasai et al (1993) se studie se eksperimente gebruik is se porositeit is geneem as 0.4. Dan is

$$k_c = 0.444 + 2.90 \cdot 10^{-3} (T-273)$$

3.5.2 Weglaat van straling binne die korrel

Sundarmurti en Rao (1996) het die hitte oorgedra deur middel van straling binne die korrel as weglaatbaar beskou in verhouding tot die hitte oorgedra deur geleiding.

3.5.3 Bepaling van effektiewe geleidingsvermoë binne die korrel

Die berekening van die geleidingsvermoë van die materiaal in die korrels is belangrik omdat die geleidingsvermoë saam met die hittekapasiteite en die reaksiewarmites die vloeitempo van hitte in die korrel bepaal. As hitteoordrag 'n tempobepalende faktor in die proses is dan het die termiese geleidingsvermoë 'n direkte invloed op die algehele tempo van die reaksie. Dit is dus belangrik dat sorgvuldige aandag aan die berekening van die geleidingsvermoë gegee word.

Die bepaling van die effektiewe geleidingsvermoë word gekompliseer deurdat die korrel 'n poreuse struktuur het en dat dit regdeur die verloop van die proses saamgestel is uit 'n verskeidenheid van stowwe waarvan die geleidingsvermoëns onderling sterk verskil. Verder verander die samestelling van die materiaal op enige posisie ook voortdurend. Die porositeit en die struktuur verander ook drasties.

Die belangrike effek wat die struktuur op die geleidingsvermoë van 'n poreuse materiaal het word aangedui deur onder andere Sundarmuti en Rao (1996). Hulle het korrels gebruik wat saamgestel is uit ystererts-poeier gebind met 1% dextrin. Hulle het termokoppels in die middel en op twee kante van die korrel geplaas en die temperatuurverskille tussen binne en buite gemeet tydens verhitting van die korrel. Die effektiewe geleidingsvermoë van die materiaal is vanaf die data bepaal deur toepassing van 'n hittebalans. Die verandering in geleidingsvermoë met toename in temperatuur en met tyd by konstante temperatuur as gevolg van versintering blyk uit hulle resultate. Hulle het 'n korrelasie getref tussen die verandering in struktuur van die materiaal en die effektiewe geleidingsvermoë. Hulle het die porositeit as struktuurparameter gebruik.

Die werk wat deur Akiyama et al (1992) gedoen is egter van groot waarde in die berekening van effektiewe geleidingsvermoëns in gesinterde en gedeeltelik gereduseerde strukture. Hulle het met ysteroksiedkorrels gewerk (nie steenkool by nie). Die geleidingsvermoë van gevuurde, ongevuurde en korrels wat in verskillende stadia van reduksie is, is bepaal met behulp van die laser flits metode. Die effektiewe geleidingsvermoë wat so gemeet is, gekorreleer goed met waardes wat bepaal is met 'n gemodifiseerde selmodel. Die model bring 'n bykomende struktuurveranderlike in die berekening in. Die model beskou die struktuur as dat dit op mikroskaal saamgestel is uit 'n kerndeel en 'n verbindende deel in die vastestof.

Daar bestaan 'n wye verskeidenheid van berekingsmetodes om die effektiewe geleidingsvermoë, k_e , van 'n poreuse mengsel te bepaal. As boonste limiet is die benadering dat die stowwe en pore parallel lê in die rigting van hittevloei. Dit is natuurlik ver verwyder van die werklikheid. As die poorvolume en die verskillende stowwe in serie geplaas word, word 'n minimum effektiewe geleidingsvermoë bepaal. Die werklike effektiewe geleidingsvermoë sal iewers tussen die twee lê.

3.5.3.1 Beste model

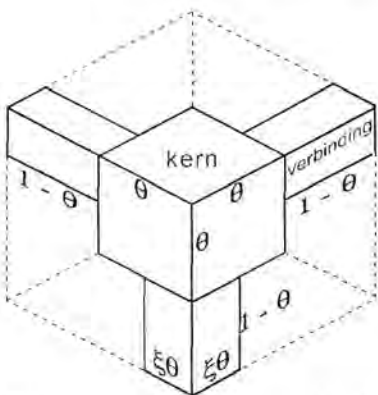
Akiyama et al (1992) gebruik 'n eenheidsel model om 'n benadering van die serie en parallel metode te verkry en dan die geometriese gemiddelde van die twee te bepaal. Die effektiewe geleidingsvermoë van die vastestof, k_s , word bepaal as die geometriese gemiddelde van die betrokke vastestowwe in die mengsel se geleidingsvermoëns.

$$k_s = \prod_{i=1}^n k_i^{f_i} \quad (7)$$

k_i = geleidingsvermoë van vastestof I

f_i = molfraksie van vastestof I

Die geleidingsvermoë van die gas in die pore, k_g , word ook in die berekening gebruik. Die effek van straling word as weglaatbaar klein beskou



Figuur 3-7 Voorstelling van model vir berekening van effektiewe geleidingsvermoë

In Figuur 3-7 word die betekenis van die struktuur parameters aangedui. Dit is 'n eenheidsel. Die sye van die kubus is dus een. Die kerngedeelte se afmeting is θ en die van die verbinding is ξ . Beide θ en ξ is tussen nul en een.

Met bogenoemde model word die effektiewe geleidingsvermoë se bo en onder limiete bepaal as die parallelle model en 'n serie model. Deur gebruik te maak van die analogie tussen die geïntegreerde Fourier wet en Ohm se wet kan die volgende twee uitdrukkings bepaal word om die geleidingsvermoë voor te stel.

$$k_{par} = k_g [1 - 2\xi\theta(1-\theta) - \theta^2] + k_s(\xi\theta)^2 + k_g k_s [2\xi\theta(1-\theta) / \{k_s(1-\xi\theta) + k_g\xi\theta\} + \{\theta^2 - (\xi\theta)^2\} / \{k_s(1-\theta) + k_g\theta\}] \quad (8)$$

$$k_{ser} = [\xi\theta / \{k_s + (k_g + k_s)(1-\theta^2)\} - 2\xi\theta(1-\theta) / \{k_s + (k_g - k_s)(1-\theta^2)\}]^{-1} \quad (9)$$

k_{par} = effektiewe geleidingsvermoë volgens parallelle model

k_{ser} = effektiewe geleidingsvermoë volgens serie model

k_g = geleidingsvermoë van gas

k_s = geleidingsvermoë van vastestof

Die effektiewe geleidingsvermoë van die poreuse materiaal word dan gegee deur:

$$k_e = \sqrt{k_{par} k_{ser}} \quad (10)$$

In die berekenings metode word van twee strukturele parameters gebruik gemaak. Die parameters word in die plek van die porositeit gebruik. Die gebruik van twee struktuur parameters in plaas van een gee aan die berekeningsmetode natuurlik 'n voordeel bo die wat net een nl porositeit gebruik. Dit word deur Akiyama et al (1992) aangedui

Die porositeit is natuurlik bepaalbaar vanaf die twee parameters.

$$\text{Porositeit} = 1 - \theta^3 - 3(\xi\theta)^2(1-\theta)$$

3.5.3.2 Model wat gebruik is

Alhoewel die model in die laaste paragraaf die akkuraatste is, kan die parameters daarvan nie met die berekening van die oorhoofse model voorspel word nie. Die beste model wat slegs van die geleidingsvermoëns van die vastestowwe en gasse en die porositeit gebruik maak is blyk die van Sundarmurti en Rao (1996) te wees.

$$k_e = k_s \frac{2k_s + k_g - 2\varepsilon(k_s - k_g)}{2k_s + k_g + \varepsilon(k_s - k_g)}$$

met k_s = geleidingsvermoë van die vastestof bepaal as die geometriese gemiddeld van die geleidingskoëfisiente van die vastestofkomponente. Dit word as volg bereken.

$$k_s = \exp \left(\frac{\sum_{i=C}^{Fe_2O_3} C_i \ln(k_i)}{\sum_{i=C}^{Fe_2O_3} C_i} \right)$$

$i = C, Fe, FeO, Fe_3O_4, Fe_2O_3$

C_i = konsentrasie van komponent i

k_i = geleidingsvermoë van komponent i

Die gas se geleidingsvermoë word as 'n eenvoudige funksie weergegee as die van CO gas (Holman, 1989).

$$k_g = -6.702 \cdot 10^{-9} T^2 + 3.61 \cdot 10^{-6} T + 2.72 \cdot 10^{-5}$$

Die totale gasdruk het slegs maar 'n klein invloed op die geleidingsvermoë. Dit word dus nie in ag geneem nie.

3.6 Vergassing van steenkool of kooks

3.6.1 Inleiding

Die tempo waarteen een of ander bron van koolstof op een of ander metode met 'n gegewe gasmengsel reageer is die onderwerp van baie eksperimentele studies. Die doel van die literatuurstudie is om die beste metode te vind wat die tempo van koolstofverbruik in 'n komposiet ystererts, steenkool korrel beskryf. Waarna gesoek word is 'n vergelyking wat die tempo van verbruik van koolstof beskryf as 'n funksie van gassamestelling, die partikelgrootteverspreiding, die porositeit van die koolstofbron en die temperatuur.

'n Studie is gemaak oor watter metodes daar is om van 'n gegewe koolstofbron die reaksietempo met 'n vergelyking of 'n model te beskryf.

Eerstens sal die algemene kinetika van reaksies van koolstof met oksiderende gasse bespreek word. Daarna word die metodes en resultate van die meer bedryfsgerigte toetswerk nl kooksreaktiwiteit bespreek. Die verskillende metodes om die chemiese, diffusie, temperatuur effekte vas te vat word dan bespreek. Laastens word ook aandag geskenk aan die katalitiese effek wat sekere metaaloksiedes op die vergassing van koolstof het. Die afdryf van vlugstowwe in die geval van steenkool of die karbonisering in die geval van kookskole nie is nie beskou nie.

3.6.2 Reaksies

Die reaksies van gasse met koolstof is die volgende:

Tabel 3-4 Reaksies van koolstof met oksiderende gasse			
Naam	Reaksie	Vrye energie- verandering (ΔG) (J/mol C)	Ewewigskonstante ($K = e^{-\Delta G/RT}$)
Boudouard reaksie	$C + CO_2 \rightleftharpoons 2CO$ (11)	173000 - 177 T	$= P_{CO}^2/P_{CO_2}$
Watergas reaksie	$C + H_2O \rightleftharpoons CO + H_2$ (12)	134750-142 T	$= P_{H_2} \cdot P_{CO} / P_{CO_2} / P_{H_2O}$
Verbranding by lae temperature	$C + O_2 \rightleftharpoons CO_2$ (13)	$0.001.534 T^2$ - 4.285 T - 393200	$= P_{CO_2} / P_{O_2}$
Verbranding by hoë temperature	$C + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO$ (14)	- 110830 - 89.3 T	$= P_{CO} / \sqrt{P_{O_2}}$

Die vrye-energiewaardes is verkry uit Rodney Jones & Wolfgang Meihack se termodinamika databasis. (Rekenaarprogram: "Thermo") Die waardes is vir koolstof in grafietvorm. Die waardes vir amorfe koolstof verskil effens hiervan.

Daar is nie 'n produklaag wat vorm nie. Dit vereenvoudig die beskrywing van die kinetika. Omdat die meeste koolstofbronne onsuiverhede bevat bly daar iets oor wat nie reageer nie. Dit vorm iets soortgelyk aan 'n produklaag.

Vanweë die omkeerbaarheid van die reaksies met koolstof moet die vrye energie verandering van die reaksies beskou word. Die ewewigsgassamestelling word bepaal deur die vrye energie van die reaksies wat betrokke is en die temperatuur. Hieruit volg dat by temperature bo ongeveer 750°C CO die mees stabiele gasspesie is. Die verhouding van P_{CO} tot P_{CO_2} word groter soos met verhoogde temperatuur. Bo ongeveer 1100°C bestaan daar feitlik geen CO_2 onder ewewigstoestande nie.

3.6.3 Kinetika

Volgens Szekely en Aderbigbe (1982) en ook Rao en Jalan (1972) word die kinetika van gas-vastestof reaksies gewoonlik met volgende stappe beskryf:

- a) Gasfase massaoordrag van die gasreagense vanaf die bulk gasstroom na die buiteoppervlak van die steenkool of kookspartikel.
- b) Diffusie van die reagensgasse binne-in die poreuse koolstofhoudende materiaal in. D.i. poordiffusie.
- c) Chemisorpsie van die reagensgasse op die poeroppervlak en eksterne oppervlak van kooks of steenkool.
- d) Chemiese reaksie op die oppervlak.
- e) Desorpsie van die geabsorbeerde spesies om die produk gasse te vorm
- f) Uitwaartse poordiffusie van die reaksieprodukte.
- g) Gasfase massaoordrag uitwaarts vanaf die partikel oppervlak in die bulkgas.

Die bydrae van elk van bg. stappe tot die algehele tempo, nl die tempo waarteen die koolstof opgebruik word, hang sterk af van die gassamestelling, die gasvloei tempo, die partikelgrootte en die temperatuur. Met relatief hoë temperature en groot partikels is die diffusiestappe sterk tempobepalend. Rao en Jalan (1972) gee 'n bespreking waarin hulle drie temperatuurgebiede aandui waar 'n koolstofpartikel met CO_2 gas gereageer word. By die relatief lae temperature oorheers die chemiese aspekte terwyl poordiffusie relatief vinnig plaasvind. Die gassamestelling is dus homogeen in die hele korrel en die reaksie vind dan homogeen in die korrel plaas. Die tweede gebied is by hoër temperature waar die oordragstappe b) en f) nie meer geïgnoreer kan word nie. Die gas binne die pore is nou 'n mengsel van CO en CO_2 . In die derde temperatuur gebied (nog hoër temperature) is die chemiese reaksietempo relatief baie vinniger as die diffusietempo's. Die gas binne die pore bestaan dus hoofsaaklik uit CO gas sodat die reaksie meer op die buiteoppervlak of na aan die oppervlak plaasvind. Om die vergassingstempo van steenkool en kooks te beskryf moet in alle gevalle bepaal word watter reaksiestappe die belangrikste is. As die massa en hitteoordrag stappe die belangrikste is, is dit van minder belang presies hoe die chemiese reaksietempo beskryf word. Omgekeerd ook as

die massaoordragstappe weglaatbaar is, dan is 'n meer presiese definisie van die chemiese reaksiestap nodig.

Die tempo van die reaksies is relatief stadig onder 900°C maar bo 1100°C vind dit vinnig plaas. Die sterk temperatuur afhanklikheid van die Boudouard reaksie is dus 'n belangrike eienskap om in ag te neem.

3.6.4 Kooksreaktiwiteit

Omdat die meeste navorsingswerk wat gedoen is oor die vergassingstempo van koolstofhoudende materiaal verband hou met die gebruik van kooks in die hoogoond word nou eers gekyk na wat die benaderings in die verband is.

In die praktyk word die vergassingstempo van 'n kooks gemeet aan die sogenaamde kooksreaktiwiteit. Volgens Patrick en Wilkinson (1980) is kooksreaktiwiteit 'n losse term wat gewoonlik verwys na die tempo waarteen kooks verbrand of vergas word wanneer dit met tipiese oksiderende gasse soos lug koolstofdiksied, suurstof of stoom gereageer word. Die term word gewoonlik gebruik vir 'n indeks van die resultaat van vergassingseksperimente wat op laboratoriumskaal gedoen word. Reaktiwiteit is dus nie 'n karakteristiek van die kooks nie maar is afhanklik van beide die eienskappe van die kooks en van die metode wat die kooks aangewend word.

Die reaktiwiteit van 'n kooks word gewoonlik bepaal deur 'n vaste hoeveelheid kooks tot 1000°C te verhit onder stikstof en dan by konstante temperatuur met koolstofdiksied gas te reageer en die verandering in massa van die monster met tyd te meet. Die tyd wat dit neem om sekere hoeveelheid van kooks te vergas word as die reaktiwiteits indeks gebruik. Daar is verskeie variasies op die metode maar in beginsel is dit 'n empiriese toets. Alhoewel daar meestal gepoog word om die massaoordrag effekte uit te skakel of konstant te hou vir al die materiale wat getoets word is dit nie altyd geslaagd nie. Die reaktiwiteitsindeks is dus nuttig vir die vergelyking van verskillende kookse. Dit is egter onvoldoende om die eindelike gedrag van die kooks in die hoogoond of waar dit ook al gebruik word te voorspel. Die belangrikste gebruik van die kooksreaktiwiteitsindekse is om 'n konstante gedragseienskappe van die kooks te handhaaf.

Meestal is die kookse reaksietempo gemeet aan 'n reaktiwiteitsindeks wat standaard binne 'n maatskappy gebruik word. Die vroeër jare was daar baie verskillende indekse. Een so 'n toets word beskryf deur Hyslop.(1980) Dit is die N.S.C toetsprosedure. Dit is die metode wat in 1980 deur Nippon Staal in gebruik was. Die partikelgrootteverspreiding word standaard gehou op 19 tot 20 mm, die toetstyd op 120 minute by 1100°C na verhitting tot op temperatuur onder stikstof. Die gasvloei tempo is 5 l/min. Monstergrootte is 200g. Na twee ure word die monster onder stikstof afgekoel. Die reaktiwiteit word gedefinieer as die % massaverlies aan die einde van die toets.

Hyslop (1980) toon aan dat 'n toename van 50°C die reaktiwiteitsindeks met 50% verhoog. Hy toon ook aan dat dit belangrik is om die gasvloei tempo konstant te hou omdat dit 'n sterk invloed het op die reaksietempo.

Met 'n stel punte wat hy toon kan gesien word dat by die 5 l/min is die effek van gasvloei steeds baie sterk. Die buis se diameter is 100 mm Die standaardtoets meet dus in baie gevalle 'n reaksietempo waarin die tempo massaordrag na die kookspartikels van CO₂ ingesluit is. (Die gebruik van nie hoër as 5 l/min is om te verseker dat die CO₂ behoorlik verhit as sodra dit in kontak kom met die kooks.

Die reaktiwiteitsindeks is dus 'n vergelykende maatstaf maar vind nie fundamentele toepassing nie. Dit is egter wel soms moontlik om vir fundamentele of empiriese modelle sekere van die konstantes vanaf reaktiwiteitsindeksdata te bereken. Dit moet egter nie sonder meer gedoen word nie.

3.6.5 Modelle wat die chemiese reaksietempo beskryf

1. Eenvoudige verwantskappe

Zamalloa et al beskryf die vir oksidasie van kooks of grafiet deur of CO₂ met die eenvoudige Arrhenius verwantskap:

$$\text{Tempo} = k C_c \exp(-E/R/T) \quad (15)$$

E = 'n aktiveringsenergie

k = 'n konstante wat onafhanklik is van beskikbare reaksieoppervlak en temperatuur

C_c = beskikbare reaksieoppervlakarea.

Hulle motivering vir die gebruik van vergelyking (15) is die falings van meer gekompliseerde metodes om 'n akkurate beskrywing te gee van vergassingstempo's vanweë die baie veranderlikes wat 'n invloed het op vergassing.

Die vorm toegepas op data van verskillende bronne dui aan dat wyd uiteenlopende waardes vir die aktiveringsenergie en die konstante verkry word. Wanneer die reaksiegas 'n mengsel van CO₂ en ander gasse is, sal b.g vergelyking nie 'n tempowaarde binne redelike limiet kan gee nie. In die temperatuurbereik van 1000°C tot 1200°C is die ewewigsituasie die omgekeerde. Die gas sal hoofsaaklik uit CO sal bestaan. Die model neem glad nie die ewewig situasie in ag nie. Die model kan alleen gebruik word in situasies waar daar so 'n hoë gasvloei tempo is van CO₂ sodat daar heeltyd ver van ewewig af gebly word. Die model neem slegs die twee belangrikste eienskappe van die Boudouardreaksie in ag nl. die sterk effek van temperatuur en die sterk effek van beskikbare koolstof oppervlak. Zamalloa et al (1995) het

gevind dat die partikelgrootte 'n veel kleiner rol speel in die algehele tempo as die ander twee faktore.

'n Beter model is die wat gebruik is deur Iwanaga en Takatani (1989). Die model sluit die CO₂ gasdruk en die ewewigsgasdruk vir die Boudouardreaksie in.

$$r_c = kC_c(P_{CO_2} - P_{CO_2}^e) \quad (16)$$

k = temperatuurafhanklike konstante

C_c = konsentrasie van koolstof (ekwivalent aan beskikbare reaksiearea)

P_{CO_2} = koolstofdiodoksieddruk

$P_{CO_2}^e$ = ewewigskoolstofdiodoksieddruk.

By hoër temperature reduceer die vergelyking ook na vergelyking (15)

2. Langmuir - Hinshelwood meganisme

Hierdie is 'n model om die chemiese gas-vastestofreaksietempo te beskryf. Die model beskryf die koolstof vergassing as bestaande uit twee stappe.

a) Suurstof uitruilingstap



b) Vergassingstap:



Met k_1 = reaksietempokonstante vir voorwaartse reaksie van a) en

k_2 = reaksietempokonstante vir terugwaartse reaksie van a) en

k_3 = reaksietempokonstante vir reaksie b)

C_o , en C_f verwys na die koolstofmonoksied gevulde en oop posisies op die koolstof oppervlak.

Die sogenaamde Ergun formulاسie van die model is:

$$r_c = \frac{I_1 P_{CO_2}}{1 + I_2 P_{CO} + I_3 P_{CO_2}} \quad (19)$$

$$I_1 = K_1 C_T \exp(-E_1/RT)$$

$$I_2 = K_2 \exp(-E_2/RT)$$

$$I_3 = K_3 \exp(-E_3/RT)$$

Die parameters vir die vergelyking kan maklik eksperimenteel bepaal word.

Ten eerste is dit nodig om die eksperiment so op te stel dat massaordrageffekte

uitgeskakel is. Daarna word by verskillende temperature in die konstantes I_1 , I_2 en I_3 bepaal. 'n Reeks toetse waarin 'n N_2 - CO_2 gebruik word en die % CO_2 gevarieer word, word gedoen en die reaksietempo bepaal. Wanneer die hoeveelheid CO minimaal is, vereenvoudig vergelyking (19) na

$$\frac{1}{r_c} = \frac{1}{I_1} \left(\frac{1}{P_{CO_2}} \right) + \frac{I_3}{I_1} \quad (20)$$

Wanneer $1/r_c$ teen $1/P_{CO_2}$ geplot word, moet dit 'n reguit lyn lewer met helling $1/I_1$ en afsnit van I_3/I_1 . I_1 en I_3 kan nou bereken word.

Daarna word die %CO in 'n CO - CO_2 mengsel gevarieer en reaksietempo's bepaal.

Vergelyking (33) kan nou omskryf word as volg:

$$\frac{P_{CO_2}}{R_c} = \frac{I_2 - I_3}{I_1} P_{CO} + \frac{1 + I_3}{I_1} \quad (21)$$

Deur $\frac{P_{CO_2}}{R_c}$ teen P_{CO} geplot moet weereens 'n reguit lyn lewer en nou kan I_2 bereken word.

Volgens Rao en Jalan (1972) kom die reaksietempomodelle van Turdogan en Vinters (1970) en Grabke (1968) op dieselfde neer. Hulle toon aan dat vorm van die vergelykings is identies onder sekere eksperimentele toestande. Ook meer onlangs is die model gebruik deur Freund (1985)

Volgens Bandyopadhyay en Ghosh (1996) gee die Langmuir verwantskap nie 'n weerspieëling van die werklikheid nie. Uit hulle eksperimentele data en ander data uit die literatuur toon hulle aan dat I_1 , I_2 en I_3 afhanklik is van die tipe en bron van koolstof wat gebruik word. Verder word gevind dat vir sommige gevalle die terugwaartse suurstof uitruilingsstap volgens passing van data op die model 'n negatiewe aktiveringsenergie kan hê. Dit is egter nie fisies moontlik nie. Vir die bepaling van konstantes is dit soms moeilik om 'n waarde van sommige van die konstantes as 'n Arrheniusfunksie van temperatuur te beskryf by hoë CO konsentrasie en lae temperature. Hulle toon aan dat die ewewigskonstante bereken vir die suurstofuitruilingsreaksie drasties verskil tussen die verskillende navorsers se resultate. Dit blyk dus dat die stap nie as 'n fundamentele komponent van die vergassingsproses gereken kan word nie.

Alhoewel dit blyk uit bg. dat die Langmuir Hinshelwood meganisme heel moontlik verkeerd is, is vergelyking (19) steeds nuttig. Baie navorsers het dit met 'n redelike mate van sukses gebruik om die tempo van verbruik van koolstof te beskryf waar massaoordrag en hitteoordrag effekte weglaatbaar is. Die sterk afwykings wat in sommige gevalle by hoë P_{CO} en ook lae temperature gekry word, is in baie studies nie waargeneem nie omdat die toetswerk nie die

kondisies beskou het nie. Dit waarskynlik die rede hoekom daar sommer aanvaar word dat die reaksies volgens die Langmuir-Hinshelwood meganisme verloop. Vergelyking (19) is dus eintlik ook maar 'n empiriese vergelyking wat nuttig maar versigtig gebruik kan word.

3.6.6 Poordiffusie

Die navorsingswerk van Koba en Ida (1980) is een van die studies wat aandui hoedat die reaktiwiteit van kooks of sintel met H₂O heelwat hoër is as met CO₂. Dit kan gekoppel word aan die poordiffusietempo's van die gasse. Hulle het toetse by 1200°C gedoen om die reaktiwiteit te meet. Die reaktiwiteit is bepaal volgens die massaverlies per tyd. Die kooksmonster was 10g 3-6 mm grootte en 'n gasvloeiempo van 2 l/min is gebruik. Daar is gevind dat die CO₂ meer op die kookspartikeloppervlak of daarnaby gereageer het terwyl die H₂O meer homogene vergassing deur die hele korrel tot gevolg gehad het. Die reaktiwiteitsindeks van elk van die kookse het toegeneem met toenemende hoeveelheid H₂O by die gas. In die eerste 4% van H₂O toevoeging het die reaktiwiteitsindeks egter soms afgeneem. Die mate waarin die hoeveelheid H₂O die reaktiwiteit verhoog het drasties verskil van kooks tot kooks. Onder die agt kookse wat getoets is was H₂O tussen 1.5 en 4 maal meer reaktief as CO₂.

Met inagneming van die effek van waterstof op die vergassingstempo en die effek van beperkte diffusietempo's van CO₂ en H₂O stel hulle die volgende empiriese vergelyking voor

$$V = \text{reaktiwiteit} = \frac{k_1 P_{CO_2}}{1 + K P_{H_2}} + k_2 P_{H_2O} \quad (22)$$

met k_1 en k_2 tempokonstantes wat die diffusie en chemiese tempo insluit
 K = ewewigskonstante van H₂ adsorpsie op die oppervlak

Hulle stel dus 'n tipe empiriese vergelyking voor met die gedagte dat dit die effek van diffusie en H₂ adsorpsie insluit. Daar word ook nie iets aangedui oor die effek van temperatuur in hulle eksperimentele werk nie.

Rao en Jalan (1972) het fundamentele werk gedoen met grafietkorrels van 'n grootte van 1 gram en kleiner by temperature tussen 839°C en 1050°C. Hulle het gevind dat diffusie beslis 'n rol speel in die algehele reaksietempo. Hulle het 'n metode van effektiwiteitsfaktore berekening gebruik om 'n chemiese reaksietempokonstantes te bereken. Hulle toon alleenlik aan dat die grootte van die partikel wat hulle gebruik het 'n definitiewe rol speel in die reaksietempo. Geen inligting word gegee oor die struktuur van die koolstof wat hulle gebruik het nie behalwe dat 'n chemiese graad koolstof is.

Szekely en Aderbigbe (1982) het 'n model gebruik om die vergassing van kooks te beskryf wat die effektiewe diffusiwiteit en die chemiese reaksietempo in

terme van die Langmuir verwantskap inkorporeer. Hulle het 'n baie soortgelyke metode gevolg as Rao en Jalan (1972) maar het ook die struktuur en die verandering van struktuur met verloop van reaksie in ag geneem. Hulle het toetse gedoen by temperature tot 1100°C . Die doel was die karakterisering van kooksreaksietempo in die hoogtoed. Interessante inligting word gegee oor die verandering in reaksieoppervlakte gedurende die verloop van die vergassing van 'n kookspartikel. Kwik porosimetrie en BET oppervlak meting is gebruik om die totale oppervlakarea te bepaal. Met inagneming van die groter CO gasvolumes betrokke is bulkvloei-effekte in die pore ook in ag geneem. Hulle het die model gebaseer op plaat geometrie om die vergelykings te vereenvoudig. Die metode om die verloop van die reaksie te bereken is met behulp van die semi-analitiese metode deur gebruikmaking van effektiwiteitsfaktore. Die gebruik hiervan kompliseer die saak eintlik omdat dit bykomende parameters bybring wat 'met die hand' gekies moet word. Hulle gee egter ook 'n metode waarmee 'n eerste benadering vir die parameters gekry kan word. Die werking van die model is afhanklik van die verband tussen reaksieverloop en porositeit wat vooraf eksperimenteel bepaal moet word.

Iwanaga en Takatani (1989) het fundamentele eksperimentele werk gedoen om die oksidasie van kooks in die hoë temperatuurgebied van die hoogtoed te tipeer. Kooks is gereageer met 'n $\text{H}_2\text{O} - \text{N}_2$ mengsel of met 'n $\text{CO}_2 - \text{N}_2$ mengsel by temperature tussen 1150°C en 1700°C . In aansluiting met eksperimentele resultate dat by hoër temperature die tempo sterker afhanklik is van die grootte van die kookspartikel is gasdiffusie in ag geneem. 'n Sogenaamde diffusie model is gebruik met gebruikmaking van 'n effektiewe diffusietempo van CO_2 in $\text{CO}_2 - \text{CO}$ gas en die chemiese reaksietempo wat volgens vergelyking (21) beskryf word. Balanse van die CO_2 of H_2O en ook van C is opgestel oor die hele partikel. In die model word beide die chemiese en die diffusietempo's in ag geneem om die reaksietempo van die kooks te beskryf. Soos in die laer temperatuur gevalle is die koolstofreaksietempo sterk afhanklik van temperatuur. Deurdad die effektiewe diffusiwiteit sterk afhanklik is van die porositeit, is dié verwantskap vir die kooks wat gebruik is bepaal en gebruik in die berekening. Iwanaga en Takatani (1989) se model neem dus struktuureffekte ook in ag. Die model word numeries opgelos en lewer resultate wat goed pas op die eksperimentele data. Alhoewel daar nie aangetoon word wat die korrelasie is nie is dit op sigwaarde beter as al die ander modelle wat reeds bespreek is.

3.6.7 Filmlaagdiffusie

Stap a) en g), in die algehele reaksiemeganisme, d.i die diffusie van die reagens na die oppervlak en die diffusie van die gasprodukt weg van die oppervlak is van belang by die hoë temperatuur oksidasie van kooks. Iwanaga en Takatani (1989) het gevind dat die diffusietempo van O_2 na die kookspartikel oppervlak tempobepalend is by 1700°C . Kookssfeer is getoets met groottes van tussen 5 en 12 mm. Daar is gevind dat die tempo baie sterker beïnvloed word deur die grootte van die korrel as deur watter kooks gebruik word. Op grond van hulle

resultaat en ander stel hulle 'n krimpende kern model voor. Die diffusietempo van O_2 na die oppervlak, die aanvanklike grootte van die kookssfeer, die entalpieverandering van die reaksie, die hittekapasiteite van die as en die kooks en die hitteoordragtempo vanaf die korrel word in ag geneem. Die verbranding van kooks lewer 'n netto hitte.

3.6.8 Bron van kooks of steenkool

Baie navorsingswerk is al gedoen om die reaktiwiteit en sterkte van kookse en sintels te voorspel vanuit die samestelling daarvan. In die meeste gevalle word gepoog om 'n korrelasies te tref tussen die steenkooleienskappe en die kooks se sterkte na reaksie omdat dit veral vir gebruik in die hoogoond van belang is.

Volgens Patrick en Wilkonson (1980) het die steenkool of kooks se samestelling (petrografiese analise) 'n baie groot invloed op die reaktiwiteit van die kooks of sintel. Die kooks bestaan uit beide isotropiese en anisotropiese fases. Dit is bekend dat die koolstowwe en grafiete verskil in hulle reaktiwiteite volgens hulle graad van strukturele orde. Hoe hoër die geordendheid hoe minder reaktief is die stof. Dit is egter nie noodwendig so nie omdat ander faktore ook inkom. 'n Studie wat Patrick en Wilkinson (1980) gemaak het toon aan dat die isotropiese materiaal die mees reaktiewe komponent in die kooks is. Maar daar is geen verband wat aandui dat enige van die anisotropiese komponente meer reaktief as die ander nie. Miura (1978) het in 'n kwantitatiewe verwantskap tussen kooks reaktiwiteit met CO_2 en 'n mosaïek samestelling voorgestel.

$$R = 17.6 + 0.105 X_1 - 0.154 X_3 - 0.0804 X_4 + 0.316 X_6$$

X_1 , X_3 , X_4 en X_6 is onderskeidelik die fraksie isotropiese, growwe mosaïek, veselagtige mosaïek en onreaktiewe komponent. Die onderskeiding is egter baie subjektief en kon glad nie op Patrick en Wilkinson (1980) se data pas nie. Hulle kon egter weer 'n ander verwantskap kry wat redelik goed op hulle data pas.

$$R = 17.7 + 0.86 X_1 + 0.277 X_2 + 0.423 X_7$$

X_1 , X_2 en X_7 is onderskeidelik die fraksie isotropiese materiaal, fynkorrel mosaïek anisotropiese en basiese anisotropiese materiaal. Dit egter ook aan subjektiewe waarneming onderworpe.

Patrick en Wilkinson (1980) toon 'n klomp voorbeelde van kookskole met wye verskeidenheid van samestellings almal dieselfde reaktiwiteit het.

Chiu (1982) het twintig verskillende steenkole gebruik. Die is almal petrografies en chemies geanaliseer. Die kooksreaktiwiteit en sterkte is bepaal na verkooksing en ook na vergassings reaksies. Hulle het gevind dat die petrografiese samestelling verander met verloop van reaksie met CO_2 . Die meer isotropiese komponente neem relatief toe en die res neem af. Die grootste

faktore wat die kooks se reaktiwiteit beïnvloed is die rang van die koolstof en die metaaloksiedinhoud van as. Kooksreaktiwiteit neem af met toename in rang en afname in isotropiese komponent. Die regressie wat gedoen is toon aan dat alhoewel bogemelde neigings oor die algemeen geld uitsonderings bestaan wat selfs die teenoorgestelde gedrag het.

Alle korrelasies in die geval is egter empiries en is steeds afhanklik van finale evaluasie met 'n standaard reaktiwiteits of sterkte toets.

Dit is dus nie moontlik om 'n algemene model in terme van steenkoolsamestelling te kry wat die gedrag van die steenkool of kooks onder enige toestande sal beskryf nie. Die beste is seker om die samestelling en struktuur vas te vat met twee of meer konstantes in die model wat dan empiries bepaal met word. Die effektiewe reaksie is eenvoudig maar vanweë die wyd uiteenlopende strukture en samestelling van koolstofbronne is dit feitlik onmoontlik om die kinetika met een model te beskryf.

3.6.9 Temperatuur

Daar is reeds verskeie male gewys op die sterk effek wat die temperatuur op die tempo van vergassing het. Die Boudouard en die watergasreaksies se tempo's is beide sterk temperatuurafhanklik.

Die meeste navorsers waarvan die artikels nageslaan is in hierdie oorsig, het op een of ander manier die effek van temperatuur in hulle studie aangetoon. In alle gevalle word die temperatuurafhanklikheid gekoppel aan konstantes bereken volgens die Arrhenius vergelyking.

$$K = k e^{\frac{-E}{RT}} \quad (23)$$

met K = enige temperatuurafhanklike konstante

k = betrokke konstante wat onafhanklik van temperatuur is

E = aktiveringsenergie (alhoewel dit nie altyd die fisiese betekenis het nie)

R = gaskonstante

T = absolute temperatuur

3.6.10 Hitteoordragtempo

In gevalle waar die massaordragtempo van die gasse 'n rol begin speel is dit waarskynlik dat die temperatuur ook nie homogeen sal wees nie. Soos bv in die stel resultate van Hyslop (1980, p138) gesien kan word beteken 'n toename in 50°C 'n sterk toename in die tempo van vergassing. Die kooksreaktiwiteit gemeet met die standaard toets van die N.S.C is 30 by 1075°C en 42 by 1125°C vir 'n sekere kooksmonster.

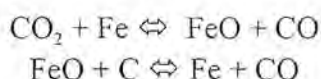
Die entalpie waarde van die reaksie is in slegs een van die studies wat beskou is gebruik en wel van die reaksie van kooks met lug by hoë temperature. Szekely en Aderbigbe (1982) en ook Iwanaga en Takatani (1989) het verwys na die effek van hitteoordrag tempo in die reaksie van CO₂ of H₂O maar hulle het dit ook nie in berekening gebring nie. Dit lyk dus asof daar 'n leemte in die navorsing gedoen oor koolstof vergassing bestaan. Die rede daarvoor is dat daar aanvaar word dat die kookspartikel lank genoeg tyd het om homogeen verhit te word wees. In al die reaktiwiteitsindekstoetse word die kooks eers oor 'n goeie tydjie in N₂ verhit totdat die middel van die monster op temperatuur is. Daarna word die CO₂ gas toegevoer en die temperatuur op die middel van die monster konstant gehou. Die geval waar die kooks of sintelpartikel vinnig verhit word is nie beskou nie.

3.6.11 Katalitiese effekte

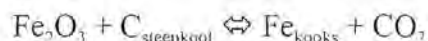
Dit is goed bekend dat die reaksie tussen koolstof en koolstofdoksied by temperature van ongeveer 1000°C baie vatbaar is vir die invloed van minerale kataliste.

Dit is ook al aangetoon deur o.a. Chiu en Hong (1985) dat Fe₂O₃ en K₂CO₃ byvoegings van minder as 1% en 0.5% onderskeidelik by die steenkoolmengsel voor verkooksing die oksidasiegedrag van die kooks drasties beïnvloed. Die navorsers het die effek gemeet aan die hand van die 'n reaktiwiteitsindeks en sterkte na reaksie indeks. Daar is gevind dat die reaktiwiteitsindeks tot so veel as verdubbel met byvoegings van 1% Fe₂O₃. Die hoeveelheid Fe₂O₃ wat aanvanklik in die kookskole was voor die byvoeging het nie 'n merkbare effek nie op die mate waartoe die reaktiwiteit toeneem met Fe₂O₃ byvoegings nie. Daar kan egter gesien word uit hulle eksperimentele resultate dat daar 'n duidelike verband is tussen die reaktiewe koolstofinhoud van die steenkool wat gebruik is en die sterkte van die effek wat die Fe₂O₃ byvoeging het.

Die katalitiese werking kan as volg beskryf word:

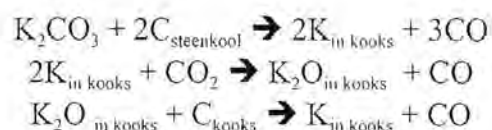


Volgens Chiu en Hong (1982) is die yster in die eerste plek afkomstig vanaf die reduksie van die Fe₂O₃.



Die effek wat K₂CO₃ byvoeging op die reaktiwiteit het is nog sterker. Die reaktiwiteitsindeks het in sommige gevalle verdubbel met die byvoeging van 'n half persent van die K₂CO₃.

Die meganisme wat deur Chiu en Hong (1985) voorgestel word vir die katalitiese werking van K_2CO_3 is as volg.



Behalwe vir die bg. navorsers is daar verskeie ander wat ook die katalitiese werking van Na_2CO_3 , K_2CO_3 en Fe_2O_3 opgemerk het. Hoewel die effek taamlik sterk is vir baie steenkoolbronne, is dit nie noodwendig daar nie. Wanneer 'n nuwe koolstofbron geëvalueer word vir die gebruik in komposiet korrels moet die katalitiese effek van Fe_2O_3 en K_2CO_3 daarop geëvalueer word. Die reaksietempo van die kooks of steenkool in sisteem dan drasties kan verskil van die reaksietempo van die kooks of steenkool as dit alleen met dieselfde gassamestelling gereageer word.

Die katalitiese effek kan gelukkig egter apart gemeet word. Die byvoeging van die klein hoeveelhede het 'n groot effek maar verdere byvoeging het nie noemenswaardige bydra nie. By die lae persentasie van byvoeging word die struktuur van die reaksiesisteem nie versteur nie. Watter metode ook al gebruik word om die reaksietempo van die steenkool of kooks te beskryf, die katalitiese effekte kan ingebou word in die konstantes van so 'n model sonder om die aard van die model te verander.

Patrick en Wilkinson (1980) kon geen definitiewe bewyse vind in hulle toetse dat die asinhoud of assamestelling 'n effek op die vergassingsproses het nie. Hulle kon geen verband vind tussen die reaksietempo en alkali-inhoud nie. As dit egter beskou word saam met die werk van Chiu en Hong (1985) (dan lyk dit asof dit nie noodwendig die as van die steenkool of kooks is wat die katalitiese werking het nie maar dit wat bygevoeg word. Abel et al (1985) het in hulle werk oor die effek van kataliste gewys dat die katalis (K_2CO_3) die beskikbare oppervlak heelwat verlaag. Ten spyte daarvan is die reaksietempo van die gekataliseerde sintel een of twee ordes hoër as die ongekataliseerde sintel. Die feit word gereken as die rede hoekom die kataliste in sommige gevalle nie werk nie.

3.6.12 Samevatting

Die volgende afleidings word gemaak:

Daar is blykbaar nie 'n fundamentele meganisme wat in staat is om die chemiese reaksie korrek beskryf onder alle omstandighede nie.

'n Wyd uiteenlopend verskeidenheid teorie bestaan oor die chemiese reaksietempo. Daar is selfs geen duidelikheid oor presies wanneer massaoordrag wel belangrik is en wanneer dan nie.

'n Wye verskeidenheid empiriese en semi-empiriese modelle en vergelykings bestaan waar almal met 'n redelike mate van sukses toegepas is op die eksperimentele data.

In alle gevalle word die temperatuurafhanklikheid van konstantes in modelle bevredigend met die Arrhenius vergelyking beskryf.

Om in ag te neem dat die oorsprong van die kooks of sintel die vernaamste oorsaak van variasie in reaksiegedrag met CO_2 of H_2O is, is beste raad om 'n model te gebruik wat konstantes bevat wat dan vir elke kooks of sintel verskillend kan wees.

Of sekere metaaloksiede 'n katalitiese effek het en hoe groot die effek is sal vir elke kooks of sintel wat gebruik word bepaal moet word, aangesien feitlik onmoontlik is om te voorspel of die effek daar sal wees.

Dit is duidelik dat die modelle om vergassingstempo te bereken wat die verandering in struktuur en gassamestelling in ag neem die meeste sukses het.

Om te bepaal watter benadering geskik sal wees vir wanneer 'n reaksietempomodel gekies moet word behoort die volgende in gedagte gehou word:

- 1) Die temperatuurbereik van die sisteem - Die model moet temperatuurafhanklik wees
- 2) Die grootte van die koolstofkorrels. As dit relatief groot is behoort die model die diffusietempo van die reagensgasse in ag te neem
- 3) Die moontlikheid van katalitiese effekte. Hiervoor moet getoets word of die koolstofbron wat gebruik gaan word wel vatbaar is daarvoor.
- 4) Wanneer die tempo van vergassing as deel van 'n groter berekening vorm moet gekyk word na die sensitiwiteit van die groter berekening op variasies in die vergassingstempowaarde wat bereken word. D.w.s as die vergassings van steenkool 'n klein bydra maak tot die algehele tempo van die sisteem wat beskou word dan kan 'n relatief eenvoudige model net so goed werk

Daar is dus redelike vryheid in die keuse van 'n berekeningsmetode mits dit goed pas op data wat ingesamel is op toetse waar die toestande so na as moontlik is aan die eindelike bedryfstoeestand.



3.6.13 Ten laaste:

Die keuse het egter geval op die gebruik die volgende vergelyking.

$$r_1 = r_c = \frac{I_1 P_{CO_2}}{1 + I_2 P_{CO} + I_3 P_{CO_2}} \quad (24)$$

$$I_1 = k_1 C_T \exp(-E_1/RT)$$

$$I_2 = k_{12} \exp(-E_{12}/RT)$$

$$I_3 = k_{13} \exp(-E_{13}/RT)$$

Die vergelyking sal egter in die vorm gebruik word soos gegee in paragraaf 3.3.2

3.7 Reduksie van Ystererts

Aangesien dit in die studie gaan oor die reduksie van ystererts is dit belangrik dat ter agtergrond daar 'n algemene bespreking gegee word hieroor.

Die meeste werkers volgens Szekely et al (1976) beskryf die reduksietempo in terme van massaverlies met tyd. Aangesien die meganisme van reduksie drasties kan verander met temperatuur is verskillende tipes tempowette van toepassing by verskillende temperature. By laer temperature is diffusie van die reagensgasse veral van belang, by hoër temperature raak die chemiese reaksietempo's belangriker. In sommige gevalle is die film laag diffusie na die oppervlak van die vastestof die belangrikste stap

3.8 Ander reaksies

3.8.1 Steenkoolreaksies

Ander reaksies wat ook plaasvind is reaksie wat gepaard gaan met verhitting van steenkool

- Afkom van water en kristalwater.
- Afkom van koolwaterstowwe
- Ontbinding en verbranding van koolwaterstowwe

Die reaksies van koolwaterstowwe kan moontlik 'n beduidende effek hê. Met berekening kan aangetoon word dat in die geval van die Leeupan steenkool (samestelling in Tabel 9-3) daar ongeveer 'n verdere 15% koolstof in die koolwaterstowwe vervat is wat ook aan die vergassingsreaksie kan deelneem

Sommige van bogemelde reaksies is deur Sun en Lu (1993) in deeglikheid beskou of in ag geneem. Dit is ook aangetoon dat aard van die reaksies baie sterk afhanklik is van die bron van rou materiale.

3.8.2 Oplossing van koolstof in yster.

Daar kan verwag word dat daar wel koolstof in die yster kan oplos. Vir die situasie wat beskou word kan daar teoreties tot 4% C oplos in die austeniet wat vorm. Volgens **Figuur 3-10** sal daar egter nie veel oplos nie. Die yster fase word dus aanvaar as suiwer.

3.8.3 Waterstof

Die waterstof vervat in die koolwaterstowwe is heelwat minder as die koolstof massagewys maar vanwee die klein molêre massa is dit 'n beduidende hoeveelheid as al die waterstof aan die reduksieproses deel het. As al die waterstof as H_2 vrygestel word sal daar dus ongeveer 0.5 mol H_2 vir elke mol koolstof wees. As die reaksietempo's van C en H_2 dieselfde is sal die reaksie met H_2 dus 'n bydra van 33% maak tot die totale reaksietempo.

Aan die ander kant kan daar op grond van die kort tyd waarin die proses plaasvind aanneem dat die koolwaterstowwe vinnig afgedryf word en nie ontbind of aan reaksies deelneem nie. Dit kan gekontroleer word aan die voggehalte van die afgas aangesien die gereageerde waterstof as water sal afkom.

Die temperatuurveranderinge in die korrel soos wat voorspel word deur die model dui daarop dat in die tyd wat die meeste reduksie plaasvind die vlugstowwe reeds afgedryf moet wees. (Hoofstuk 6).

Dit is egter moontlik om die reaksie van waterstof ook in ag te neem in 'n model. Dit kompliseer die model egter heelwat.

3.8.4 Onsuierhede en Inerte materiaal

Daar is reaksies tussen die FeO en onsuierhede wat laersmeltende stowwe vorm. Die laagsmeltende stowwe is kan verantwoordelik wees vir die sagwording van korrels wat soms waargeneem is. Die laagsmeltende fases sorg vir 'n mate van versintering van die gedeeltelik gereageerde ertspartikels.

In die model is slegs twee van die onsuierhede beskou en wel net die termiese waarde daarvan. Daar is aanvaar dat dit geensins gereageer het nie. Die onsuierhede is Al_2O_3 en SiO_2 . Volgens die Elinghamdiagram sal onder die omstandighede wat die proses bedryf word die twee nie gereduseer word nie.

3.8.5 Swael

Opswaeling en ontswaling in direkte reduksie proses is ook deeglik bestuur deur onder andere Theron (1985). In hierdie studie is swael egter grootliks geignoreer omdat dit nie 'n beduidende effek op die hittebalans het nie. Swael is egter 'n wesentlike probleem soos wat uit die eksperimentele resultate blyk (paragraaf 5.2.3.1)

3.9 Beginsels van gasvloei en massaordrag effekte binne die korrel

Vanwee die aard van die reaksiesisteen sal daar deurentyd 'n netto produksie van gas in die korrel plaasvind. Daar sal dus 'n voortdurende gasvloei uit die korrel uit wees. Die gasvloei het 'n effek op die chemiese samestelling van die gas op elke posisie binne die korrel. Die tempo waarteen gas vloei het 'n effek op die reaksietempo's. Die gasvloei het ook 'n invloed op die hittebalans. Die volgende paar paragrawe word gespandeer om twee verskillende benaderings uit een te sit van hoe die gasvloei in die korrel bereken kan word. Ten eerste sal 'n algemene molbalans vir gasvloei afgelei word. Omdat 'n relatief klein volume van die sisteem beskou word, kan aanvaar word dat veranderinge in temperatuur of gasproduksie nie enige akkumulاسie van gas tot gevolg het nie. Wat die berekening van gasvloei betref kan 'n semi-gestadigde toestand beskou word. Wat dit in effek op neerkom is om die veranderinge van hoeveelhede en eienskappe van die gas wat op 'n gegewe moment in die korrel voorkom as weglaatbaar klein te beskou in vergelyking met die hoeveelheid gas wat reageer of uitbeweeg. Die volume vir gas binne 'n korrel is relatief klein in vergelyking met die totale gasvolume wat geproduseer word. Daarom word dit gereken as 'n goeie aanname om te maak. Dit blyk later duidelik uit die modelleringsresultate dat gasvloei-effekte soms net so groot effek op die chemiese samestellingsverspreiding het in die korrel as hitteoordrag.

Dit beteken dat op 'n tydstip t die volgende geld:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad p = \text{druk van gas}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \rho = \text{digtheid van gas}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad u = \text{spoed van gas}$$

Die afleiding van die molbalans vergelyking in die gasvloei lei tot die volgende differensiale massabehoudvergelykings in een dimensie.

In kartesiese koördinate:

$$g = \frac{\partial}{\partial x}(\rho \varepsilon u) \quad (25)$$

In sferiese koördinate:

$$g = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(\rho \varepsilon u r^2) \quad (26)$$

g = netto gasgenerasietempo by posisie x of r [$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$]

ε = porositeit van mengsel [dimensieloos]

ρ = digtheid van gas [mol/m^3]

u = werklike gasspoed [m/s]

r = radiale posisie [m]

x = lineêre posisie in rigting van gasvloei [m]

Vergelyking (25) gee massabehoud in 'n eendimensionele kartesiese koördinaatstelsel. Vergelyking (26) gee verwantskap vir radiale gasvloei massabehoud in 'n poreuse sfeer.

Die netto gasgenerasietempo kan bereken word deur die volgende vergelyking.

$$g = g_{\text{CO}} + g_{\text{CO}_2}$$

$$g_{\text{CO}} = [\text{netto CO generasietempo}] - [\text{netto CO verbruikstempo}]$$

$$g_{\text{CO}_2} = [\text{netto CO}_2 \text{ generasietempo}] - [\text{netto CO}_2 \text{ verbruikstempo}]$$

In terme van die molbalanse in paragraaf 3.3 sal dit dus as volg gedefinieer word

$$g_{\text{CO}} = 2r_1 - r_2 - r_3 - r_5 \quad (27)$$

$$g_{\text{CO}_2} = -r_1 + r_2 + r_3 + r_5 \quad (28)$$

3.9.1 Geen drukval

Die eenvoudigste benadering wat gevolg kan word is om te aanvaar dat die vloei so plaasvind dat die opbou van druk weglaatbaar is. Aangesien die gas groot temperatuurveranderinge kan ondergaan soos wat dit deur die pore beweeg sal die digtheid volgens die ideale gaswet dienooreenkomstig verander.

$$pV = nRT$$

met

p = druk [Pa]

V = volume [m^3]

n = aantal mol van gas [mol]

R = gaskonstante = 8.314 [J/K/mol]

T = absolute temperatuur [K]

Dit kan as volg omskryf word:

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (29)$$

met

$$\rho = \text{digtheid van gas [mol/m}^3\text{]}$$

Integrasie van vergelykings (25) en (26) deurgevoer word en vergelyking (29) invervang word:

In liniêre koördinate:

$$u = \frac{RT}{p\varepsilon} \int_0^x g \, dx \quad (30)$$

In sferiese koördinate:

$$u = \frac{RT}{p\varepsilon r^2} \int_0^r gr^2 \, dr \quad (31)$$

Omdat die twee gasse dieselfde vloeisnelheid moet hê sal die volumevloei van die twee gasse in verhouding wees tot hulle molfraksie. Bogenoemde vergelyking is slegs so van toepassing indien die temperatuur, porositeit en druk nie 'n funksie van posisie is nie.

$$X_{CO} = \text{volumevloei CO} / \text{volumevloei gas}$$

(In die volgende hoofstuk sal X_{CO} ook gebruik word om die fraksie CO op 'n gegewe posisie aan te dui. Alhoewel dit skynbaar verskil van bg. definisie is dit onder die aannames dieselfde waarde.) Die volgende kan aangetoon word vir sferiese koördinate:

$$X_{CO} = \frac{\int_0^r g_{CO} r^2 \, dr}{\int_0^r gr^2 \, dr} \quad (32)$$

3.9.2 Empiries berekende drukval

Die Ergun vergelyking gee die drukval in 'n gepakte bed as 'n funksie van die partikel groottes en vorm, die porositeit van die bed en die gasienskappe. Daar moet onthou word dat die slegs 'n empiriese vergelyking is wat bepaal is vir 'n bed van sferiese glaskorreltjies met 'n baie nou grootte verspreiding. Die vergelyking word egter m.b.v. die sg. vormfaktor en gebruik van 'n soort gemiddelde diameter aangepas om toegepas te word in realistiese situasies.

Ergun vergelyking:

$$-\frac{dP}{dx} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu u \lambda^2}{(d_p)^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho u^2 \lambda}{d_p} \quad (33)$$

$$-\frac{dP}{dx} = \text{Drukval. [Pa/m]}$$

ε = porositeit van mengsel [dimensieloos]

μ = viskositeit van gas.[kg/m/s]

ρ = digtheid van gas [**kg/m³**] (let op die verskil met die vergelykings in paragraaf 3.9.1)

u = komponent van snelheid in die rigting van drukval [m/s]

λ = vormfaktor vir onegalige partikels [dimensieloos]

d_p = gemiddelde sferiese partikeldiameter (gemiddelde volume area diameter) [m]

Die eerste term van die Ergun vergelyking bevat die effek van gasviskositeit op drukval en die tweede term die effek van vloeiensnelheid. By lae spoede is die tweede term weglaatbaar in vergelyking tot die eerste. By hoë spoede oorheers die tweede term weer.

Aangesien die spoed van die gas deur die pore relatief laag is kan die tweede deel van die Ergun vergelyking as benadering weggelaat word.

Vergelyking (31) moet aangepas word om feit dat die porositeit, druk en temperatuur 'n funksie van posisie is te kompenseer. Dit word dan as volg

$$u = \frac{R}{r^2} \int_0^r \frac{T}{\varepsilon p} g r^2 dr \quad (34)$$

Deur nou die spoed in te vervang soos bereken met vergelyking (34) word die volgende vergelyking verkry.

$$-\frac{dP}{dx} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \lambda^2}{(d_p)^2} \frac{R}{r^2} \int_0^T \frac{T}{\varepsilon P} g r^2 dr$$

Integrasie lewer die volgende resultaat:

$$P = P_0 + 150 \int_r^{r_0} \left[\frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \lambda^2}{(d_p)^2} \frac{R}{r^2} \int_0^T \frac{T}{\varepsilon P} g r^2 dr \right] dr \quad (35)$$

Randvoorwaardes:

$$P = P \text{ by } r = r$$

$$P = P_0 \text{ by } r = r_0$$

(r_0 = radiale posisie waar druk bekend is. In die geval sal dit op die oppervlak van die korrel wees waar die druk gelyk is aan atmosferiese druk)

Deur die waarde van die druk verkry met vergelyking (35) terug te vervang in vergelyking (34) word die gasspoed bereken.

Gevolgtik kan die molvloeiempo van die gas op elke posisie bepaal word. Die berekening het egter steeds die beperking dat die gasgenerasietempo indirek 'n funksie van die totale druk is. Aangesien dit nie 'n baie sterk afhanklikheid is nie, word bogenoemde berekening as akkuraat genoeg beskou.

Die praktiese wyse waarop bogenoemde vergelykings opgelos is, word in die volgende hoofstuk bespreek

3.10 *Strukturveranderinge*

3.10.1 *Krimping van korrel*

J.R Wynnyckyj en W.A McCurdy (1974) het 'n multidopmodel van 'n magnetietkonsentraatkorrel wat gevuur word opgestel. Die vergelykings beskryf verhitting van die korrel onder nie konstante termiese toestande. Parameters wat verteenwoordigend is van industriële skaal vuring en krimping-kinetiese data van 'n kommersiële magnetiet is in die berekening gebruik. Daar is gevind dat sterk temperatuurgradiënte in die korrel voorkom en gevolglike kraking in dopvorm van die korrels plaasvind indien die hitteoordrag tempo na die korrels hoog is. Hitteoordragtempo's na die korrels van tussen 85 en 400 W/m²/C en effektiewe geleidingskoëffisiënte van 0.25 tot 0.86 W/mC van die korrel is gebruik in die berekening. 'n Verskil van tot 20% in volume verandering tussen die buitenste en binneste materiaal is gevind. Die totale krimping is 30%. Ander werkers (Sundarmurti en Rao, 1996) het egter min tot geen krimping gevind. In sommige gevalle is daar self uitsetting waargeneem. In ander studies (Matthew en Hayes, 1991) waar die gasdeurlaatbaarheid van poreuse hematiet, magnetiet of wustiet bepaal is, is daar gevind dat beide inkrimping of uitsetting moontlik is. Dit hang baie af van die struktuur van die yster of wustiet wat vorm af of die korrels sal krimp of uitsit.

Krimping is dus op geen manier in ag geneem in die wiskundige model nie. Inagneming daarvan sou beteken die inbring van nog 'n empiriese konstante. Die bepaling van die konstante kon egter nie in die algemeen in verband gebring word met die krimping wat waargeneem is nie. Daarom is dit ge-ignoreer. Dit sou egter in gevalle waar die erts of reduseermiddel veroorsaak dat baie krimping of uitsetting plaasvind belangrik wees om dit in ag te neem omdat dit 'n direkte effek op hitteoordrag het. Eerstens wat betref die blootgestelde buite area en ook die temperatuurgradiënt na binne.

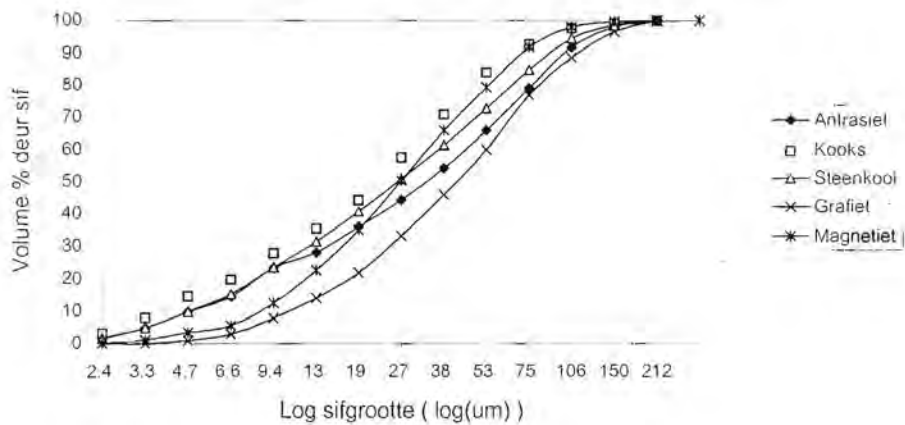
3.10.2 *Sintering van ertspartikels*

In die figuur hieronder word die grootte van die partikels aangedui. Die figuur toon by 'n heelwat hoë vlak van metallisasie dat die korreltjies baie vergroei het en feitlik geen partikels van die oorspronklike grootte waargeneem kan word nie. Die gemiddelde skynbare grootte is ongeveer 100 μm . Dit kan vergelyk word met die grootteverspreiding van die materiaal waaruit die korrels gemaak is. Die korreltjies is dus ongeveer vier maal groter as in die begin van die proses.

Figuur 3-8 Mikroskopiese beeld van korrel met 90% metallisasie by ongeveer 100x vergroting



Figuur 3-9 Grootteverspreiding van grondstowwe



Hierdie verskynsel is waargeneem in al die toetse waar 'n gevorderde vlak van metallisasie plaasgevind het. Dit is 'n sterk tekortkoming in die model se gasvloei en benadering van tempokonstantes van reduksie dat die effek nie in ag geneem word nie.

Die meganisme van sintering is egter kompleks en redelik onvoorspelbaar vanaf parameters soos temperatuur en beginsamestelling. Matthey en Hayes (1990) het in 'n redelik onlangse studie aangetoon hoe die struktuur van die Wustiet of yster wat vorm drasties kan verskil by verskillende temperature en gassamestellings.

Aangesien die porositeit van die materiaal in die korrel egter deurgaans bereken word op grond van die massabalans word daar in 'n groot mate vir die effek van sintering gekompenseer.

Sintering kan ook 'n baie groot effek op die effektiewe geleidingsvermoë hê. Die berekening van die porositeit maak ook hiervoor in 'n mate voorsiening.

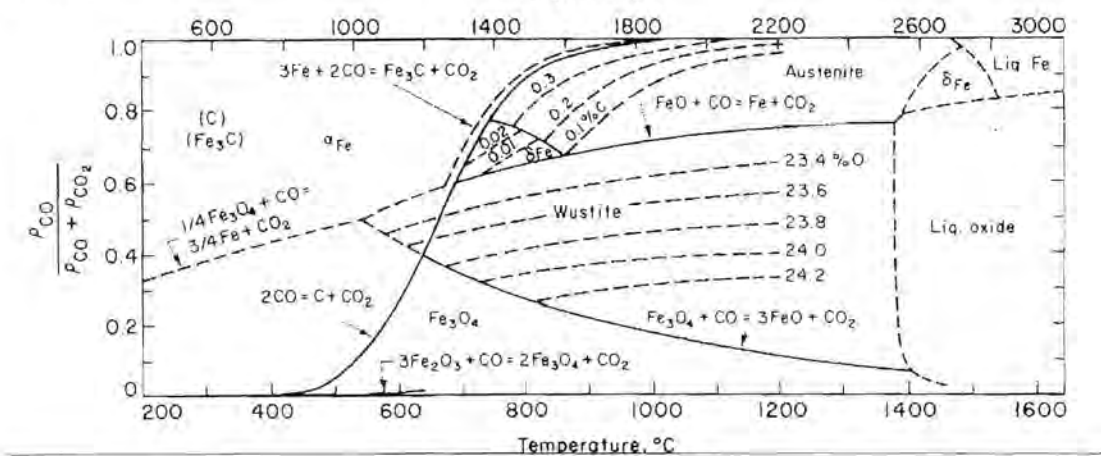
3.11 Termodinamiese aspekte in die studie

Die ewewigstoestande van al die betrokke reaksies en die hoeveelhede van energie wat daarmee gepaard gaan kan bepaal word deur na die termodinamiese aspekte te kyk

Ewewigte

Die ewewigte word opgesom in die bekende grafiek waar die stabiliteitsgebiede van die verskillende ysteroksiedes so wel as die Boudouard reaksie aangetoon word as 'n funksie van fraksie CO in die gas en temperatuur

Figuur 3-10 Termodinamiese ewewigte (Stephenson R L, 1980 p 33)



Vanaf bogenoemde figuur is die ewewigslyne afgelei vir die gebruik in die model.

Die FeO/Fe ewewigslyn word weergegee deur

$$X_3 = 6.339 \cdot 10^{-11} T^3 - 6.299 \cdot 10^{-7} T^2 + 0.00133T - 0.0426$$

Die Fe₃O₄/FeO ewewigslyn word weergegee deur

$$X_2 = -5.484 \cdot 10^{-10} T^3 + 2.100 \cdot 10^{-6} T^2 - 0.00294T + 1.560$$

Die temperatuur in die vergelykings is in grade Celsius Die magnetiet na yster ewewig word nie gebruik in die model nie. (Sien paragraaf 3.3.1)

Die termodinamika van koolstof en yster

Die waardes vir die H° waardes van die komponente is verkry vanaf die databasis van Melancon (1998) soos verkry uit die FACT - rekenaarpakket. Op die data is reguit lyne gepas. Die reguit lyne is gebruik in die wiskundige model. Die koëffisiënte van die reguit lyne word gegee in Tabel 4-3.