



**TEMPO VAN DIREKTE
REDUKSIE VAN KOMPOSIET
KORRELS**

deur

Emil E de Villiers

Voorgelê ter vervulling van 'n deel
van die vereistes vir die graad

**Magistergraad in Metallurgiese
Ingenieurswese**

in die

**Departement Metallurgiese
Ingenieurswese**

Fakulteit Ingenieurswese

Universiteit van Pretoria

1998

SAMEVATTING

Titel : Tempo van direkte reduksie van komposiet korrels
Leier: Prof P C Pistorius
Departement: Metallurgiese Ingenieurswese, Fakulteit Ingenieurswese
Universiteit: Pretoria, RSA
Graad: Magister in Metallurgiese Ingenieurswese

In hedendaagse ysterertsmyne is stukerts die hoofproduk met fyn hematiet as afvalproduk. Fyn magnetiet is ook 'n afvalproduk van kopermynbou in Phalaborwa. Hierdie fyn erts verteenwoordig groot onbenutte ysterbronne. Ystervervaardiging deur middel van die konvensionele hoogoondroete vereis die gebruik van kooks (wat in Suid-Afrika ook 'n kwynende grondstof is) en die sintering of agglomerasie van fyn ystererts. Vanweë die vereistes is die ontwikkeling van alternatiewe ystervervaardigingsprosesse 'n dringendheid. Een so 'n proses bestaan daaruit dat 'n mengsel van fyn ystererts en steenkool gemeng, verkorrel en verhit word. Tydens die verhitting vind reduksie van die ystererts plaas. Daarna word die produk warm gebrikketeer vir gebruik in staalvervaardiging. Tot op datum was daar min studie wat gefokus het op die kinetika van reduksie van fyn ystererts deur fyn steenkool binne-in die korrels self.

In hierdie studie word die reduksie kinetika van sferiese komposiet korrels van magnetiet en verskillende reduceermiddels beskou. Die korrels het 'n diameter van ongeveer 15 mm. Bykans volledige metallisasie word verkry na ongeveer 12 minute by 1300°C. Dwarssnitte van gedeeltelik gereageerde sferiese korrels toon aan dat reaksieverloop in die korrel nie homogeen is nie.

Om temperature te kan meet in so 'n komposiet soos die korrels is groter silindriese korrels is ook beskou. (Diameter ongeveer 60mm) Die temperatuurprofiel wat in die groot silindriese korrels ontwikkel is aanvanklik ongeveer parabolies, met 'n minimum in die senter van die korrel. Met verloop van tyd plat die profiel dan meer af. Hierdie profiel is tipies in 'n proses waar geleidingshitte-oordrag die algehele tempo beheer.

Hierdie eksperimentele resultate gee belangrike riglyne vir die ontwikkeling van 'n wiskundige model om die reaksies in 'n komposiet korrel te beskryf. Hierdie model dien as hulpmiddel om hierdie verskillende eksperimentele resultate met mekaar in verband te bring en die kinetika van die reaksiesistiem numeries te beskryf.

Die model is gebou op die basis van 'n hittebalans oor die korrel en molbalanse van al die betrokke spesies in die korrel. Die model bevat tempovergelykings vir die verskillende reduksie reaksies en die Boudouard reaksie. Hitteoordrag deur middel van geleiding binne in die korrel en straling na die korrel toe is van primêre belang.



Die ontwikkeling van drukgradiënte en gasvloei in die korrel word ook bereken. Die gas wat uit die korrel uitvloei het ook 'n belangrike bydrae tot die oorhoofse hittebalans.

Die vergelykings waaruit die model saamgestel is word opgelos deur die korrel op te deel in 'n aantal konsentriese doppe of silinders (soos 'n ui). Elk van die doppe word dan beskou as 'n ideale terugmengreaktor. 'n Hittebalans oor elke dop saam met 'n molbalans van elke spesie en elke dop word dan saam met die gasvloei en druk vergelykings gelyktydig opgelos vir elke tydsinterval. Die verloop van die reaksies en die ontwikkeling van temperatuur en drukgradiënte word sodoende met verloop van tyd bepaal. Die resultaat van die berekening is 'n beskrywing van die graad van metallisasie of die koolstofinhoud van die korrel as 'n funksie van aanvanklike samestelling, materiaaleienskappe, oondtemperatuur en die tyd wat die korrel in die oond is. Hierdie funksie kan gebruik word om enige proses wat van komposiet korrels gebruik maak te beheer.

Die studie toon aan dat 'n wiskundige model suksesvol aangewend kan word om die kinetika in 'n reagerende komposiet korrel te beskryf. Die studie toon ook dat die tempo van hitteoordrag na en in die komposiet materiaal belangrike faktore is in die ontwerp en optimalisering van prosesse wat van komposiet materiaal gebruik maak. Daar is gevind dat by korrels van die grootte wat getoets is hitteoordrag in die korrels nie beperkend is op die algehele reaksietempo nie. Volgens die modelvoorspellings is die temperatuurgradiënte in die korrel klein. Die studie toon ook aan dat die ontwikkeling van gasdruk binne die komposiet materiaal 'n belangrike invloed het op die chemiese samestelling daarvan. Daarvolgens kan die nie-homogene chemiese samestelling in die sferiese korrel verklaar word. Die bestaan van groot temperatuurgradiënte in die groot silindriese korrels toon aan dat in die groot korrels hitteoordrag in die korrels die algehele reaksietempo beperk.

Verdere studie in verband met komposiet korrels lê in die probleem van die hoë swaelinhoud van die produk. Daar is gevind dat die meeste swael in die steenkool wat as reduseermiddel gebruik word in die finale produk beland. In die toetse wat in die studie gedoen is, was die swaelinhoud te hoog vir gebruik in staalvervaardiging. Metodes om van die swael ontslae te raak kan 'n studie op sy eie regverdig.



SYNOPSIS

Title : Tempo van direkte reduksie van komposiet korrels
Leader: Prof P C Pistorius
Department: Metallurgiese Ingenieurswese, Fakulteit Ingenieurswese
University: Pretoria, RSA
Degree: Magister in Metallurgiese Ingenieurswese

Mining operations produce mainly lumpy iron ore of while most fine hematite is a waste product. Fine magnetite is a waste product of copper mining at Phalaborwa. These materials represent resources for ironmaking. Ironmaking by the conventional blast furnace route requires the use of coking coal (which is a rapidly depleting resource in South Africa) and the agglomeration/sintering of the fine iron ore. These requirements make the development of alternative ironmaking processes a matter of urgency. One such process consists of pelletizing a mixture of fine iron ore and coal, heating the pellets during which reduction takes place, followed by hot briquetting. To date few studies focused on the kinetics of reduction of fine iron ore by fine coal in the confines of the pellet.

In this study the reduction kinetics of single spherical composite pellets of magnetite and different carbonaceous reagents (with diameters around 15 mm) and large cylindrical composite pellets of hematite and coal (with diameter around 60 mm) were investigated. Cross sections of the semi-reacted spherical magnetite-coke pellets showed that compositional gradients developed during the process. Complete metallization was approached in about 12 minutes at 1300°C.

With the cylindrical pellet the radial temperature profile inside the pellet was measured. The temperature profiles that developed inside the large cylindrical pellets were approximately parabolic, with a minimum at the centre. With increasing time the profile flattened out. These profiles are typical of processes of which the rate is controlled by heat transfer.

These experimental results provide important clues for the development of a mathematical model for the reacting of composite pellets. By taking this into account a mathematical model was developed to describe the changes that occur with time. The model was developed on the basis of a mole balance for each species and a energy balance over the pellet. The model takes into account the rates of the various reduction reactions and the Boudouard reaction. The heat transfer by means of conduction inside the pellet and radiation towards the pellet is of primary importance. The development of pressure gradients and gas flow inside the pellet is also calculated. The flow of gas from the pellet contributes a large part of the heat balance.

The model is solved by dividing the pellet in concentric spheres or cylinders (Like an onion). Each of this is considered as an ideally mixed reactor. A heat balance and species balances are then solved simultaneously to calculate at each time interval the proceeding of the different reaction and the development of the temperature profile in the pellet. The result of the calculation is the description of the degree of metallization and carbon content of the pellet as a function of initial mixture composition, materials



properties, temperature of the furnace and the time which the pellet spent in the furnace. This function can be used to control any process that make use of composite pellets.

This study demonstrates that a mathematical model can successfully describe the kinetics of a roasting a composite pellet. The study eventually shows that the rate of heat transfer to the pellet is the most important factor in the designing and optimising of processes in which composite pellets is used. The development of pressure gradients in the pellets is the main cause of the composition gradient in the pellet.

It is recognised that the sulphur content of DRY produced with this process is too high to be useful in any steelmaking today. A separate study should be committed to find a way to get rid of it.



TREFWOORDE

Afrikaans

Wiskundige modellering, Direkte reduksie, Kinetika, Korrels, Ystererts, Steenkool, Reaktiwiteit, Reduseerbaarheid, Hitteoordrag, Direk gereduseerde yster

Engels

Mathematical Modelling, Direct Reduction, Kinetics, Pellets, Iron Ore Fines, Coal, Reactivity, Reducibility, Heat Transfer, Direct Reduced Iron (DRI), Simulation



DANKBETUIGINGS

Prof R.J. Dippenaar wil ek bedank vir die rigting wat hy my gegee het in die begin van die navorsing. Ook mnr NM Vegter bedank ek vir sy hulp.

Ek wil 'n woord van dank rig aan Prof. Pistorius wat deurgaans in die finale stadium van die navorsing my bygestaan het met raad.

Ek is ook baie dank verskuldig aan die twee voorgraadse studente wat my behulpsaam was met die uitvoer van sommige van die eksperimentele werk. Dit is MJ Pretorius en PJ Beukes

Aan ISCOR is ek baie dank verskuldig vir die befondsing van die studie.

Verder my dank aan almal wat behulpsaam was met die verskaffing en analises van grondstowwe



INHOUDSOPGAWE

1. Inleiding	8
1.1 Titel van verhandeling	9
1.2 Oorsprong van die studie	10
1.3 Direkte reduksie	10
1.4 Ander modelle	12
1.5 Agtergrond oor die FASTMET Proses	13
1.5.1 Proses beskrywing	13
1.5.2 Voordele van FASTMET Proses	14
1.5.3 Nadele van die proses	14
1.5.4 Voorgangers van die FASTMET proses	14
1.5.5 Opskaling	15
1.5.6 Bedryf	16
1.5.7 Nuutste oor Midrex se Fastmet proses	16
1.5.8 FASTMET Demonstrasieaanleg by Kakogawa	17
1.5.9 Voorgestelde Vooraf toetswerk	18
1.6 Ten slotte	19
2. Wiskundige Modelling	20
2.1 Ontwikkelingsproses	20
2.2 Die Beginsels van Simulasie wat van toepassing is:	21
2.2.1 Dinamiese balanse	21
2.2.2 Statistiese balanse “Black Box” en rekonsiliasie van data	21
2.2.3 Meganismes en parameters	21
2.3 Voordele van modellering:	22
2.4 Beperkings van modellering:	22
3. Beginsels en Vergelykings vir Berekening van Chemiese en Temperatuurveranderinge in 'n Komposiet Korrel	23
3.1 Inleiding	23
3.2 Balanse	23
3.3 Molbalans	23
3.3.1 Reaksies:	24
3.3.2 Reaksietempo's:	25
3.3.3 Die orde van die reaksies	27
3.4 Energiebalans	28
3.4.1 Inleiding	28
3.4.2 Geleiding	28
3.4.3 Konveksie	28
3.4.4 Industriële situasie	29
3.4.5 Eksperimentele werk in die studie	30



3.4.6	Vergelykings vir tempo waarteen hitte by rand oorgedra word	30
3.4.7	Stralingshitteoordrag	30
3.4.8	Konveksiehitteoordrag	31
3.4.9	Stralingshitteoordrag in 'n buisoond	33
3.4.10	Algemene hittebalans vergelyking	37
3.4.11	Ten laaste	39
3.5	Geleiding	40
3.5.1	Geleidingsvermoë van suiwer komponente	40
3.5.2	Weglaat van straling binne die korrel	41
3.5.3	Bepaling van effektiewe geleidingsvermoë binne die korrel	42
3.5.3.1	Beste model	43
3.5.3.2	Model wat gebruik is	44
3.6	Vergassing van steenkool of kooks	45
3.6.1	Inleiding	45
3.6.2	Reaksies	45
3.6.3	Kinetika	46
3.6.4	Kooksreaktiwiteit	47
3.6.5	Modelle wat die chemiese reaksietempo beskryf	48
3.6.6	Poordiffusie	51
3.6.7	Filmlaagdiffusie	52
3.6.8	Bron van kooks of steenkool	53
3.6.9	Temperatuur	54
3.6.10	Hitteoordragtempo	54
3.6.11	Katalitiese effekte	55
3.6.12	Samevatting	57
3.6.13	Ten laaste:	58
3.7	Reduksie van Ystererts	59
3.8	Ander reaksies	59
3.8.1	Steenkoolreaksies	59
3.8.2	Oplossing van koolstof in yster	59
3.8.3	Waterstof	60
3.8.4	Onsuiwerhede en Inerte materiaal	60
3.8.5	Swael	60
3.9	Beginsels van gasvloei en massaoordrag effekte binne die korrel	61
3.9.1	Geen drukval	62
3.9.2	Empiries berekende drukval	64
3.10	Struktuurveranderinge	66
3.10.1	Krimping van korrel	66
3.10.2	Sintering van ertspartikels	66
3.11	Termodinamiese aspekte in die studie	68
4.	Numeriese oplossing van massabalans en energiebalans	69
4.1	Eendimensionele diskretisering: Indeling van korrel in konsentriese doppe	69
4.1.1	Omgewing:	69



4.1.2 Opdeling	69
4.2 Uiteensetting van berekeninge	70
4.2.1 Voorafberekeninge	70
4.2.1.1 Tempokonstantes:	73
4.2.2 Iteratiewe berekeninge	74
4.2.2.1 Al die veranderlikes in elke reaktor:	74
4.2.2.2 Voltooiing van die materiaalbalans.....	75
4.2.2.3 Voltooiing van energiebalans.....	76
4.2.3 Finale berekeninge	76
4.3 Oplos van die tempovergelykings saam met die materiaalbalans.....	77
4.3.1 FeO-reduksie met Boudouardtempovergelyking	77
4.3.2 Verdere uitbreiding van oplossing	80
4.3.2.1 Meer reduksie reaksies wat deelneem	80
4.3.2.2 Verdere uitbreiding na Langmuir model vir koolstof vergassing	83
4.3.2.3 Uitbreiding na aaneengeskakelde reaktore.....	84
4.3.3 Volledige benadering	85
4.4 Bepaling van gasvloei tempo's en druk	86
4.5 Energiebalans	88
5. Eksperimentele Resultate	90
5.1 Inleiding	91
5.2 Effek van samestelling en tyd	92
5.2.1 Inleiding	92
5.2.2 Grondstowwe	92
5.2.3 Chemiese resultate.....	93
5.2.3.1 Swaelinhoud	93
5.2.3.2 Koolstofinhoud van produk.....	95
5.2.3.3 Metallisasie	96
5.2.3.4 Asinhoud	97
5.2.3.5 Akkuraatheid van resultate.....	98
5.2.3.6 Aanbevelings.....	99
5.2.4 Verder verwerking van resultate van eerste toetse	99
5.3 Effek van Temperatuur.....	100
5.3.1 Bepaling van kinetiese konstantes.....	101
5.4 Effek van korrelgrootte	102
5.5 Meting van konsentrasieprofiel in 'n gereageerde korrel	103
5.6 Meting van temperatuurgradiënte	104
6. Resultate van modellering	105
6.1 Toetsing van model aan eksperimentele resultate.....	106
6.1.1 Globale chemiese resultate.....	106
6.1.2 Samestellingsprofiel in korrels.....	107
6.1.3 Temperatuurprofiel in silindriese korrels	108
6.1.4 Grootte van korrels.....	109
6.2 Faktore wat algehele reaksietempo bepaal.....	110



6.2.1 Inleiding	110
6.2.2 Reaksietempo's van chemiese reaksies	110
6.2.2.1 Tempo van vergassing (Boudouard reaksie)	111
6.2.2.2 Tempo van reduksiereaksies	111
6.2.2.3 Afleiding	112
6.2.3 Tempo van hitteoordrag na en in die korrel	113
6.2.3.1 Inleiding	113
6.2.3.2 Normale situasie	114
6.2.3.3 Homogene temperatuur in korrel	116
6.2.3.4 Konstante temperatuur in korrel	118
6.2.3.5 Oondtemperatuur	119
6.2.3.6 Emisiwiteit	121
6.2.3.7 Geometriese vorm (Of effektiewe blootgestelde area)	122
6.2.3.8 Geleidingsvermoë	125
6.2.3.9 Grootte van korrels	126
6.2.3.10 Aanvanklike porositeit	127
6.2.4 Gasdruk in die korrel	127
6.3 Ander Effekte	130
6.3.1 Effek van vlugstowwe	130
6.3.2 Aanvanklike samestelling	130
7. Gevolgtrekkings	131
A. Literatuurlys:	132
9. Bylae	135
9.1 Eksperimentele metodes	135
9.1.1 Ondersoek na effek van tipe reduseermiddel	135
9.1.2 Eksperimentele metode vir bepaling van beeldanalises (volume fraksie metaal)	136
9.1.3 Eksperimentele opstelling vir enkelkorreltoetsing	138
9.2 Verder verwerkte resultate van eerste reeks toetse	140
9.3 Eksperimentele data in onwerkte vorm	141
9.3.1 Eerste reeks toets	141
9.3.2 Tweede reeks toetse onverwerkte data	144
9.3.3 Resultate van eerste reeks toetse verwerkte waardes	145
9.3.4 Mikroskopiese foto's van snitte deur korrels	146
9.4 Rekenaarprogram	153

LYS VAN FIGURE

<i>Nommer</i>	<i>Bladsy</i>
Figuur 1-1 Gedeeltelik gereduseerde ertspartikel	11
Figuur 3-1 Hitteoordrag na sfeer	33
Figuur 3-2 Skematiese voorstelling van 'n snit deur die helfte van die boonste helfte van die buisoond	35
Figuur 3-3 Temperature soos gesien deur korrel in buisoond.....	36
Figuur 3-4 Relatiewe hoeveel van wat korrel sien van oondoppervlak	36
Figuur 3-5 Hittevloed na korreloppervlak.....	37
Figuur 3-6 Effek van koue ente.....	37
Figuur 3-7 Voorstelling van model vir berekening van effektiewe geleidingsvermoë	43
Figuur 3-8 Mikroskopiese beeld van korrel met 90% metallisasie by ongeveer 100x vergroting	67
Figuur 3-9 Grootteverspreiding van grondstowwe	67
Figuur 3-10 Termodinamiese ewewigte (Stephenson R L, 1980 p 33)	68
Figuur 4-1 Opdeling in doppe	69
Figuur 4-2 Oplos van tempovergelykings met grafiese metode	82
Figuur 4-3 Verband tussen fraksie CO en 'n tempoparameter	85
Figuur 4-4 Voorstelling van energiebalans in diskrete vorm.....	89
Figuur 5-1 Swaelinhoud.....	94
Figuur 5-2 Totale koolstofinhoud	95
Figuur 5-3 Metallisasie	96
Figuur 5-4 Asinhoud	97
Figuur 5-5 Assamestelling	98
Figuur 5-6 Akkuraatheid van resultate.....	98
Figuur 5-7 Effek van oondtemperatuur op die reaksietempo (Kooks as reduktant).....	101
Figuur 5-8 Effek van korrelgrootte	102
Figuur 5-9 Temperatuurgradiënte in silindriese korrel	104
Figuur 6-1 Temperatuurdata passing.....	106
Figuur 6-2 Samestellingsprofiel deur korrel (antrasiet)	107
Figuur 6-3 Samestellingsprofiel deur korrel (grafiet)	107
Figuur 6-4 Temperature in silinderkoek.....	108
Figuur 6-5 Temperatuurprofiel in silinderkoek	108
Figuur 6-6 Effek van korrelgrootte	109
Figuur 6-7 Effek van variasie van tempokonstante van Boudouardreaksie op algehele reaksietempo	111
Figuur 6-8 Effek van variasie van tempokonstante van wustiet reduksie op algehele reaksietempo	112

Figuur 6-9 Effek van variasie van tempokonstante van magnetiet reduksie op algehele reaksietempo	112
Figuur 6-10 Verskillende hipotetiese gevalle.....	113
Figuur 6-11 Temperatuurverloop vir verskillende hipotetiese gevalle	114
Figuur 6-12 Normale Model	115
Figuur 6-13 Normale Model	115
Figuur 6-14 Homogene temperatuur model.....	117
Figuur 6-15 Homogene temperatuur model.....	117
Figuur 6-16 Konstante temperatuur model	118
Figuur 6-17 Konstante temperatuur model	119
Figuur 6-18 Effek van oondtemperatuur op algehele reaksietempo	120
Figuur 6-19 Effek van Oondtemperatuur op algehele reaksietempo	120
Figuur 6-20 Effek van verandering van emisiwiteit op algehele reaksietempo .	121
Figuur 6-21 Verandering in temperatuurprofiel met tyd in sferiese korrel.....	122
Figuur 6-22 Verandering van temperatuurgradiënt in komposiet plaat met tyd	122
Figuur 6-23 Chemiese toestande in sferiese komposiet met verloop van tyd....	123
Figuur 6-24 Chemiese toestande in plaatvormige komposiet met verloop van tyd	123
Figuur 6-25 Chemiese toestande in sferiese komposiet met verloop van tyd....	124
Figuur 6-26 Chemiese toestande in sferiese komposiet met verloop van tyd....	124
Figuur 6-27 Veranderinge in geleidingsvermoë met tyd	126
Figuur 6-28 Verandering in gasdruk in senter van korrel met verloop van tyd .	128
Figuur 6-29 Verandering van gasdruk in korrel met tyd as 'n funksie van posisie	129
Figuur 6-30 Byvoeging van ekstra koolstof.....	130
Figuur 9-1 Oond en aflussisteem	138
Figuur 9-2 Korrel in mandjie	139
Figuur 9-3 Kinetika met kooks as reduseermiddel.....	140
Figuur 9-4 Kinetika met antrasiet as reduseermiddel.....	140
Figuur 9-5 Kinetika met Leeupan steenkool as reduseermiddel	140
Figuur 9-6 Kinetika met grafiet as reduseermiddel.....	141
Figuur 9-7 Mikroskopiese beelde van 'n snit deur 'n gereageerde korrel (Antrasiet as reduseermiddel).....	146
Figuur 9-8 Mikroskopiese beelde van snit deur gereageerde korrel na 12 minute, Grafiet as reduseermiddel.....	149

LYS VAN TABELLE

<i>Nommer</i>	<i>Bladsy</i>
Tabel 1-1 Bedryfsparameters vir RHO (per ton DRY geproduseer) (Lepinsky, 1991).....	16
Tabel 1-2 Tipiese chemiese samestelling van ertse gebruik in Midrex se Fastmet toets (persentasie) (Hoffman en Harada, 1997).....	17
Tabel 1-3 Tipiese chemiese samestelling van steenkool gebruik in Fastmet toets	17
Tabel 3-1 Tipiese waardes wat in eksperimentele opstelling en model gebruik is	32
Tabel 3-2 Gasvloei in oondbuis se eienskappe	32
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)	32
Tabel 3-4 Reaksies van koolstof met oksiderende gasse	45
Tabel 4-1 Digtheid van verskillende komponente gebruik in model	71
Tabel 4-2 Massagetalle van komponente	71
Tabel 4-3 Liniere benaderings van entalpiefunksie van komponente (Melacon, 1998)	71
Tabel 4-4 Samestelling van komponente: Erts.....	72
Tabel 4-5 Samestelling van komponente : Steenkool	72
Tabel 4-6 Begintoestande van model	72
Tabel 4-7 Berekende hoeveelhede vir model	72
Tabel 4-8 Begin molhoeveelhede vir model	73
Tabel 4-9 Tempokonstantes van chemiese vergelykings.....	73
Tabel 5-1 Verwerkte chemiese analyses van voorlopige toetse	93
Tabel 5-2 Tempokonstantes van Boudouardreaksie bepaal uit eerste reeks toetse	99
Tabel 5-3 Fraksie metallisasie van korrels na verskillende tye by verskillende oondtemperature.....	100
Tabel 9-1 Samestellings wat getoets is (massa persent reduseermiddel)	135
Tabel 9-2 Chemiese analyses van grondstowe wat gebruik is in die toetswerk .	141
Tabel 9-3 Rou chemiese data eerste toetsreeks	142
Tabel 9-4 Grootteverspreiding van grondstowwe gebruik.....	143
Tabel 9-5 Partikelgrootte.....	143
Tabel 9-6 Partikel deurlaatgrootte.....	143
Tabel 9-7 Massadata in gram na verskikkelende tye van behandeling van met 15% kooks as reduseermiddel	144
Tabel 9-8 Massa in gram van toets waar korrel van verskillende diameters almal 10 minute by 1300°C behandel is (samestelling selfde as vorige).....	144
Tabel 9-9 Massadata van korrels getoets by verskillende temperature, materiaal selfde as in vorige tabel	145

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 proefskaal 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

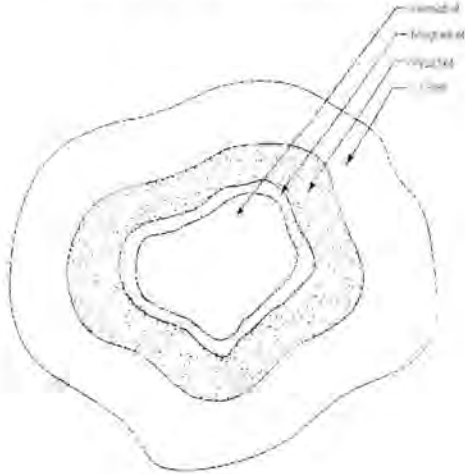
1. Dit is relatief vry van elemente soos koper, sink, tin, chroom, molibdeen en wolfram wat algemeen in skroot aangetref word.
2. Dit het 'n baie lae swaelinhoud
3. Laegraadse brandstowwe wat ongeskik is vir die konvensionele ystervervaardiging kan gebruik word
4. DRY is meer geskik vir sekere spesiale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

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 hooggoonde 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 binnediameter 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 aangeroer 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 appaaraat. 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 makroskopiese 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)

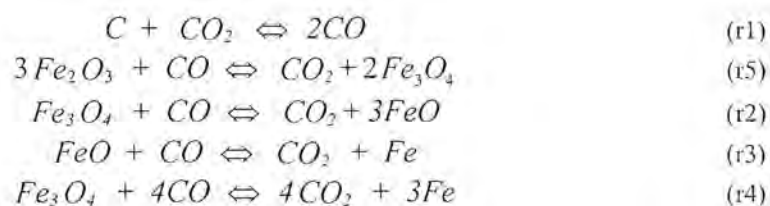
Ten eerste is dit nodig om te bepaal watter spesies daar balanse voor opgestel moet word. Alhoewel daar geringe hoeveelhede onsuiverhede en ook koolwaterstowwe in die praktyk teenwoordig is word vir die doel van die model slegs die volgende spesies in ag geneem naamlik:

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 hoogood 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 buisoond. 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 hitteoordrag situasie 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 simulatie 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 $1300^\circ C$ 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 buisoonopstelling (ongeveer 0.1 m/s, is die Reynoltsgetal ongeveer 6 wat dui op laminêre gasvloei-toestande. Met behulp van 'n empiriese verwantskap kan die hitteoordragskoëffisiënt bereken word (Holman, 1989, Hoofstuk 5). Met 'n oppervlaktemperatuur van tussen 300 en 1573 K varieer die hitteoordragskoëffisiënt van 7.7 na 6 $W/m^2/K$. 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 hitteoordragskoëffisiënt 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

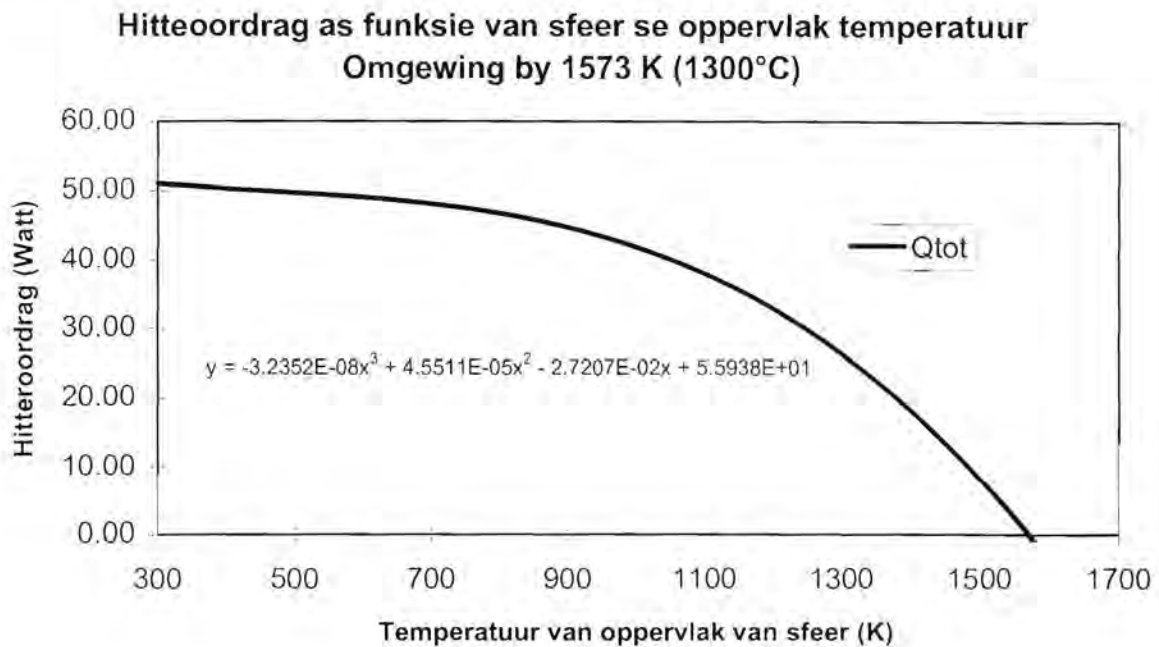
Vrystroom gaseienskappe		
Samestelling		100% N ₂
Temperatuur	Tomg=	1573 K
Prandtl	Pr=	0.72 []
Gasspoed	v=	0.1049 m/s
Renaultsgetal	Re=	6.348 [-]
Geleidingsvermoe	k=	0.0788 W/m/K

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 $\theta \in [0, \alpha]$

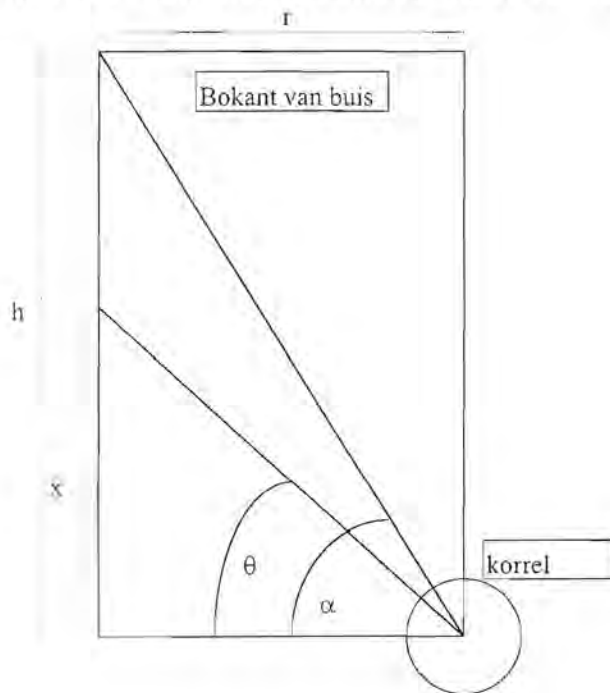
$$dF = \cos \theta \, d\theta$$

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

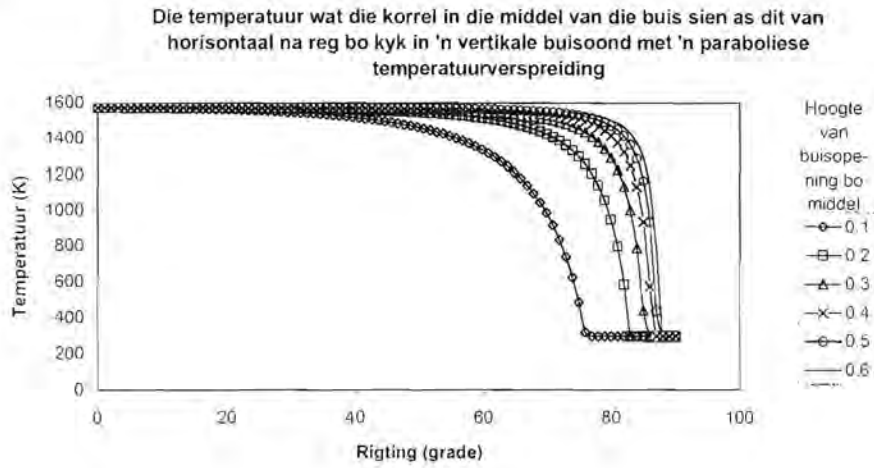
Figuur 3-2 Skematiese voorstelling van 'n snit deur die helfte van die boonste helfte van die buis



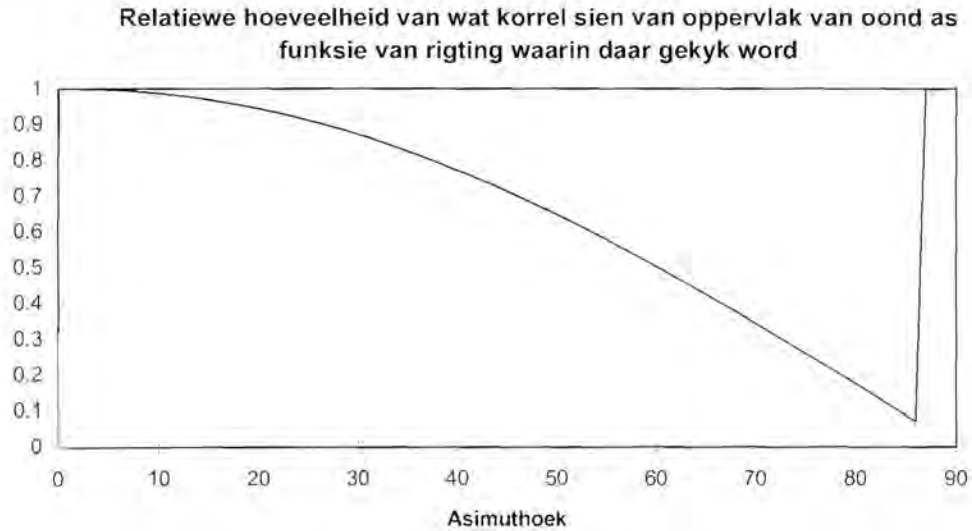
Figuur 3-2 toon aan wat die korrel "sien" as dit van horisontaal af boontoe kyk. Die temperature is bereken vir 'n oondbuis met diameter 5 cm en verskillende lengtes. Die hoogtes aangegee in die figuur is in meter. Uit die grafieke is dit duidelik dat die korrel eintlik baie meer sien van die temperature 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

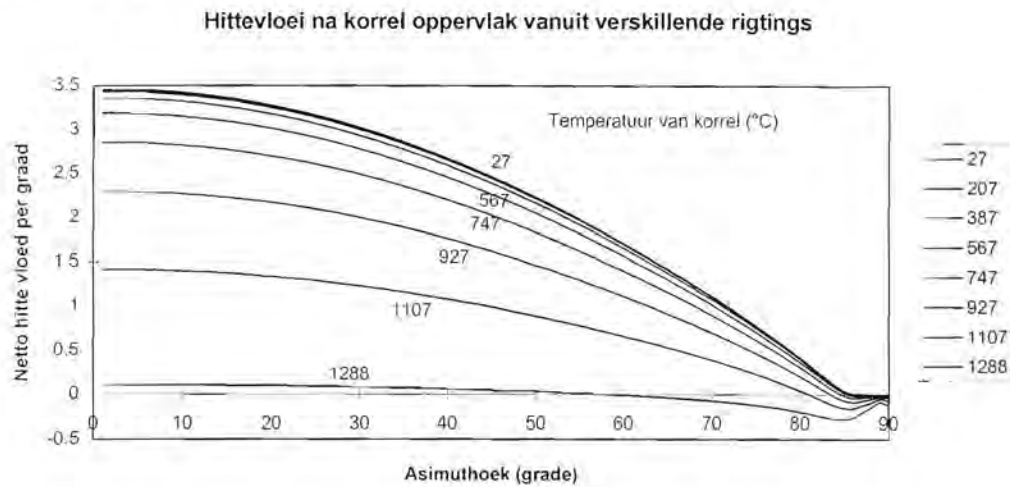


Figuur 3-4 Relatiewe hoeveel van wat korrel sien van oondoppervlak

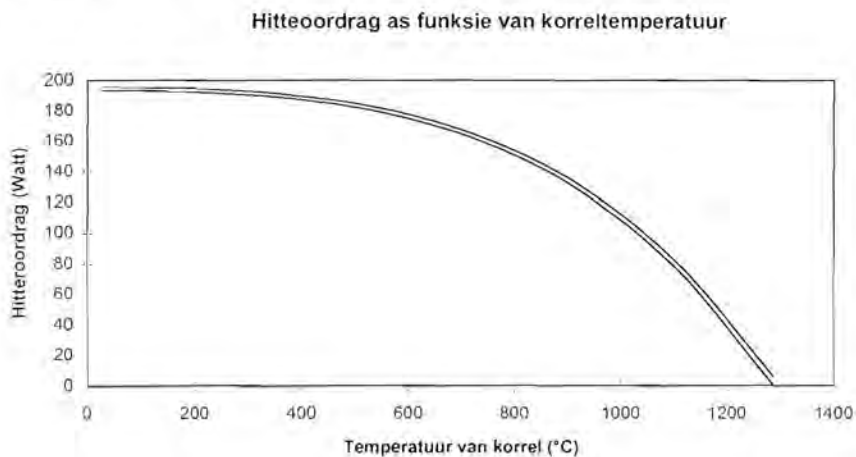


Die volgende figuur toon die hittevloed na die korrel as 'n funksie van rigting met verskillende korreloppervlak temperature

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

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

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 :

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

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 reaksiewarmtes 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

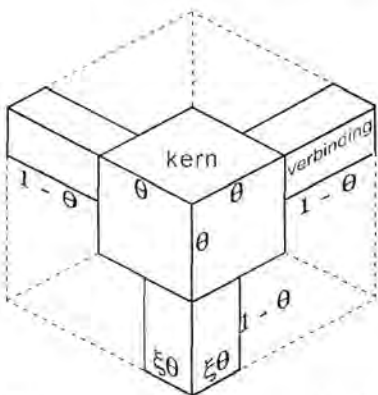
Akiyama et al (1992) gebruik 'n eenheidsel model om 'n benadering van die serie en parallel metode te verkry en dan die geometriese gemiddelde van die twee te bepaal. Die effektiewe geleidingsvermoë van die vastestof, k_s , word bepaal as die geometriese gemiddelde van die betrokke vastestowwe in die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

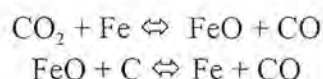
Die entalpie waarde van die reaksie is in slegs een van die studies wat beskou is gebruik en wel van die reaksie van kooks met lug by hoë temperature. Szekely en Aderbigbe (1982) en ook Iwanaga en Takatani (1989) het verwys na die effek van hitteoordrag tempo in die reaksie van CO₂ of H₂O maar hulle 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

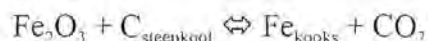
Dit is goed bekend dat die reaksie tussen koolstof en koolstofdoksied by temperature van ongeveer 1000°C baie vatbaar is vir die invloed van minerale kataliste.

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 verkooking 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:

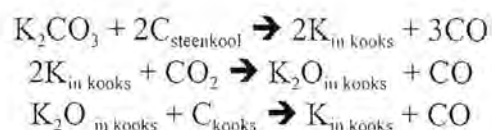


Volgens Chiu en Hong (1982) is die yster in die eerste plek afkomstig vanaf die reduksie van die Fe₂O₃.



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 Szekeley 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 geïgnoreer 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 *Beginnels van gasvloei en massaordrag effekte binne die korrel*

Vanwee die aard van die reaksiesistiem 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 gasvloeï [m]

Vergelyking (25) gee massabehoud in 'n eendimensionele kartesiese koördinaatstelsel. Vergelyking (26) gee verwantskap vir radiale gasvloeï 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 vloeï 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

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

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.

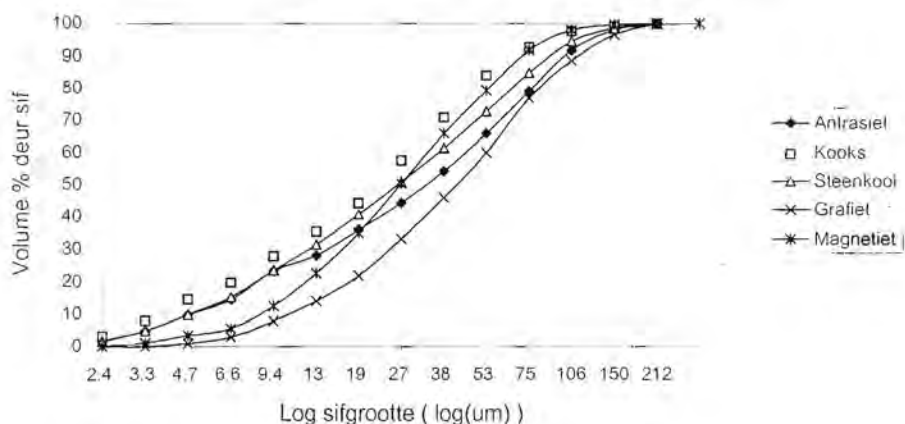
3.10.2 *Sintering van ertspartikels*

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.

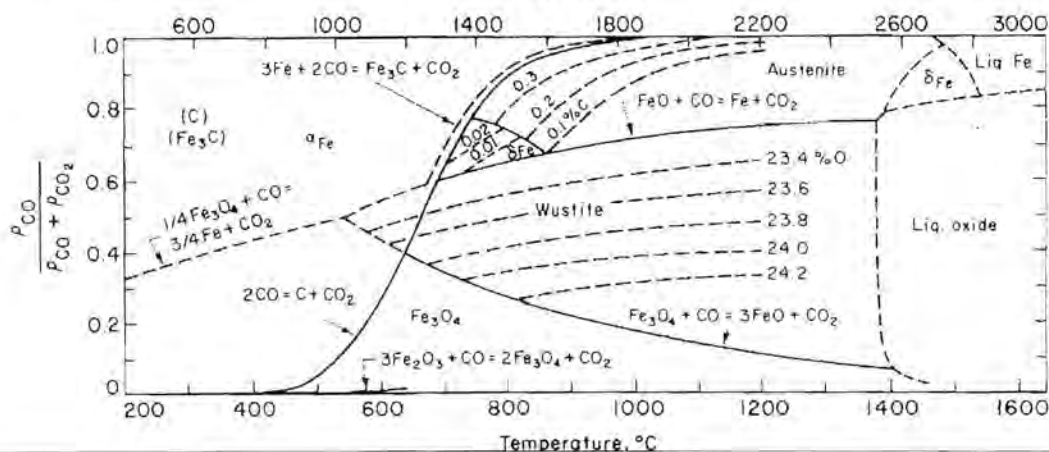
3.11 Termodinamiese aspekte in die studie

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 Melacon (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.

4. Numeriese oplossing van massabalans en energiebalans

Hierdie hoofstuk handel oor hoe te werk gegaan is om die berekening van die model prakties uit te voer. Om die numeriese berekening te kan uitvoer moet die differensiaalvergelykings gediskretiseer word. Daarvoor is dit nodig dat 'n gediskretiseerde model van die korrel beskou word.

4.1 Eendimensionele diskretisering: Indeling van korrel in konsentriese doppe

4.1.1 Omgewing:

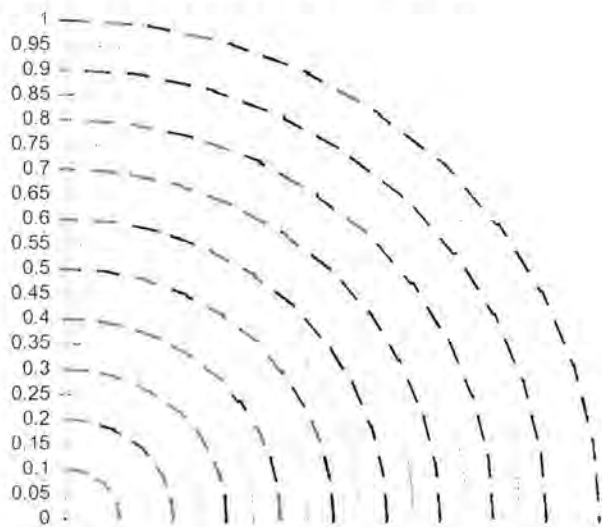
Die volgende aannames vereenvoudig die model heelwat.

- a) Die omgewing van die korrel is simmetries. Dit wil sê die omgewingstoestande na alle kante toe is dieselfde.
- b) Die begintoestande in die korrel en die beginsamestelling en eienskappe van die materiaal in die korrel is homogeen.

4.1.2 Opdeling

Dit het tot gevolg dat berekening as 'n eendimensionele berekening uitgevoer kan word deur die korrel as volg in te deel:

Figuur 4-1 Opdeling in doppe



Die skets toon 'n kwart van 'n snit deur die middel van 'n sferiese korrel. Die korrel word opgedeel in 'n klomp konsentriese doppe/skille. Die geskakeerde area is byvoorbeeld die snit deur die dop wat sesde binne af lê.

'n Dop word verder 'n reaktor genoem. Die basis vir die berekeninge is om elke dop as 'n ideale terugmengreaktor te beskou. Dit beteken alles in 'n dop is ideaal gemeng. Chemiese samestelling, temperatuur, druk ensovoorts is dus homogeen in 'n spesifieke dop. Elke dop het 'n binnegrens en buitengrens. Die ligte blou lyne dui die grense van die doppe aan. Die gestippelde lyne is die posisie waar die toestandseienskappe naamlik druk en temperatuur aan gekoppel word.

Die doppe is so gekies dat die heel binneste en heel buitense doppe slegs 'n halwe dikte is. Dit is om te verseker dat die verwysingsposisies eweredig vanaf die senter tot op die buitekant gespaseer is. In bg skets is die korrel in tien dele verdeel. Dit beteken dat in die geval daar elf doppe is wat beskou word.

Normaalweg vind gasvloei van binne na buite plaas. Hitteoordrag deur geleiding vind weer buite na binne plaas.

4.2 Uiteensetting van berekeninge

Die oplos van die oorhoofse materiaal en energiebals word op die volgende wyse opgebreek in kleiner makliker berekenbare dele. Ten eerste word voorbereidende berekeninge gedoen. Daarna volg die tydgebonde berekeninge. En laastens die finale berekeninge.

4.2.1 Voorafberekeninge

- Verkryging van alle data nodig om die berekeninge uit te voer. Dit is 'n prosedure waar die waardes direk in die program toegeken word of deur die gebruiker van die program toegevoer word of vanaf 'n databasis af ingelees word.
- Opstel van alle omgewingsveranderlikes: Dit is die temperatuur, druk, stralings en konveksie-eienskappe van die omgewing en die grootte van korrel.
- Opstel van berekeningsveranderlikes: tydstepgrootte (Δt), aantal reaktore in berekening ($n+1$), grootte van reaktor (Δr), aantal tydsteppe of die verlangde graad van reduksie
- Opstel van tempokonstantes: Toeken van waardes aan konstantes vir al die verskillende tempovergelykings
- Opstel van reaktor veranderlikes: Begintemperatuur en druk in al die reaktors/doppe
- Opstel van materiaalhoeveelhede aan die begin van reaksie: berekening van globale hoeveelhede van mengsel molhoeveelhede van al die komponente en gasse

Die volgende tabelle toon aan watter waardes in die voorafberekening bepaal word en dui ook sekere tipiese waarde aan vir die waardes. Al die tabelle bevat



die kolomme wat die simbool vir 'n waarde, 'n numeriese voorbeeld van wat daardie waarde tipies in die berekening is, en 'n kolom wat die eenhede van daardie hoeveelheid aandui.

Tabel 4-1 Digthede van verskillende komponente gebruik in model

Komponent eienskappe

Digthede

Komponent naam	Simbool	Waarde	Eenhede
Koolstof	ρ_C	1870	kg/m ³
Hematiet	$\rho_{Fe_2O_3}$	5000	kg/m ³
Magnetiet	$\rho_{Fe_3O_4}$	5600	kg/m ³
Wustiet	ρ_{FeO}	6000	kg/m ³
Yster	ρ_{Fe}	7800	kg/m ³
Silika	ρ_{SiO_2}	2700	kg/m ³
Alumina	$\rho_{Al_2O_3}$	3200	kg/m ³
vlugstof	ρ_v	900	kg/m ³

Tabel 4-2 Massagetalle van komponente

Massagetalle van komponente

Mc	Mc	12	g/mol
MFe ₂ O ₃	MFe ₂ O ₃	159.7	g/mol
MFe ₃ O ₄	MFe ₃ O ₄	231.55	g/mol
MFeO	MFeO	71.85	g/mol
Mfe	Mfe	55.85	g/mol
MSiO ₂	MSiO ₂	46	g/mol
MAI ₂ O ₃	MAI ₂ O ₃	101.96	g/mol
MCH ₄	MCH ₄	16	g/mol

Tabel 4-3 Liniere benaderings van entalpiefunksie van komponente (Melacon, 1998)

Entalpiefunksies

		A	B	
Vaste C Entalpie	H _c	20.8	-8037.2	J/mol
Fe ₂ O ₃ Entalpie	HFe ₂ O ₃	146.1	-872650	J/mol
Fe ₃ O ₄ Entalpie	HFe ₃ O ₄	207	-1183400	J/mol
FeO Entalpie	HFeO	66.7	-297030	J/mol
Fe Entalpie	HFe	40.4	-14475	J/mol
SiO ₂ Entalpie	HSiO ₂	68.9	-931430	J/mol
Al ₂ O ₃ * Entalpie	HAl ₂ O ₃	122.9	-1717600	J/mol
CO Entalpie	H _{co}	32.6	-121000	J/mol
CO ₂ Entalpie	H _{co2}	52.3	-411400	J/mol

Die entalpiewaarde van elke komponent in die reaksiesistiem word baie vereenvoudig. Dit word as 'n liniere funksie van temperatuur geskryf bv $H_c = AT + B$ soos gegee in die tabel. Die temperatuur is in Kelvin.



Tabel 4-4 Samestelling van komponente: Erts

Erts massafraksie samestelling

C	EEc	0 %
Fe2O3	EEFe2O3	97 %
Fe3O4	EEFe3O4	0 %
FeO	EEFeO	0 %
Fe	EEFe	0 %
SiO2	EESiO2	2 %
Al2O3	EEAl2O3	1 %

Die waardes word direk voor 'n toets of toetslopie toegevoer. Dit is die chemiese analise van die erts wat gebruik word in die toetse.

Tabel 4-5 Samestelling van komponente : Steenkool

Steenkool massafraksie samestelling

Vaste C	CCc	81 %
Fe2O3	CCFe2O3	0 %
Fe3O4	CCFe3O4	0 %
FeO	CCFeO	0 %
Fe	CCFe	0 %
SiO2	CCSiO2	5 %
Al2O3	CCAl2O3	3 %
Kool Vlugstof	CCv	11 %

Die waardes word direk voor 'n toets of toetslopie toegevoer. Dit is die chemiese analise van die steenkool wat gebruik word in die toetse.

Tabel 4-6 Begintoestande van model

Massaverhouding erts tot steenkool	v	10.00	-
radius van korrel	R	0.0075	m
Beginporositeit	e	0.202	-
Aanvanklike Temperatuur	T0	300	K
Pakkingsdigtheid	pd	3268.085	kg/m3

Tabel 4-7 Berekende hoeveelhede vir model

Volume	Vt	1.77E-06 m3
Vastestof volume	Vts	1.41E-06 m3
Beginmassa Erts	mE	5.250 g
Beginmassa Steenkool	mK	0.525 g

Die totale volume van die korrel word direk vanaf die gegewe radius bepaal.

$$V_i = \frac{4}{3} \pi R^3$$

Die vastestofvolume word bepaal met die beginporositeit

$$V_{ts} = eV_i$$

Die beginmassas van die erts en steenkool is ietwat ingewikkelder omdat die samestellings van die erts en steenkool en die digthede van al die komponente in die berekening voorkom

$$m_{\text{Steenkool}} = \frac{V_{\text{ts}}}{v \sum_{k=C}^{Al_2O_3} \left(\frac{EE_k}{100\rho_k} \right) + \sum_{k=C}^{Al_2O_3} \frac{CC_k}{100\rho_k}}$$

$$m_{\text{Erts}} = v m_{\text{Steenkool}}$$

EE_k is die massapersentasie van komponent k in die erts

CC_k is die massapersentasie van komponent k in die steenkool

ρ_k is die digtheid van komponent k

Tabel 4-8 Begin molhoeveelhede vir model

C	nC	0.035566 mol
Fe ₂ O ₃	nFe ₂ O ₃	0.000000 mol
Fe ₃ O ₄	nFe ₃ O ₄	0.023839 mol
FeO	nFeO	0.000000 mol
Fe	nFe	0.000000 mol
SiO ₂	nSiO ₂	0.002845 mol
Al ₂ O ₃	nAl ₂ O ₃	0.000670 mol
Vlugstowwe	nv	0.007113 mol

Die hoeveelhede is as volg bereken. Byvoorbeeld vir die aantal mol vaste koolstof

$$n_C = \frac{m_{\text{Erts}} EE_C + m_{\text{steenkool}} CC_C}{100M_C}$$

Die beginkonsentrasies van al die komponente word bepaal deur die molhoeveelhede deur die totale korrel volume te deel. (L.W nie vastestof volume nie)

Die enigste ander konstantes wat nog bykom hou verband met die tempovergelykings en hitteoordragseienskappe.

4.2.1.1 Tempokonstantes:

Die tempokonstantes is word gewoonlik empiries bepaal. Die volgende tabel lys al die tempokonstantes wat voorkom in die model Die waardes wat hier toegeken is, is die wat gebruik is in die modelleringsoefening:

Tabel 4-9 Tempokonstantes van chemiese vergelykings

		K	E
Boudouard reaksie:	k1	150	90000
	I2, I3	0	0
Hematiet reduksie na Magneniet	k5	1300	61000
Magnetiet reduksie na Wustiet terugwaartse reaksie	k2	1.00E+07	200000
	k21	3000	80000
Wustiet reduksie na yster terugwaartse reaksie	k3	1.00E+07	190000
	k31	500	70000

Die eenhede van K is [$\text{m}^3/\text{atm}/\text{sekonde}$] en vir E is dit [Joule]

Die waardes is verkry deur die model te pas op massaverlies resultate by verskillende temperature (Figuur 6-1). Hierdie konstantes is dan ook gebruik in die model om die voorspelling van die model te toets aan ander eksperimentele resultate. Waar die grondstowwe egter verskil het is ander tempo konstantes bepaal. Die waarde daarvan het egter nie veel verskil van bogemelde nie.

Die waardes van die aktiveringsenergie vir die Boudouard reaksie stem ooreen met die waarde wat gebruik is deur Sun and Lu (1996).

Die terugwaartse reaksietempo's is alleenlik gekies met 'n positiewe waarde om die berekeninge te stabiliseer in die oplos van die model. Onder die reduserende omstandighede wat getoets is gevind dat die numeriese waardes daarvan geen effek op die resultate van die model nie. As dit egter weggelaat word, is die numeriese berekening nie meer stabiel nie. Die konstantes I_1 en I_2 uit die Langmuir vergelyking (24) is in die geval albei nul gekies by gebrek aan data om hulle vas te pen.

4.2.2 Iteratiewe berekeninge

Die tweede stap is 'n herhaaldelike berekening wat die verandering in toestande (druk, temperatuur, porositeit, geleidingsvermoë, gasspoede) en materiaalhoeveelhede (molhoeveelhede van alle moontlike spesies en gasdrukke) binne die reaktore bepaal. Die hittebalans oor elke dop saam met 'n molbalans van elke spesie en elke dop word dan saam met die gasvloei en druk vergelykings gelyktydig opgelos vir elke tydsinterval. Die verloop van die reaksies en die ontwikkeling van temperatuur en drukgradiënte word sodoende met verloop van tyd bepaal. Die resultaat van die berekening is 'n beskrywing van die graad van metallisasie of die koolstofinhoud van die korrel as 'n funksie van aanvanklike samestelling, materiaaleienskappe, oondtemperatuur en die tyd wat die korrel in die oond is.

4.2.2.1 Al die veranderlikes in elke reaktor:

Die volgende veranderlikes is van toepassing in die berekening:

- a) Temperatuur
- b) Totale Gasdruk
- c) Parsiële gasdrukke van CO en CO_2
- d) Molhoeveelhede van elke chemiese komponent: Dit sluit in: Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , FeO , Fe , C , CO , CO_2 , SiO_2 en Al_2O_3
- e) Die geleidingsvermoë van die vastestof
- f) Viskositeit van gas in pore
- g) Die porositeit van die materiaal in die reaktor
- h) Die reaksietempo's van alle moontlike reaksies
- i) Die fraksie CO in die gas
- j) Die tempokonstantes van al die moontlike reaksies (funksie van temperatuur)

- k) Die gasgenerasietempo's van CO en CO₂
- l) Die molale gas invloed tempo's van CO en CO₂
- m) Die ewewigsdrukke van sommige van betrokke reaksies
- n) Entalpiewaardes van al die komponente
- o) Totale entalpiewaarde van al die komponente
- p) Verandering in entalpiewaarde

In elke tydstap word 'n materiaalbalans en 'n energiebalans gedoen oor die hele korrel.

4.2.2.2 Voltooiing van die materiaalbalans

Die materiaalbalans word op elke reaktor afsonderlik uitgevoer maar met die berekening van druk en gasvloei word die aaneenskakeling in ag geneem. Die volgende bespreking is 'n uiteensetting van die volgorde waarin die berekeninge uitgevoer moet word.

A Waardes uit vorige tydstap

Die volgende waardes in elke reaktor uit die vorige tydstap word as toevoer gebruik

- a) Temperatuur
- b) Totale Gasdruk
- c) Molhoeveelhede van elke chemiese komponent: Dit sluit in: Fe₂O₃, Fe₃O₄, FeO, Fe, C, CO, CO₂, SiO₂ en Al₂O₃
- d) Die porositeit van die materiaal in elke reaktor

B Direkte berekening

Die volgende word dan direk hieruit bereken

- a) Die tempokonstantes van al die moontlike reaksies (funksie van temperatuur)
- b) Die ewewigsgasdrukke van sommige van betrokke reaksies

C Oplos van tempovergelykings

Met laasgenoemde bekend word twee vergelykings gelyktydig opgelos (vergelykings (13) en (18)) in elke reaktor wat dan die waardes van die volgende bepaal:

- a) Die fraksie CO in die gas
- b) Die gasgenerasietempo's van CO en CO₂
- c) Die reaksietempo's van alle moontlike reaksies

D Verandering in molhoeveelhede

Met die reaksietempo's as bekendes kan in elke reaktor die verandering in molhoeveelheid van elke chemiese vastestof komponent bepaal word.

E Bereken verandering in entalpiewaardes

Die volgende word nou direk hieruit bereken:

- Die geleidingsvermoë van die vastestof
- Die porositeit van die materiaal in die reaktor
- Entalpiewaardes van al die komponente
- Totale entalpiewaarde van al die komponente
- Verandering in entalpiewaarde

F Bepaling van gasvloei en druk

Met laasgenoemde bekend kan ook die volgende in dié volgorde bereken word:

- Die molêre gas invloeiempo's van CO en CO₂ in elke reaktor
- Totale gasdruk in elke reaktor
- Parsiële gasdrukke van CO en CO₂ in elke reaktor

4.2.2.3 Voltooiing van energiebalans

Die energieverandering in elke reaktor wat verband hou met die verandering in vastestof komponenthoeveelhede en die vloei van energie deur die beweging van die gasse word dan nou in die energiebalans gebruik om die temperature in al die reaktore vir die volgende tydstap te bereken.

4.2.3 Finale berekeninge

Nadat die iteratiewe berekening herhaaldelik toegepas is totdat 'n sekere tyd of vlak van reduksie bereik is, word die finale berekening uitgevoer. Dit is alleen berekening wat behels die verwerking van die molhoeveelhede en energiehoeveelhede om die resultaat van die berekening in 'n nuttige en verstaanbare vorm om te sit

4.3 Oplos van die tempovergelykings saam met die materiaalbalans

Vervolgens sal nou sommige van die berekeningstappe wat meer aandag vergoed duidelik uiteensit sodat dit vir die leser moontlik sal wees om self die berekening te kan uitvoer met al die inligting wat so gestel word.

Om die tempovergelykings saam met die molbalans op te los blyk nie so eenvoudig te wees nie vanweë twee redes,

- Die konsentrasies van die tussenprodukte nl CO en CO₂ het 'n invloed op die tempo's van al die reaksies
- Die tempovergelyking wat gekies word vir die reaksies van ysteroksiedes word bepaal deur die partiële CO druk.

Die metode van berekening sal hier stelselmatig ontwikkel word. Ten eerste sal 'n heel eenvoudige stelsel gebruik word. Daarna sal die geleidelik uitgebrei word om die omvattende stel vergelykings te gee waarmee die molbalans deurgans bereken kan word soos wat die reaksies verloop. Die gassamestelling word deurgans bepaal deur die relatiewe gasgenerasietempo's van die twee gasse CO en CO₂. Dit volg uit die bespreking in paragraaf 3.9

4.3.1 FeO-reduksie met Boudouardtempovergelyking

Eerstens word 'n sisteem beskou waarin daar homogene toestande heers met die enigste komponente CO₂, CO, FeO en C

Die twee tempovergelykings is:

$$r_1 = k_1 C_C P_{CO_2} \quad (1)$$

met

r_1 = tempo van verbruik van C [mol / s]

k_1 = tempokonstante

C_C = konsentrasie van C [mol / m³]

P_{CO_2} = partiële CO₂ druk [atm]

en

$$r_3 = k_3 C_{FeO} (P_{CO} - P_{CO}^0) \quad (2)$$

met

r_3 = tempo van verbruik van FeO

k_3 = tempokonstante

C_{FeO} = konsentrasie van FeO [mol / m³]

P_{CO} = partiële CO druk [atm]

P_{CO}^0 = partiële ewewigs CO druk [atm]

Die definisie vir r_1 soos hierbo gebruik het nie eintlik gronde nie maar word hier gebruik om die oplossings metode duidelik te maak. Bogenoemde definisie vir r_3 is as daar genoegsame CO is. As die CO partiële druk laer is as die ewewigs partiële druk dan sal die tempo nie meer eweredig wees aan die hoeveelheid FeO nie maar aan die hoeveelheid Fe (heroksidasië). Die vergelyking is dus nou

$$\begin{aligned} r_3 &= k_3 C_{FeO} (P_{CO} - P_{CO}^o) \text{ as } P_{CO} \geq P_{CO}^o \\ r_3 &= k_{31} C_{Fe} (P_{CO} - P_{CO}^o) \text{ as } P_{CO} < P_{CO}^o \end{aligned} \quad (3)$$

Volgens bogenoemde stel vergelyking is die gasgenerasie tempo's as volg

$$\begin{aligned} g_{CO} &= 2r_1 - r_3 \\ g_{CO_2} &= r_3 - r_1 \\ g &= g_{CO} + g_{CO_2} = r_1 \end{aligned}$$

Die fraksie CO in die gas kan nou gedefinieer word

$$X = X_{CO} = \frac{g_{CO}}{g} = \frac{2r_1 - r_3}{r_1} \quad (4)$$

en ook

$$X = \frac{P_{CO}}{P_T}$$

met $P_T = \text{totale druk}$

Deur vergelyking (4) te omskryf kan 'n tweede vergelyking vir r_3 verkry word

$$\begin{aligned} r_3 &= (2 - X)r_1 \\ &\text{of} \\ r_3 &= (2 - X)(P_T - P_{CO})k_1 N_C \end{aligned} \quad (5)$$

Ter wille van eenvormigheid moet vergelyking (3) en (5) in terme van X_{CO} en P_T geskryf word:

$$r_3 = \begin{cases} k_3 C_{FeO} P_T (X - X_3) \text{ as } X \geq X_3 \\ k_{31} C_{Fe} P_T (X - X_3) \text{ as } X < X_3 \end{cases} \quad (6)$$

$$r_3 = k_1 P_T C_C (2 - X)(1 - X) \quad (7)$$

$$\text{met } X_3 = \frac{P_{CO}^o}{P_T}$$

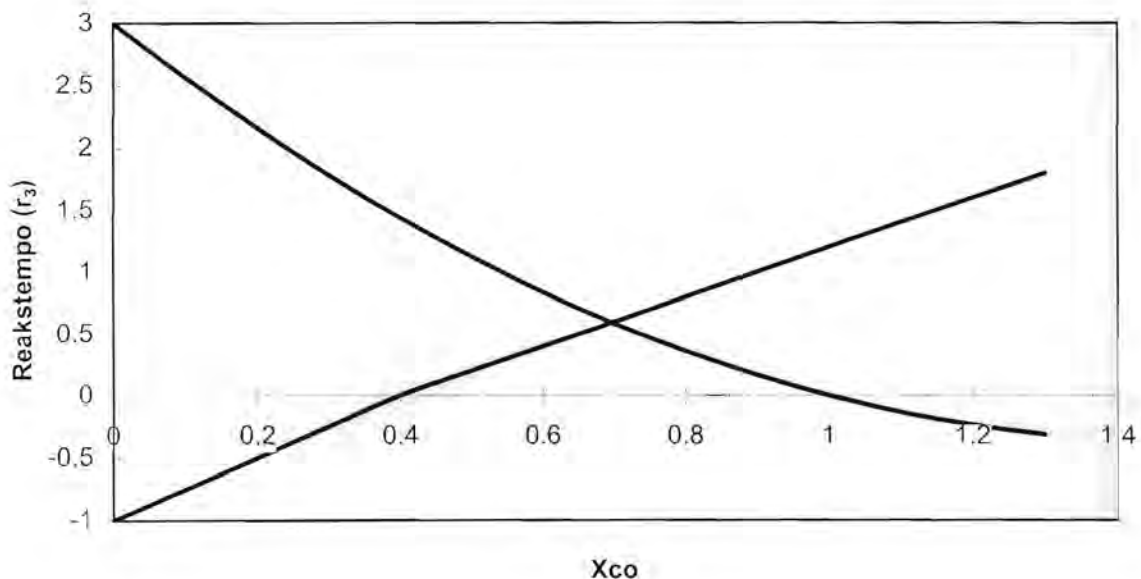
Omdat vergelyking (6) 'n saamgestelde funksie is dat die aard daarvan afhanklik is van die waarde van X_{CO} kan dit nie in terme van X_{CO} geskryf word nie. In vergelyking (7) is die waardes k_1 , P_T en C_c altyd positief. Dié uitdrukking vir r_3 is 'n dus 'n positiewe kwadratiese funksie van X_{CO} met draaipunte by 1 en 2. (Natuurlik kan X_{CO} nie groter as 1 wees nie) Die funksie is dus altyd positief in die gedefinieerde gebied. Die oplossing word verkry waar die twee funksies mekaar sny. Die tweede deel van vergelyking (6) is dus nie van toepassing in die geval nie omdat dit nêrens die ander funksie kan sny nie (Dit is altyd negatief terwyl die ander funksie altyd positief is in die gebied van X 'e waarbinne hulle kan sny). Grafies word dit duidelik. LW onderstaande grafiek is net 'n voorstelling ter verduideliking. Dit blyk duidelik uit die grafiek dat slegs die voorwaartse reaksie van die FeO reaksie van toepassing is. Daarom kan daar deur vergelyking (6) se eerste deel en vergelyking (7) gelyk te stel die volgende uitdrukking verkry word:

$$r_3 = \frac{A + B + 2A(1 - X_3) - \sqrt{(A + B)^2 + 4AB(1 - X_3)}}{2A/B} \quad (8)$$

$$X = \frac{3A + B - \sqrt{(A + B)^2 + 4AB(1 - X_3)}}{2A}$$

$$A = k_1 C_C P_T$$

$$B = k_3 C_{FeO} P_T$$



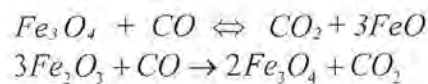
4.3.2 Verdere uitbreiding van oplossing

Die volgende uitbreidings op bogenoemde kinetiese model is nodig:

- Meer reduksie reaksies wat deelneem wat CO verbruik en CO₂ produseer
- 'n Raker beskrywing van r_1 met die Langmuir verwantskap is nodig
- Die uitbreiding van berekening na seriegeskakelde reaktore

4.3.2.1 Meer reduksie reaksies wat deelneem

Om 'n volledige oplossing te kan gee in die geval waar hematiet en/of magnetiet die reagens is moet daardie reaksies ook in ag geneem word.



Dieselfde wat vir r_3 geld, geld ook vir r_2 (reduksietempo van magnetiet)

Die reaksietempo word deur 'n saamgestelde vergelyking gegee

$$\begin{aligned} r_2 &= k_2 C_{Fe_3O_4} (P_{CO} - P_{CO_2}) \text{ as } P_{CO} \geq P_{CO_2} \\ r_2 &= k_{21} C_{FeO} (P_{CO} - P_{CO_2}) \text{ as } P_{CO} < P_{CO_2} \end{aligned} \quad (9)$$

Die reduksiereaksie van hematiet sal egter net in die een rigting verloop

$$r_5 = k_5 C_{Fe_2O_3} P_{CO} \quad (10)$$

Die netto CO gasgenerasie word dan gegee deur

$$g_{CO} = 2r_1 - r_2 - r_3 - r_5$$

Die totale gasgenerasie is steeds

$$g = r_1$$

In terme van X word vergelyking (9) en (10) as volg geskryf

$$\begin{aligned} r_2 &= \begin{cases} k_2 C_{Fe_3O_4} P_T (X - X_2) \text{ as } X \geq X_2 \\ k_{21} C_{FeO} P_T (X - X_2) \text{ as } X < X_2 \end{cases} \\ r_5 &= k_5 N_{Fe_2O_3} P_T X \end{aligned}$$

Ter wille van eenvoud word die volgende konstantes gedefinieer

$$D = k_2 C_{Fe_3O_4} P_T$$

$$D_1 = k_{21} C_{FeO} P_T$$

$$E = k_3 C_{Fe_2O_3} P_T$$

Definieer nou r

$$r = r_2 + r_3 + r_5$$

Dus volg

$$X = \frac{2r_1 - r}{r_1} \quad (11)$$

Dit is dus identies aan die geval van waar net FeO as ysterbron gebruik is (vergelyking (7))

$$r = A(1 - X)(2 - X) \quad (12)$$

Die ander funksie wat hiermee moet sny is egter ingewikkelder om te bepaal. Daar is nou twee ewewigs CO drukke wat 'n rol speel of dan twee ewewigs CO fraksies. Vir Fe_3O_4 reduksie is dit X_2 en vir FeO reduksie is dit X_3 .

Fraksie CO	Reaksie 2	Reaksie 3	Reaksie 5
$X > X_3$	$r_2 = D(X - X_2)$	$r_3 = B(X - X_3)$	$r_5 = EX$
$X > X_2$ en $X < X_3$	$r_2 = D(X - X_2)$	$r_3 = B_1(X - X_3)$	$r_5 = EX$
$X < X_2$	$r_2 = D_1(X - X_2)$	$r_3 = B_1(X - X_3)$	$r_5 = EX$

Gevolgtik lyk r as volg

$$r = \begin{cases} (B + D + E)X - BX_3 - DX_2 & \text{as } X \geq X_3 \\ (B_1 + D + E)X - B_1X_3 - DX_2 & \text{as } X \geq X_2 \text{ en } X < X_3 \\ (B_1 + D_1 + E)X - B_1X_3 - D_1X_2 & \text{as } X < X_2 \end{cases} \quad (13)$$

Dit is 'n saamgestelde reguit lyn vergelyking met knakpunte by X_2 en X_3

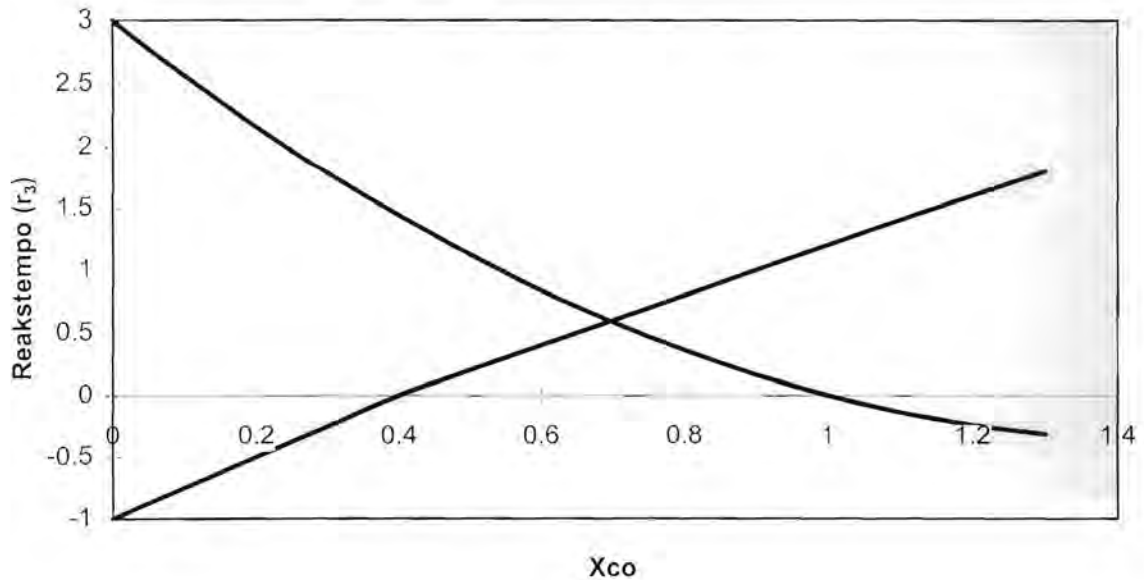
Die volgende eienskappe van vergelyking (13) kom na vore:

- Let op dat met al die konstantes slegs positief sal die grootste waarde van r nul wees. Dit gebeur waar $X=0$.

- b) Uit die fisiese sisteem volg dit ook dat X_2 en X_3 altyd kleiner as een sal wees. Dit beteken dat by $X=1$ sal r altyd groter of gelyk aan nul wees. (Die feite word later gebruik)

Wanneer vergelyking (12) en (13) aan mekaar gelyk gestel word, word die X_{CO} waar die reaksies plaasvind bepaal. Dit is maklik om dit grafies te bepaal.

Figuur 4-2 Oplos van tempovergelykings met grafiese metode



In die geval is $X_2 = 0.7$ en $X_3 = 0.3$

Aangesien A, B, B_1, D, D_1 en E altyd positief is sal daar altyd net een snypunt moontlik wees. Om die probleem algebraïes op te los is bietjie ingewikkelder. Omdat dit nie vooraf bekend is watter van die drie dele van vergelyking (13) van toepassing is nie moet die snyding van vergelyking (12) met al drie dele van vergelyking (13) bepaal word. Die snypunt wat dan 'n X lewer wat in die betrokke deels se toelaatbare gebied lê is dan die regte snypunt. Dit is dan nou vergelyking (14)

$$X = \frac{3A + B + D + E - \sqrt{(A + B + D + E)^2 + 4AB(1 - X_3) + 4AD(1 - X_2) + 4AE}}{2A} \quad (14)$$

'n Ander metode is deur 'n numeriese soekfunksie wat maklik toegepas kan word omdat X slegs tussen nul en een kan wees.

4.3.2.2 Verdere uitbreiding na Langmuir model vir koolstof vergassing

Weereens moet daar gelet word op die feit dat die Langmuir meganisme nie van toepassing is op die Boudouard reaksie nie. Die vorm van die vergelyking is egter nuttig tot 'n sekere mate van akkuraatheid. Daar moet ook onthou word dat al die konstantes is afhanklik van die materiaal. Nou word die reaksietempo van die Boudouard reaksie as volg beskryf

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

of

$$r_1 = \frac{I_1(1 - X_{CO})}{1 + I_2 X_{CO} + I_3(1 - X_{CO})}$$

Dit kan ook as volg geskryf word

$$r_1 = \frac{A(1 - X_{CO})}{A_1 X_{CO} + A_2}$$

met

$$A = I_1 = k_1 C_C e^{\frac{RT}{E_1}}$$

$$A_1 = I_2 - I_3$$

$$A_2 = 1 + I_3$$

Deur bg definisie van r_1 in vergelyking (11) in te vervang volg:

$$r = \frac{A(1 - X)(2 - X)}{A_1 X + A_2} \quad (15)$$

Vergelyking (15) sal ook positiewe waardes vir r lewer in die gebied waar X geldig is. Dit is egter onderhewig aan die voorwaarde dat $A_1 X + A_2 > 0$ vir waardes van X van nul tot een. Dit beteken dat A_1 moet altyd groter wees as nul en in terme van die Langmuir konstantes beteken dit dat I_1 moet groter wees as nul, I_2 moet groter wees as een en I_3 moet groter wees as min een. Die bepaalde konstantes is in alle gevalle so in die praktyk.

Deur nou vergelyking (13) en (15) gelyktydig op te los word die fraksie CO bepaal waarby die sisteem reageer en met daardie waarde kan die reaksietempo's van al die reaksies bepaal word.

4.3.2.3 Uitbreiding na aaneengeskakelde reaktore

In die veelvuldige reaktore geval het die invloeiende gas se samestelling ook 'n invloed op die gas samestelling in 'n reaktor.

In die berekening waar die reaksies in aaneengeskakelde reaktore (doppe) plaasvind, word die gassamestelling in die reaktor nie meer net deur die gasgenerasietempo's bepaal nie maar ook deur die tempo waarteen gasse invloei. Die beginsels van die ideale terugmengreaktor model word toegepas. Die tempo waarteen gas invloei word weergegee deur die simbool w en die eenhede is mol per sekonde.

Die temperature wat in die vorige tydberekeningstap bepaal is word gebruik vir die berekening van die X 'e in die aaneengeskakelde reaktore. Daar is gevind dat dit nie die stabiliteit van die oorhoofse berekening omvergooi nie.

Vir eers word die eenvoudige Boudouard reaksie model en slegs FeO as ysterbron beskou.

Nou is

$$X = \frac{g_{CO} + w_{CO}}{g + w}$$

$$w = w_{CO} + w_{CO_2}$$

Dus

$$X = \frac{2r_1 - r_3 + w_{CO}}{r_1 + w} \quad (16)$$

of

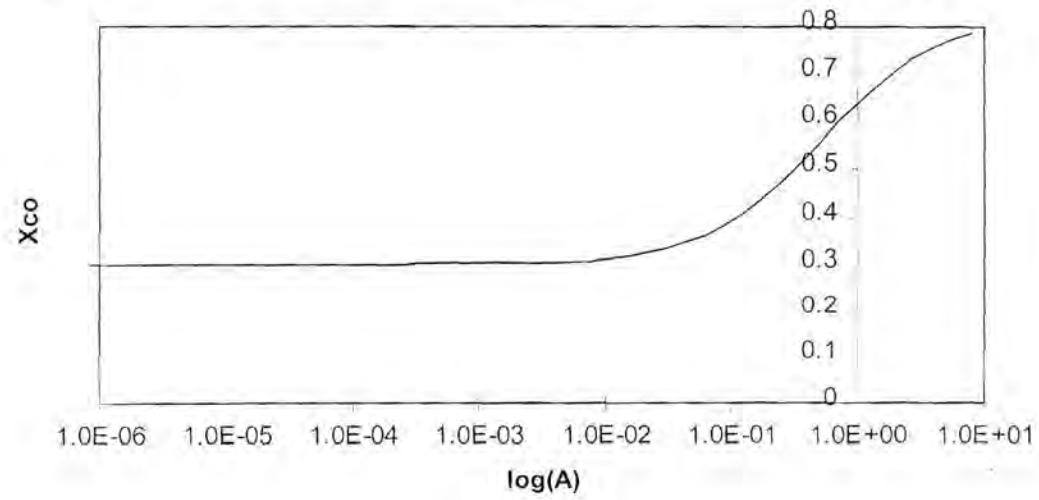
$$r_3 = \frac{w + A + B + 2A(1 - X_3) - \sqrt{(A + B)^2 + 6wA + 2wB + w^2 + 4AB(1 - X_3) - 4Aw_{CO}}}{2A/B}$$

$$X = \frac{A + 3B - \sqrt{(A + B)^2 + 6wA + 2wB + w^2 + 4AB(1 - X_3) - 4Aw_{CO}}}{2A} \quad (17)$$

Dit is duidelik uit die vergelyking dat as w en w_{CO} neig na nul dan word die vergelyking identies aan vergelyking (14). In die geval waar die reaksietempo's neig na nul omdat die konstantes A en B na nul neig sal $r_3=0$ en in die limiet waar $B=0$ en A neig na nul word die uitdrukking vir X_{CO} identies aan vergelyking (16). Dit is nie so duidelik omdat dit lyk asof daar deling deur nul sal plaasvind as A nul word. Met sekere gekose waardes van $w=1$ $w_{CO}=0.3$ en

$B=0$ is X_{CO} as 'n funksie van A geplot. Dit kan in die volgende figuur gesien word

Figuur 4-3 Verband tussen fraksie CO en 'n tempoparameter



4.3.3 Volledige benadering

Met die Langmuir verwantskap vir die Boudouard reaksie word die uitdrukking vir r die volgende:

$$r = 2 \frac{A(1-X)}{A_1 X + A_2} + w_{CO} - \left(\frac{A(1-X)}{A_1 X + A_2} + w \right) X \quad (18)$$

Mits A_1 en A_2 gekies word sodat $A_1 X + A_2 > 0$ sal die volgende eienskappe van vergelyking (18) na vore kom:

a) By $X=0$ reduceer vergelyking (18) na die volgende

$$r = \frac{2 + w_{CO} A_2}{A_2} A$$

Met die $A_2 > 0$ en $w_{CO} \geq 0$ sal r altyd groter wees as nul.

b) By $X=1$ reduceer vergelyking (18) na die volgende

$$r = w_{CO} - w$$

Per definisie is $w_{CO} \leq w$ en dus sal $r \leq 0$

Dit kan nou aangetoon word dat vergelyking (13) en vergelyking (18) altyd 'n snypunt vir X tussen nul en een sal hê. Die rede is dat albei die funksies kontinu is en by $X=0$ is die waarde van r bereken met vergelyking (18) altyd groter as die bereken met vergelyking (13) en by $X=1$ geld die omgekeerde. Daaruit volg dat die twee lyne moet dus iewers tussen $X=0$ en $X=1$ sny.

Die resultaat van die voorafgaande bespreking is dus om aan te toon dat die tempo's van die reaksies in 'n bepaalde reaktor bereken kan word deur eers die fraksie CO te bepaal deur gelyktydige oplossing van:

$$r = \begin{cases} (B + D + E)X - BX_3 - DX_2 & \text{as } X \geq X_3 \\ (B_1 + D + E)X - B_1 X_3 - DX_2 & \text{as } X \geq X_2 \text{ en } X < X_3 \\ (B_1 + D_1 + E)X - B_1 X_3 - D_1 X_2 & \text{as } X < X_2 \end{cases}$$

en

$$r = 2A \frac{1-X}{A_1 X + A_2} + w_{CO} - \left(A \frac{1-X}{A_1 X + A_2} + w \right) X$$

Dit is moontlik om die twee vergelykings aan mekaar gelyk te stel en algebraïes op te los vir X soos wat in die eenvoudiger gevalle voorgestel word. Aangesien dit egter ingewikkelder berekeninge sal verg as 'n numeriese metode sal 'n numeriese metode gevolg word.

4.4 Bepaling van gasvloei tempo's en druk

Daar moet onthou word dat die waardes van die gasinvloei tempo 'n gesommeerde effek is van die gasgenerasietempo's, verandering in druk en verandering in temperature in die reaktors wat stroomop ten opsigte van dié een lê. Indien die akkumulatie effekte as gevolg van druk en temperatuur verandering van een stap na die volgende weglaatbaar in verhouding tot die tempo waarteen gas gegenereer word en deur die korrel vloei, dan word die bepaling van die gasvloei tempo egter eenvoudig. Die hoeveelheid gas wat dan uit 'n reaktor vloei is dan gelyk aan die som van die gas wat invloei en die gas wat gegenereer word in die reaktor.

Vir reaktor i is

$$w_{i+1} = g_i + w_i \quad (19)$$

of

$$w_{j+1} = \sum_{k=1}^j g_k = \text{molvloei tempo waarteen gas uit reaktor } j \text{ uitbeweeg}$$

Verder is $w_{CO\ i} = wX_{i-1}$

In die geval van die model waar die korrel benader word deur aaneengeskakelde terugmengreaktore moet die heel binneste reaktor se tempo en CO fraksie eerste bepaal word. Vir die binneste reaktor is die gasinvloei tempo natuurlik altyd nul. Die gasinvloei vir die volgende reaktor is dan bekend. Op die wyse kan die tempo's en gassamestellings in al die reaktore bepaal word.

Vanwee die netto produksie van gas in die proses word die vloei van gas gedryf deur die drukval. Gasdiffusie is 'n relatief klein effek in die proses. Die model van die aaneengeskakelde reaktore word nou gebruik. Die spoed waarteen gas van een reaktor na die volgende vloei word bepaal deur die drukverskil tussen die twee reaktore, die weerstand teen vloei en die tempo waarteen gas gegenereer word. Vanwee die aanname dat gasakkumulatie-effekte uitgelaat word geld vergelyking (19) in elke reaktor.

Die spoed waarteen die gas vloei en die druk wat sodoende ontstaan word bepaal met behulp van die vereenvoudigde Ergun vergelyking (tweede term is weggelaat)

$$-\frac{dP}{dr} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \lambda^2}{(d_p)^2} u$$

Deur lg. vergelyking direk te diskretiseer word verkry:

$$-\Delta P = \left(150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \lambda^2 \Delta r}{(d_p)^2} \right) u$$

Die “weerstand” teen vloeï kan gedefinieer word as

$$\Omega = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \lambda^2 \Delta r}{(d_p)^2}$$

Δr = radiale afstand tussen twee doppe se noduspunte. Dit is deurgans dieselfde

Die verband tussen gasspoed en druk is nou eenvoudig:

$$-\Delta P = \Omega u$$

Dus

$$P_{i+1} = P_i - \Omega_i u_i$$

met

$$u_i = \frac{w_{i+1}}{A_i} \frac{RT_i}{P_i} \quad (20)$$

A_i = area van buitenste grens van reaktor i

w_{i+1} = molêre gasuïtvloei tempo uit reaktor i

Met die gebruik van vierkantsvoltooiing en die weglaat van irrelevante wortels word die volgende verkry

$$P_i = \frac{1}{2} P_{i+1} + \frac{1}{2} \sqrt{P_{i+1}^2 + 4 \left(RT_i \Omega_i \frac{w_{i+1}}{A_i} \right)} \quad (21)$$

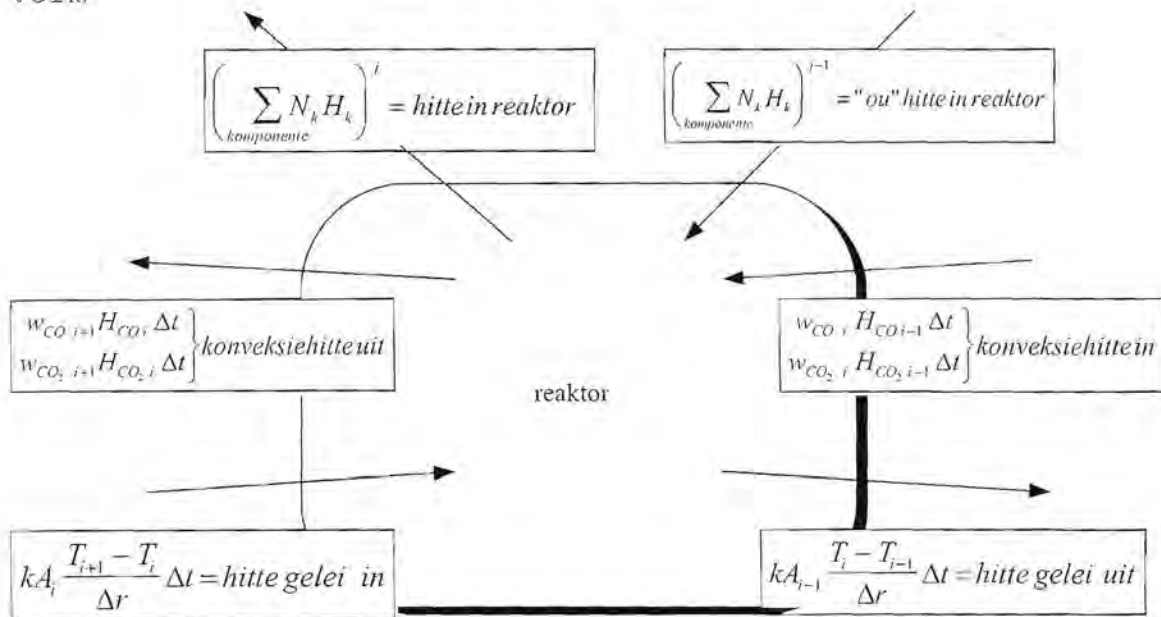
Die druk van die buitenste reaktor of dop is bekend naamlik die druk van die omgewing. Al die ander terme kan direk bereken word en die drukke in al die reaktore kan dan van buite na binne bereken word.

4.5 Energiebalans

Die oplos van die energiebalans is moeiliker as die oplos van die massabalans omdat die differensiaalvergelyking 'n term bevat wat 'n tweede afgeleide is van temperatuur terwyl die massabalansvergelykings slegs eerste afgeleides bevat. Die energiebalansvergelyking oor die algemeen word gegee deur vergelyking (4) in paragraaf 3.4.10 'n Implisiete metode word gebruik omdat dit stabiel is vir die oplos van sulke tipe vergelykings (paraboliese differensiaalvergelykings).

Daar is drie verskillende energiebalans vergelykings wat opgestel word. Die een is vir 'n reaktor in die middel. Nog een word opgestel vir die reaktor aan die buitekant en die laaste een vir die reaktor in die binnekant. In die algemeen sal 'n energiebalans op een van die reaktore as volg lyk:

Figuur 4-4 Voorstelling van energiebalans in diskrete vorm



Die energiebalans is dan nou die sommasie van die terme in die grafiese voorstelling

$$E_{in} = E_{out}$$

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)^i + kA_i \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r} \Delta t + (w_{CO_2, i} H_{CO_2, i+1} + w_{CO_2, i} H_{CO_2, i-1}) \Delta t \\ & = \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)^{i-1} + kA_{i-1} \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta r} \Delta t + (w_{CO_2, i+1} H_{CO_2, i} + w_{CO_2, i+1} H_{CO_2, i}) \Delta t \end{aligned}$$



In bogenoemde vergelyking word vir die meeste terme nie aangedui watter tydstap se konstantes gebruik word nie. Deur die waardes van al die terme wat nie gemerk is met j of $j-1$ nie te bepaal as wat dit by tydstip $j-1$ is kan die temperature vir tydstap j eksplisiet bereken word. As die H waardes in die konveksierme en die temperature in die geleidingsterme egter vir tydstip j is, ontstaan 'n stel liniêre vergelykings wat gelyktydig opgelos moet word saam met die energiebalansvergelykings op die endpunte.

Vir $i=1$ tot $i=n-1$ geld:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)^j + kA_i \frac{(T_{i+1} - T_i)^j}{\Delta r} \Delta t + (w_{CO_2} H_{CO_2}^{i+1} + w_{CO_2} H_{CO_2}^{i-1})^j \Delta t \\ & = \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)^{i-1} + kA_{i-1} \frac{(T_i - T_{i-1})^j}{\Delta r} \Delta t + (w_{CO_2} H_{CO_2}^{i+1} + w_{CO_2} H_{CO_2}^{i-1})^j \Delta t \end{aligned}$$

Die boskriffies j dui daarop dat dit die hoeveelhede in die hakies op daardie berekeningsstap is wat bedoel word.

Onthou dat $H_{ki}^j = A_{ki} T_i^j + B_{ki}$

Die energiebalans vir die reaktor reg in die middel is presies identies aan bogenoemde maar daar is nie 'n geleiding uit of 'n konveksie in terme nie.

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)_0^j + k_0^{j-1} A_0 \frac{T_1^j - T_0^j}{\Delta r} \Delta t \\ & = \left(\sum_{\text{komponente}} N_k H_k \right)_0^{j-1} + (w_{CO_2} H_{CO_2}^{j-1} + w_{CO_2} H_{CO_2}^{j-1})^j \Delta t \end{aligned}$$

By die reaktor wat op die buitekant is, is daar nie 'n geleiding in term nie maar in die plek daarvan 'n hitteoordrag term van af die omgewing na die reaktor.

$$E_{\text{vanaf omgewing}} = A_n (h_{\text{straling}} + h_{\text{konveksie}}) (T_{\text{omg}} - T_n^j)$$

A_n = buiteoppervlak van reaktor n en van die korrel

Soos elders in meer besonderhede bespreek word is bogenoemde eintlik hoofsaaklik 'n straling effek.

5. Eksperimentele Resultate

5.1 Inleiding

In hierdie hoofstuk word aangedui wat eksperimenteel gedoen is. Die betekenis van die resultate word slegs gedeeltelik hier bespreek. Die bespreking waaruit die belangrike gevolgtrekkings vir die studie kom word in die volgende hoofstuk (resultate van modellering) bespreek.

Drie reekse toetse is uitgevoer.

Die eerste reeks behels enkelkorreltoetsing waar die oond - temperatuur konstant gehou word en reduseermiddeltipe, hoeveelheid en die reaksietyd gevarieer is. Die toetse word verder in paragraaf 5.2 bespreek.

In die tweede reeks toetse is korrels van dieselfde samestelling (kooks as reduseermiddel) in 'n oond geplaas van verskillende oondtemperatuur en na verskillende tye afgeblus. Die toetse word bespreek in paragraaf 5.3

Ook deel van die tweede reeks toetse is korrels van dieselfde samestelling maar verskillende korrelgrootte beskou. Die toetse word bespreek in paragraaf 5.3.1

Die derde reeks toetse het hoofsaaklik te doel gehad om die temperatuurgradiënte wat in 'n komposiet materiaal ontstaan te meet. paragraaf 5.5 handel hieroor.

Die toepassing van die eksperimentele resultate in terme van die model is op twee maniere gedoen. Aan die een kant is sekere van die kinetiese konstantes bepaal of geskat uit die data verkry met die eksperimentele werk. Andersins is die data vergelyk met die resultate van die model. Verder is die model ook gepas op van die data deur verstelling van sommige van die tempokonstantes.

5.2 Effek van samestelling en tyd

5.2.1 Inleiding

Die metode waarop die toetse uit gevoer is word in die bylae bespreek (paragraaf 9.1.3). Die rou chemiese analises en massaverlies data is in die bylae (paragraaf 9.2). Vier verskillende reduseermiddels is gebruik saam met 'n magnetiet erts. Ongeveer 1% bindmiddel is gebruik en afhange van die reduseermiddel se samestelling is genoeg daarvan bygevoeg sodat die korrels almal voor 'n toets 16% vaste koolstof bevat het. Daar is ook korrels gemaak wat een persent laer of hoër vaste koolstof bevat maar die korrels se gedrag het glad nie sigbaar verskil van die met 16% vaste koolstof nie.

Die korrels is vir verskillende tye by 1280°C in 'n stikstof atmosfeer (N₂) gehou. Die rou data bestaan uit volledige chemiese samestellings van al die korrels op al die verskillende tye en die massaverandering by al die verskillende tye. Vir die tye 0, 4, 8, 12 minute en reduseermiddels kooks antrasiet, leupansteenool, en grafiet is daar elk 'n volledige chemiese analise en 'n massa. Om die herhaalbaarheid te verhoog is 'n toets soms tot vier keer herhaal. Geen inligting oor die temperatuur of chemie binne die korrels is uit die eerste reeks toetse verkry nie. Van die tweede reeks toetse is inligting verkry oor hoe die chemie in 'n korrel verander as funksie van posisie en tyd en in die derde reeks toetse is inligting verkry oor die aard van temperatuurprofiel wat kan ontwikkel

Die hoofdoel die eerste reeks toetse was om die mees geskikte reduseermiddel te kies vir verder toetse. Aanvanklik sou daar van dié samestelling groter hoeveelhede korrels gemaak word vir toetslopieë in 'n roterende herdoond. Die roterende herdoond het ongelukkig egter nie gerealiseer nie.

Die inligting uit die toetse is verder aangewend om die wiskundige modelle van die proses te toets. Ander afleidings uit die reeks toetse word in verdere paragrawe bespreek.

5.2.2 Grondstowwe

Die grondstowwe wat in die eerste reeks toetse gebruik is, is ook in die tweede reeks gebruik. Ander grondstowwe is egter in die derde reeks gebruik



5.2.3 Chemiese resultate

Die verwerkte chemiese analise is opgesom in Tabel 5-1.

Reduseermiddel bygevoeg	Massa% reduseermiddel bygevoeg	Chemiese eienskappe van produkte (na 12 minute by 1288°C)				
		Massa% Swael	Massa% Koolstof	Massa% Yster	%Metallisatie	Massa% As
Grafiet	16.3	0.08	2.2	90.7	93.0	2.5
Antrasiet	18.5	0.23	2.1	85.5	77.5	4.3
Kooks	18.9	0.28	3.9	84.4	79.5	5.7
Leeupan	25.8	0.38	2.5	85.5	97.3	7.7

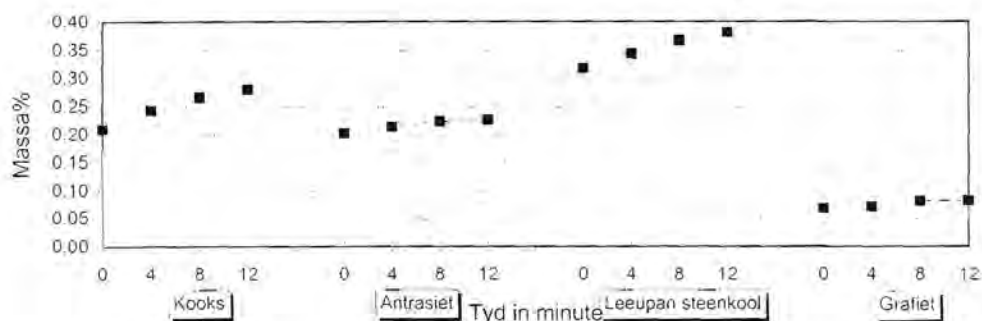
Bg waardes is bereken uit die gemiddeld van drie stelle korrels wat dieselfde behandeling ontvang het. Afleidings wat gemaak kan word uit bogenoemde tabel volg in paragrawe 5.2.3.1 tot 5.2.3.6 Verdere verwerking van die analises saam met die massaverlies data word bespreek in paragraaf 5.2.4.

5.2.3.1 Swaelinhoud

Die steenkool het die hoogste swaelinhoud van die vier reduseermiddels. Daarna volg kooks, antrasiet en grafiet. Die swaelinhoud van die korrels het in meestal toegeneem tydens reduksie. Die toename is as gevolg van die afname in totale massa van die korrel terwyl die massa swael in die korrel nie verander het nie. Die finale swaelinhoud van die produk word hoofsaaklik hierdeur beïnvloed. Die waardes is egter onbevredigend hoog, tot 0.4 massa% swael waar steenkool gebruik is. Die produk sal dus nie as hooftoevoer tot die 'n staalmakery kan dien nie. Omdat daar nie skeiding van fases plaasvind soos bv in die hoogoond of Corex nie, is daar nie kans vir die swael om uit die produk verwyder te word nie. Om die swael binne perke te kry (minder as 0.02%), kan 'n probleem wees wat moontlik 'n aparte navorsingstudie sal vereis. Deur reduseermiddels te gebruik met heelwat laer swaelinhoud kan die probleem van swael uitgeskakel word.

Figuur 5-1 Swaelinhoud

Effek van tyd en reduseermiddel op die Swaelinhoud



Figuur 5-1 dien ook as toeligting op die swaelinhoud van die korrels as 'n funksie van tyd.

Vir swaelverwydering, tydens afsmelting van die korrels, is dit nodig dat die sisteem onder reduserende toestande is. Indien die korrels 'n hoë koolstof inhoud het kan dit help om meer reduserende omstandighede te skep in die omgewing waar die korrels in die staalbad smelt. Deur die groen korrels met 'n oormaat reduseermiddel te maak word kan die graad van metalisasie van die produk effens verhoog word en die korrels produk bevat dan 'n oormaat koolstof.

5.2.3.2 Koolstofinhoud van produk

Aanvanklike byvoeging:

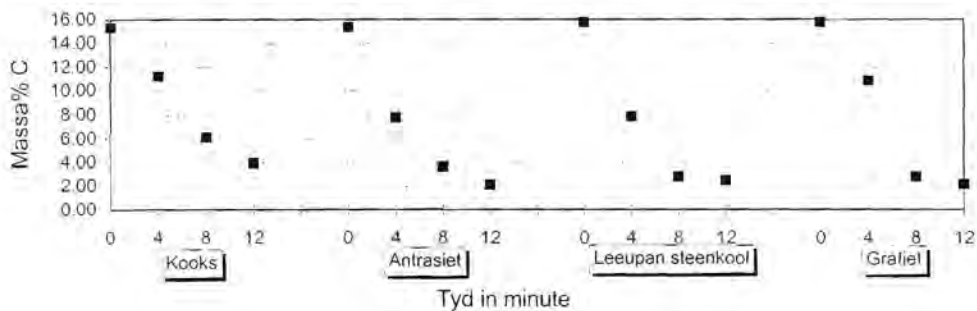
Die hoeveelheid reduseermiddels wat aanvanklik bygevoeg is, was bereken sodat die verhouding van vaste koolstof tot yster in alle gevalle dieselfde is vir verskillende reduseermiddels. Die hoeveelheid reduseermiddel wat bygevoeg is, was met in elke geval soveel dat al die korrels aanvanklik 16% vaste koolstof bevat. (Hoe dit bereken is word in paragraaf 9.1.1 bespreek) Daar is van die aanname af uitgegaan dat die vlugtige koolstofprodukte geïgnoreer kan word.

Finale koolstofinhoud:

Dit is moeilik om te bepaal wat die vorm van die koolstof is, nadat die reduksieproses begin het. Vanaf die ewewigdiagram behoort daar egter baie min koolstof in die yster op te los by 1288°C. As die verskillende produkte vergelyk word, is dit duidelik dat alhoewel almal met dieselfde hoeveelheid vaste koolstof begin het, die korrel met kooks die meeste totale koolstof bevat het op enige stadium daarna. (Sien Figuur 5-2) In die ander drie gevalle is die tempo van koolstof verbruik vinniger, maar die tempo neem skynbaar skerp af as daar nog ongeveer 2-3% C oor is. Moontlik is dit omdat die laaste bietjie koolstof wat oor is nie so reaktief is as die res nie.

Figuur 5-2 Totale koolstofinhoud

Effek van tyd en reduseermiddel op totale koolstofinhoud



5.2.3.3 Metallisasie

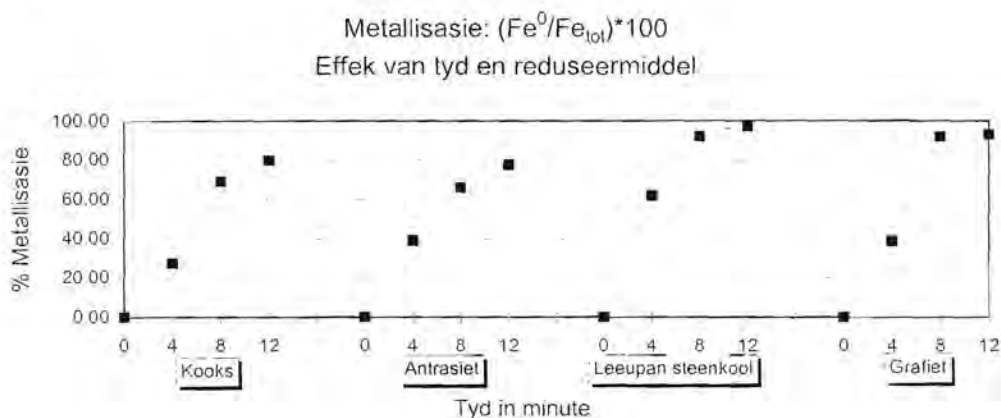
% Metallisasie word bereken deur die totale hoeveelheid metaliese yster as 'n persentasie van totale hoeveelheid yster in die produk uit te druk. Van die resultate wat in die paragraaf bespreek word, word aangewend in die evaluasie van die model. Voldoende inligting is nie beskikbaar oor die reaktiwiteite van die reduseermiddels om 'n verband daartussen die waargenome metallisasie gedrag te trek nie.

Met die Leeupan-steenkool as reduseermiddel is die hoogste % metallisasie verkry. (meer as 90% in 12 minute) Met die kooks en antrasiet is tussen 60 en 80% metallisasie gekry.

Figuur 5-3 dui aan dat die hoogste metallisasie tempo met die Leeupan steenkool as reduseermiddel verkry is. Die feit dat die Leeupan steenkool die hoogste % vlugtige komponente kan moontlik daarmee te doen hê. Die model voorspel egter dat dit geen effek behoort te hê nie. Dit volg dus dat die reaksietempokonstantes vir die steenkool in die model hoër is as vir die ander reduseermiddels.

Die hoër tempo van reduksie met grafiet word verklaar aan deur die feit dat die reduseermiddel minder gate en as tussen die metaal wat vorm laat. Die tempo van die reaksie versnel dus as gevolg hiervan.

Figuur 5-3 Metallisasie



5.2.3.4 Asinhoud

Die asinhoud is bereken as die som van die SiO_2 , MgO , CaO en Al_2O_3 .

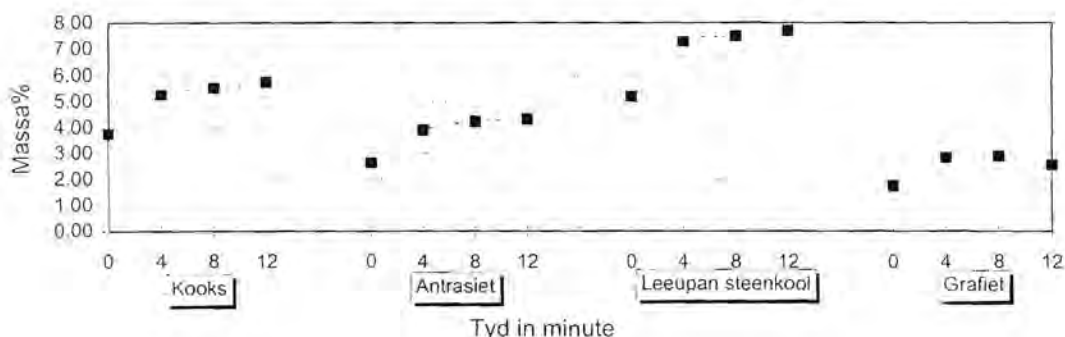
Omdat die magnetieterts 'n relatief lae asinhoud het, is die asinhoud van die produk hoofsaaklik deur die asinhoud van die betrokke reduseermiddel bepaal. Die asinhoud het toegeneem tydens reduksie (Weens afname in totale massa sonder verlies van as). Waar Leeupan-steenkool gebruik is, was die asinhoud ongeveer 7.7% by 12 minute. Daarna volg kooks, antrasiet en grafiet. (Sien Figuur 5-4)

Dit lyk asof die %as die morfologie van die produk beïnvloed. In korrels met laer % as het daar blykbaar meer vergroeiing van die partikels in korrels plaasgevind. Dit kan dus ook bepaal of die korrel sal smelt. In die geval van grafiet het die vergroeiing van die yster wat vorm so ver gegaan dat dit die kontak met die koolstof baie goed raak. Die koolstof kon dan in die yster oplos en smelting van die korrel veroorsaak.

Die samestelling van die as sal veral belangrik wees wanneer die korrels afgesmelt moet word. (Met ontswaeling in gedagte gehou is die CaO inhoud bv van belang) Die nie-reaktiewe komponente het wel 'n invloed op die kinetika soos wat elders aangetoon word. In die studie is daar egter nie gekyk na die effek nie en dit is ook nie moontlik om vanuit die stel resultate enige waarnemings te maak wat dit betref nie.

Figuur 5-4 Asinhoud

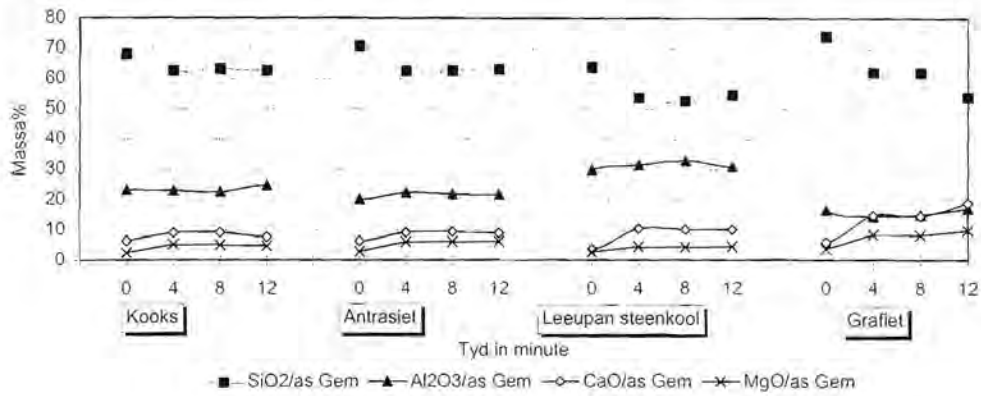
Asinhoud: effek van tyd en reduseermiddel



Die samestelling van die as van die verskillende korrelsamestellings na verskillende tye word aantoon in Tabel 9-3. Die samestelling van die askomponent self word in Figuur 5-5 aangetoon. Dit lyk of die assamestelling baie konstant gebly het gedurende die verloop van die reaksie. Dit ondersteun die aanname wat vir die model gemaak is dat die as komponente nie aan enige reduksie reaksie deelgeneem het nie.

Figuur 5-5 Assamestelling

Voorlopige toetse: effek van tyd en reduseermiddel op samestelling

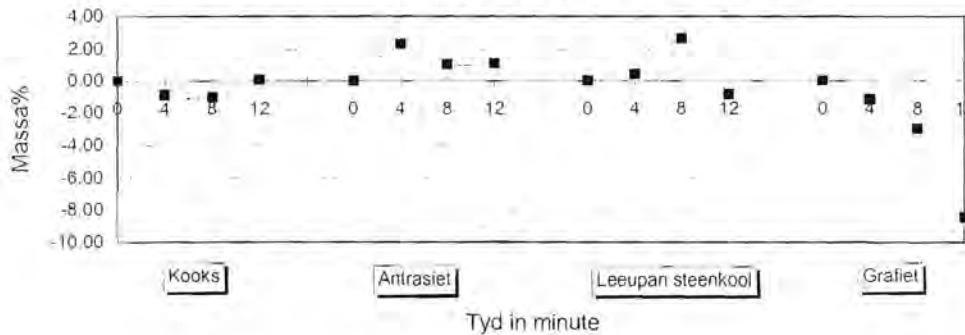


5.2.3.5 Akkuraatheid van resultate

Om 'n aanduiding van die akkuraatheid van die resultate te verkry is die totale yster vir elke stel toestande bereken vanaf die aanvanklike samestelling en massaverliese. Die waardes vergelyk redelik met die chemiese analises (variasie ongeveer 2%). Die waardes vir grafiet toon egter groter afwykings omdat die massas nie so goed na reduksie gemeet kon word nie. (Sien Figuur 5-6)

Figuur 5-6 Akkuraatheid van resultate

Verskil tussen berekende en gegewe analise vir totale Fe



5.2.3.6 Aanbevelings

In terme van die praktiese keuse van 'n reduseermiddel tussen die wat ondersoek is word die volgende aanbeveel:

Op grond van die %metallisatie verkry met leeupan steenkool kan dit as 'n geskikte reduseermiddels gesien word. Die hoë swaelinhoud vereis egter aandag. Die asinhoud van die produk is die hoogste (8%) maar nie hoër as die van Midrex se toetse nie (12%).

Antrasiet kan wel as alternatief deurgaen. Die kinetika is die swakste maar die swael en die as inhoud van die produk is amper die helfte minder. Die swael is in die geval egter ook te hoog.

5.2.4 Verder verwerking van resultate van eerste toetse

Die resultate wat met die eerste reekse toetse verkry is, is verder verwerk om die reaksie verloop in verband te bring met die resultate wat verkry sal word met die berekening van die model. Die molhoeveelhede van die ysterkomponente en koolstof is bereken vir elkeen van die tye. Dit is weer gebruik in die bepaling van die tempokonstantes van die chemiese reaksies van die model.

Daar is gevind dat die resultate redelik onsensitief is vir variasie op die tempokonstante van die reduksie reaksies. Die tempokonstantes vir die Boudouard reaksie kon egter beter bepaal word. Die aktiveringsenergieë vir die reaksies is egter nie uit die resultate bepaal nie. Tabel gee die primêre tempokonstante vir die Boudouard reaksie vir die verskillende reduseermiddels. Grafiek van die molhoeveelhede verloop van die reaksies word in die bylae gegee.

Tabel 5-2 Tempokonstantes van Boudouardreaksie bepaal uit eerste reeks toetse	
Reduseermiddel	Konstante (k_1) (Paragraaf 3.6.13 op bladsy 58)
Leeupan steenkool	300
Grafiet	240
Kooks	150
Antrasiet	100

Met die eenvoudige data wat beskikbaar was is ander konstantes as eerste benadering albei nul gemaak. Dit het egter tog goeie resultate gelever

Die aktiveringsenergie vir die kooks se reaksietempo konstante was bepaal as 90kJ. Dit is gedoen met die data van die tweede reeks toetse.



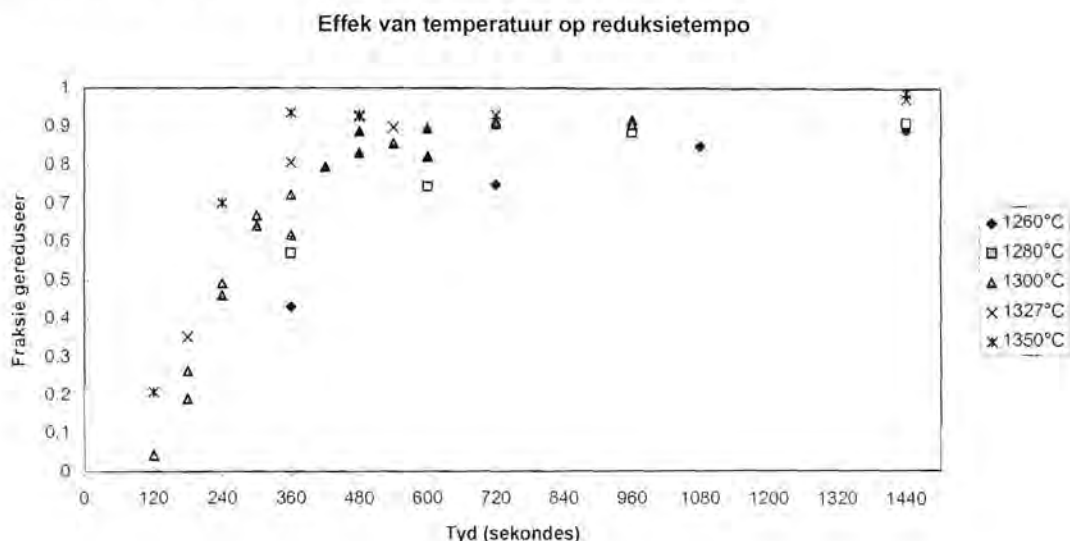
5.3 Effek van Temperatuur

Die effek wat temperatuur het op die algehele tempo, naamlik die graad van reduksie word aangetoon in die volgende figuur. Hierdie is waardes is van die resultate van die tweede reeks toetse (Enkelkorreltoetsing in vertikale buisond) In die volgende hoofstuk word die resultate in terme van die hipoteses van die studie bespreek. Oor die 90°C temperatuurgebied rondom 1300°C is duidelike verskille in die tempo van reaksies waargeneem.

Tabel 5-3 Fraksie metallisasie van korrels na verskillende tye by verskillende oondtemperature

Tyd (sek)	1260°C	1280°C	1300°C	1327°C	1350°C
120			0.044		0.207
180			0.190		
180			0.264	0.352	
240			0.492		
240			0.461		0.701
300			0.668		
300			0.641		
360			0.616		
360	0.430	0.569	0.722	0.807	0.936
420			0.796		
420			0.796		
480			0.831		0.930
480			0.889		0.926
540			0.856	0.898	
600			0.822		
600		0.745	0.896		
720			0.915		
720	0.749		0.908	0.931	
960			0.918		
960		0.885	0.906		
1080	0.848				
1140					
1200					
1440	0.892	0.911		0.973	0.989

Figuur 5-7 Effek van oondtemperatuur op die reaksietempo (Kooks as reduktant)



5.3.1 Bepaling van kinetiese konstantes

Omdat die toetse by verskillende temperature uitgevoer is kon deur passing van die model op die data ook die temperatuuronafhanklike konstantes bepaal word. Hierdie konstantes wat so bepaal is sal egter heel moontlik slegs van toepassing wees in so 'n situasie waar die grondstowwe 'n komposiet van reduseermiddel en erts is.

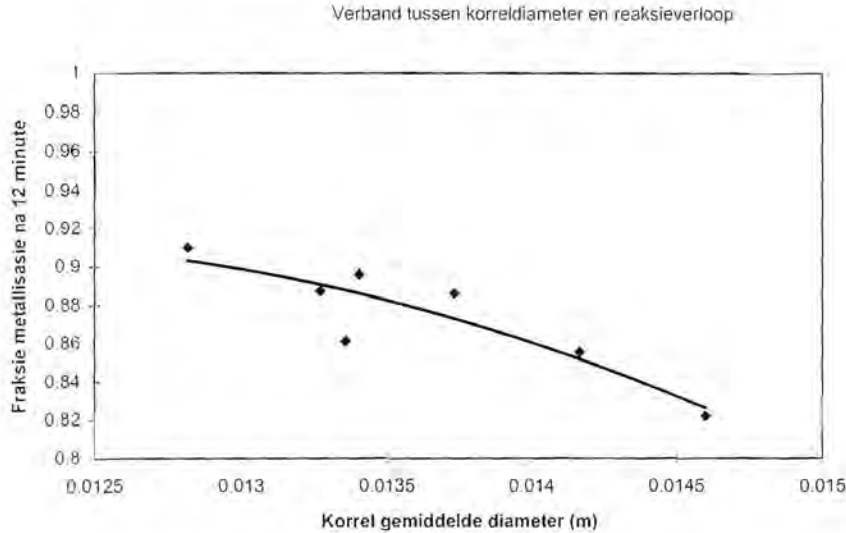
Daar is baie faktore wat die situasie kompliseer. In afsonderlike meting van die tempo's van die reaksies moet die toestande waaraan die komponent blootgestel is in die korrel tussen die ander partikels so na as moontlik nageboots word omdat van die massa-oordrageffekte in die tempovergelykings ingebou is. Daarom word verwag dat alhoewel die konstantes nie onafhanklik is van die proses nie die gebruik daarvan tog 'n goeie modelvoorspelling tot gevolg het. Dit word dan nou aangetoon in die volgende hoofstuk.

Die konstantes wat gegee word in Tabel 4-9

5.4 Effek van korrelgrootte

In die geval waar hitteoordrag binne die korrel 'n beduidende effek op die tempo van die algehele proses het kan gesien word in die volgende eksperimentele resultate. Die resultate kom ook uit die tweede reeks toetse

Figuur 5-8 Effek van korrelgrootte



Die figuur toon die direkte effek wat die grootte van die korrel het op die tempo van reduksie. Hoe groter die korreldiameter hoe minder materiaal is gereduseer na 'n sekere tyd.

Die data in die figuur is bereken vanaf die totale graad van reduksie van korrels van verskillende diameters. Die korrels is almal by 1300°C behandel vir 10 minute en het almal 16% koolstof (kooks) bevat aan die begin.

Interpretasie van die resultaat in terme van die model en die betekenis daarvan word in die volgende hoofstuk gedoen.



5.5 *Meting van konsentrasieprofiel in 'n gereageerde korrel*

Die graad van metalisasie is aanduiding van die nie homogeniteit wat in die korrel waarneembaar is selfs teen die einde van die proses wanneer die temperatuurprofiel alreeds taamlik afgeplat het. Die waardes van volume metalliese fase aangetoon in die grafiek stem ooreen met die resultate van wat bepaal is met ander metodes vir dieselfde monster. Die beelde waarvan af die waardes bepaal is word gegee in die bylae (paragraaf 9.3.4) Die resultate word gebruik om ook aan te toon dat die model 'n goeie voorspelling kan gee van die werklikheid. Die resultate van twee van die toetse word in paragraaf 6.1.2 op bladsy 106 saam met die modelpassing daarop gegee.

Die resultate wat verkry is uit die beeldanalises is in 'n mate beperk deurdat fraksie metalisasie vir die hele korrel nie daarvan af bereken kan word nie. Die omgekeerde kan egter gedoen word. As die gemiddelde chemiese samestelling van 'n korrel bekend is, kan daar, deur die digtheid van die verskillende sigbare komponente in berekening te bring, 'n gemiddelde volumefraksie bepaal word. Die gemiddelde volumefraksie vir die korrel van 'n sigbare komponent kan ook bepaal word deur die volume wat elke foto verteenwoordig in ag te neem. (Omdat dit foto's op die snit in die korrel is verteenwoordig die foto wat na aan die buitekant van die korrel geneem is 'n veel groter volume as 'n foto wat in die middel geneem is)

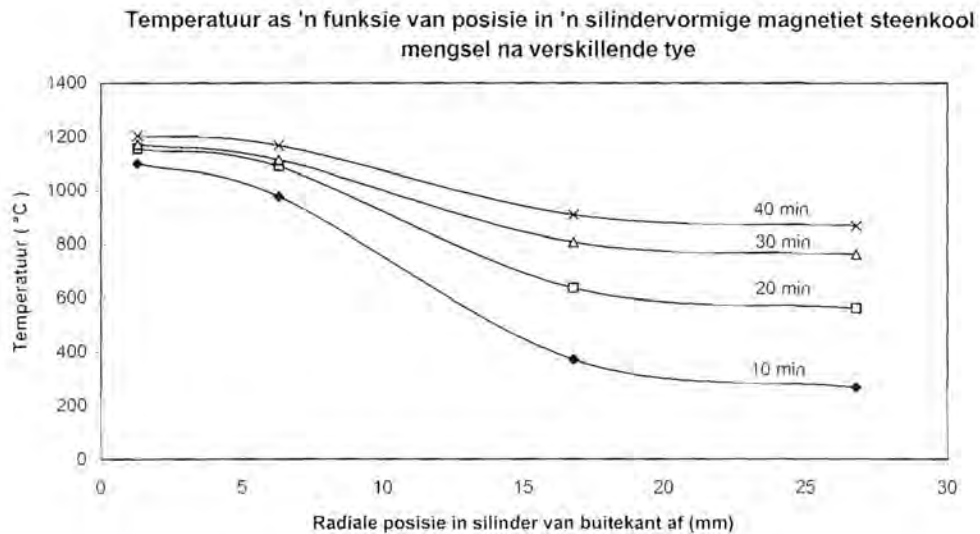
Die gemiddelde volume fraksies vir korrels waarop beeldanalises gedoen is, is op die twee wyses bereken. Daar is gevind dat die antwoord met slegs 'n enkele persentasiepunte verskil het. Die beeldanalise word dus as redelik akkuraat gereken.

Die beeldanalises toon 'n konsentrasieprofiel wat betref byvoorbeeld die hoeveelheid metaliese yster. Die profiel toon dat daar in die een geval omtrent 5 volume% meer yster is op die rand van die korrel as in die senter op. In die ander geval is dit selfs nog meer. Daar is aanvanklik gereken dat dit toe te skryf is aan die bestaan van 'n taamlike temperatuurgradiënt in die klein sferiese korrel. Omdat dit taamlik moeilik is om temperature in 'n aanvanklik bros korrel met 'n diameter van 15 mm te meet, is besluit om die waardes daarvan op 'n indirekte wyse te probeer bepaal. Die silindriese komposiete is gemaak en die temperature daarin gemeet met verloop van tyd.

5.6 Meting van temperatuurgradiënte

Die derde reeks toetse het 'n heeltemal ander opstelling behels. Hematiet en steenkool is gemeng en 'n groterige komposiet "koek" of silindriese "korrel" is gevorm. Die koek is 'n groter oond geplaas wat by 1200°C gebring is. Die bo- en onderkante van die silinder was termies geïsoleer en ander kant is blootgestel aan die oondtemperatuur. Die temperature is op verskillende silindries radiale posisies gemeet. Figuur 5-9 die resultaat van een toets. Die silinderkoek het 'n buitendiameter van 54 mm

Figuur 5-9 Temperatuurgradiënte in silindriese korrel



Hierdie figuur toon duidelik dat hitteoordrag in die komposiet beslis 'n groot beperking geplaas het op die tempo waarteen die proses plaasvind. Daar is gevind dat teen 40 minute die metallisasie nog kleiner as 30% was.

Met korrels wat sferies is en 'n diameter van meestal minder as 20 mm het kan verwag word dat die temperatuurgradiënte daarin moontlik heelwat minder sal wees as in die silindriese komposiet. Hierdie resultaat moet dus op een of ander wyse afgeskaal kan word na die situasie van 'n sferiese korrel. Dit is moontlik deur gebruik van die model.

6. Resultate van modellering

In die hoofstuk word die volgende aangetoon:

- Die wiskundige model is goeie weergawe van die werklikheid
- In korrels word die algehele reaksietempo deur tempo van hitteoordrag na die korrel beheer.
- Die tempo van hitteoordrag binne 'n komposiet is 'n belangrike faktor
- Die geometrie van komposiet (grootte van korrels of geometriese vorm van komposiet) 'n belangrike rol speel in die tempogedrag van die komposiet
- Die reaktiwiteit van die reduseermiddel is 'n belangrike faktor
- Massaordrag in die korrel is ook 'n belangrike faktor
- Onder sekere omstandighede speel vlugstowwe nie 'n rol in die proses nie

In die eerste paragraaf (6.1) word aangetoon dat die model wel goed pas op die eksperimentele data wat ingesamel is. In die volgende paragraaf word die rol van hitteoordrag en gasdruk in die algehele reaksietempo van komposiet korrels aangetoon. (paragraaf 6.1.4) Die laaste paragraaf toon nog effekte aan wat met behulp van die model waargeneem is.

Weereens word daar gewys word op die versigtigheid waarmee gevolgtrekkings wat op modelresultate gebaseer is, gehanteer moet word. (paragraaf 2.4)

6.1 Toetsing van model aan eksperimentele resultate

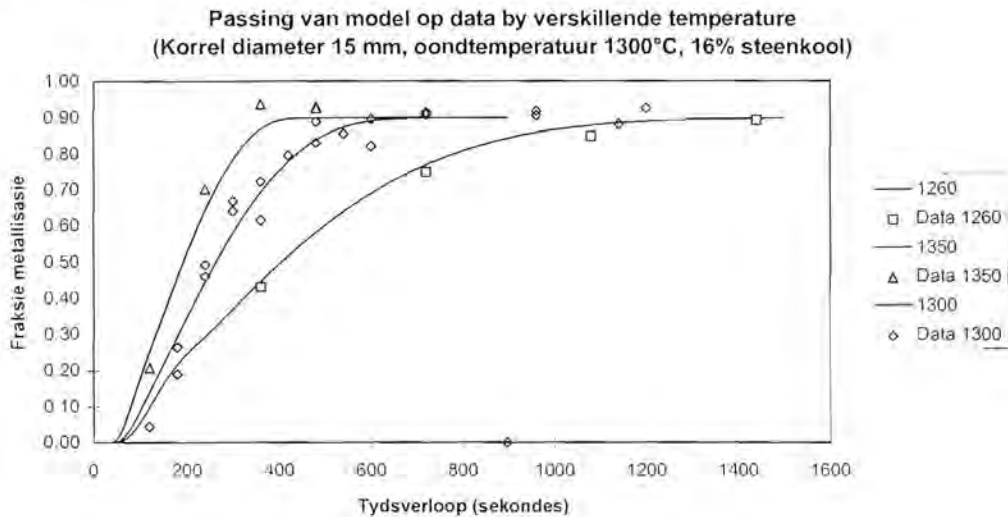
As toets vir die akkuraatheid van die model is eksperimentele data gebruik en die model se konstantes soos korrelgrootte en oondtemperatuur is dieselfde gemaak as die van die eksperiment. Die tempokonstantes in die model is dan verstel om die beste by die resultate aan te pas. Die akkuraatheid van die tempokonstantes kan dan getoets word aan resultate wat onder ander omstandighede of op 'n ander wyse maar vir dieselfde grondstowwe bepaal is.

6.1.1 Globale chemiese resultate

Die algehele reaksietempo word geïnterpreteer in terme van die fraksie metallisasie met tydsverloop. Die model se tempokonstantes is aangepas om optimaal by die data vir 1300°C oondtemperatuur te pas. Met daardie model is die modelvoorspelling bereken vir twee ander oondtemperature. In Figuur 6-1 word die gemete waardes en modelvoorspellings getoon. Daar kan gesien word dat die model 'n taamlike goeie voorspelling kan gee van wat die effek van oondtemperatuur op die algehele reaksiegedrag van die komposiet korrel is.

Fraksie metallisasie word bereken as die fraksie van die suurstof wat gebind is aan yster in die korrel wat al verwyder is.

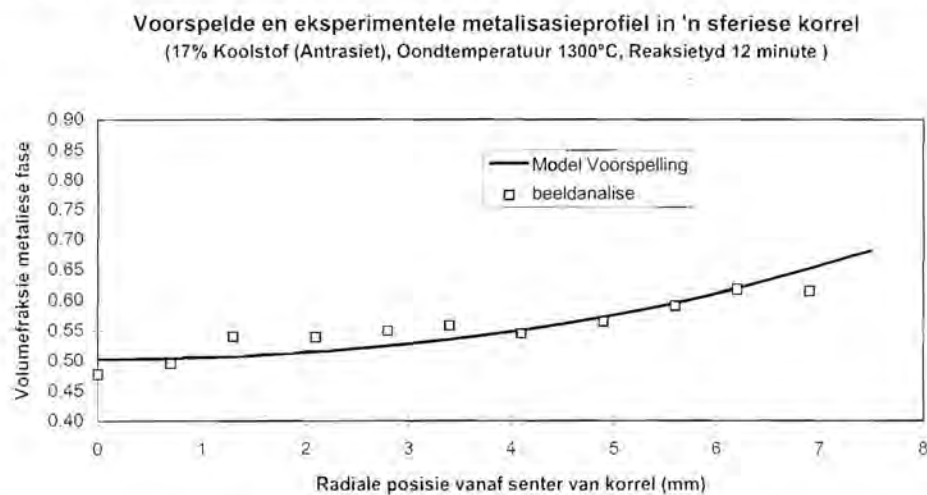
Figuur 6-1 Temperatuurdata passing



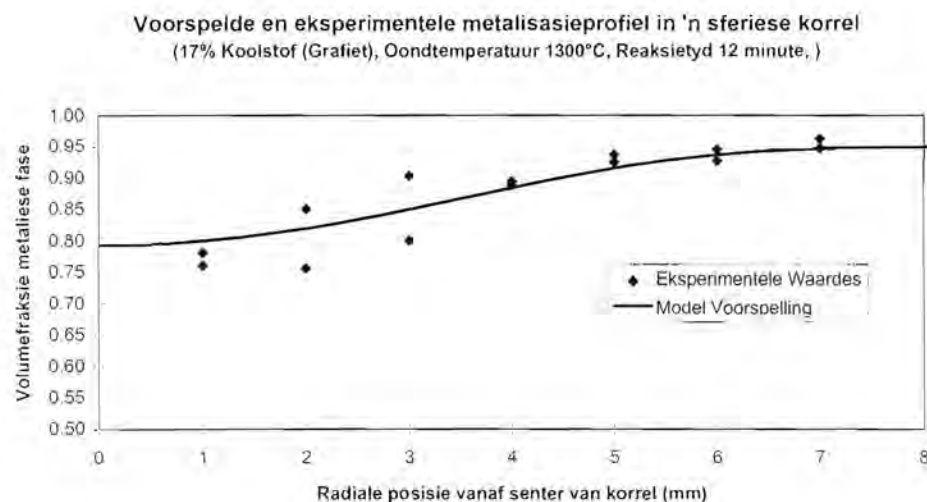
6.1.2 Samestellingsprofile in korrels

Omdat die model vir die moontlikheid van samestellingsprofile in die korrel voorsiening maak is dit nodig om te kyk na hoe goed die model dit kan voorspel. Figuur 6-2 en Figuur 6-3 toon die voorspelde metallisasieprofile van twee verskillende korrels. Die korrel wat antrasiet as reduseermiddel bevat het se reduksie was nie so ver gevorder na 12 minute as die van die korrel wat grafiet bevat het nie. Die tempokonstantes vir die twee gevalle verskil maar in albei gevalle pas dit redelik goed op die gemete waardes. Die wyse waarop die fraksie metaliese fase bepaal is word in die bylae bespreek. Let daarop dat dit nie dieselfde as fraksie metallisasie is nie, maar baie nou daaraan verwant is.

Figuur 6-2 Samestellingsprofiel deur korrel (antrasiet)



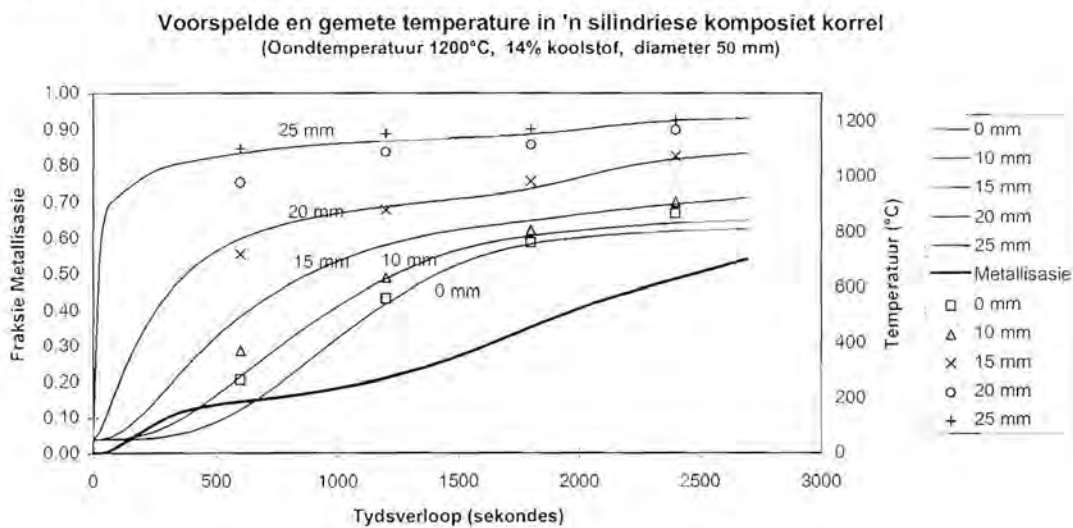
Figuur 6-3 Samestellingsprofiel deur korrel (grafiet)



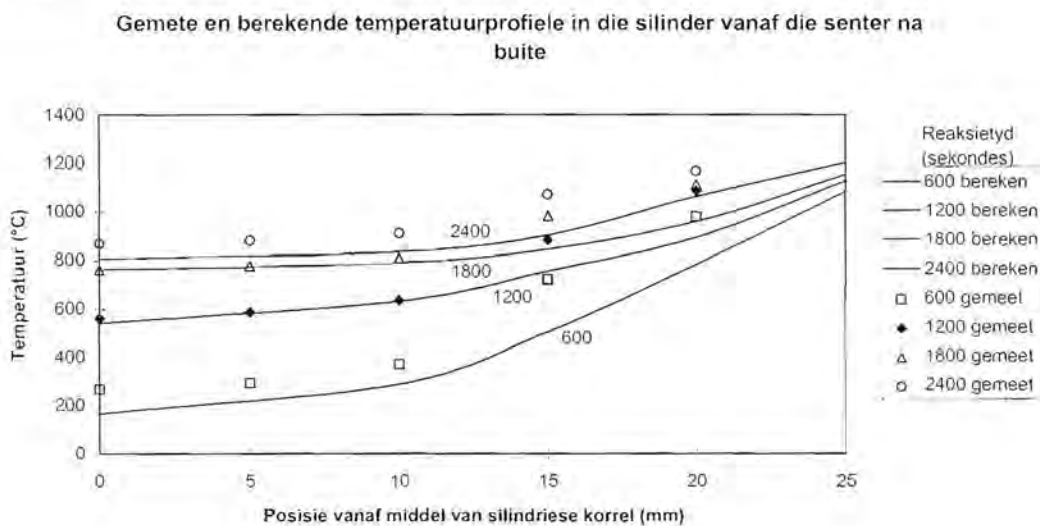
6.1.3 Temperatuurprofile in silindriese korrels

Die model voorspel ook die moontlike bestaan van temperatuurprofile in die komposiet materiaal. In die geval van 'n sferiese korrel met 'n diameter van ongeveer 15 mm is dit baie moeilik om die temperatuur binne-in die korrel te meet. Groot silindriese korrels is gemaak en termokoppels is in die korrels geplaas. Die temperature wat gemeet is, word in Figuur 6-4 en Figuur 6-5 met die modelvoorspelling vergelyk. Die toestande wat in die geval heers verskil in 'n paar opsigte in vergelyking met die sferiese korrels. Daar is egter gevind dat die model ook hier 'n voorspelling kan maak wat redelik goed op die gemete waardes is pas.

Figuur 6-4 Temperature in silinderkoek



Figuur 6-5 Temperatuurprofile in silinderkoek



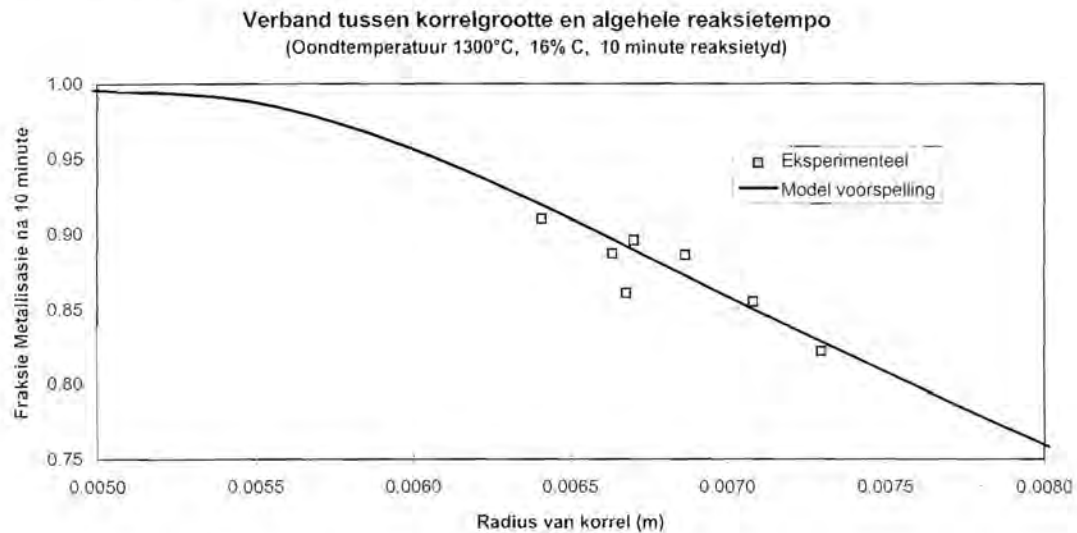
6.1.4 Grootte van korrels

Volgens die model is die grootte van die korrels baie belangrik in die bepaling van die algehele reaksietempo. Resultate wat verkry is word hier vergelyk met die model resultaat. Die chemiese samestelling van die korrels wat gebruik is in die toetse is dieselfde as in Figuur 6-1. Daar kan gesien word in Figuur 6-6 dat die model weereens redelike goeie voorspelling gee.

Die effektiewe geleidingsvermoë binne die sferiese korrels kan moeilik direk gemeet word, soos die proses verloop, sonder om die proses te versteur. Waardes vir die geleidingsvermoëns van die komponente is egter uit die literatuur verkry (Akiyama et al, 1992) 'n Indirekte aanduiding van die akkuraatheid van voorspelling van die geleidingsvermoë word hier verkry.

Deur al die verskillende modelparameters te varieer is daar gevind die helling van onderstaande lyn baie sterker deur die geleidingsvermoë van die materiaal beïnvloed word as deur enige ander faktor. Dié waarneming is dus 'n aanduiding daarvan dat die model redelik goed die geleidingsvermoë van die materiaal in die korrel voorspel.

Figuur 6-6 Effek van korrelgrootte



6.2 Faktore wat algehele reaksietempo bepaal

6.2.1 Inleiding

Deurdat daar gesien kan word dat die model geredelik die reaksiesistiem beskryf sal daar nou gepoog word om afleidings te maak gegrond op die modelresultate en eksperimentele resultate.

Daar is vier faktore wat moontlik die oorheersende faktor kan wees in die bepaling van die algehele reaksietempo:

- Tempo van chemiese reaksies
- Tempo van hitteoordrag na die korrel
- Tempo van hitteoordrag in die korrel
- Tempo van massaoordrag

Soos elders bespreek is, word massa-oordrag nie as tempobepalend geag nie. Verder sal gesien word dat: watter faktor oorheers word bepaal word deur die keuse van grootte en vorm van die komposiet.

Om uitspraak te lewer oor watter een van die drie onder watter omstandighede die algehele tempo kan oorheers moet na die modelvoorspellings gekyk word. In die studie is dit veral van belang wat die gedrag van die sferiese korrels van normale grootte (15 mm diameter) is. Deur 'n proses van eliminasië kan die tempobepalende of dan die belangrikste tempostap in die proses aangetoon word.

6.2.2 Reaksietempo's van chemiese reaksies

Die effek wat die tempokonstantes van die chemiese reaksies op die algehele tempo het kan ondersoek word deur die algehele reaksietempo met die model te bepaal vir verskillende waardes van die tempokonstantes. Metallisasië as 'n funksie van tyd is bepaal. In die volgende twee paragrawe word die effek aangetoon. Die sisteem wat ondersoek is, bevat drie chemiese tempovergelykings:

Tempo van Boudouard reaksie
Tempo van reduksie van Fe_3O_4
Tempo van reduksie van FeO

Onder die aanname dat die Boudouard reaksie relatief heelwat stadiger as die betrokke reduksiëreaksies verloop, geld:

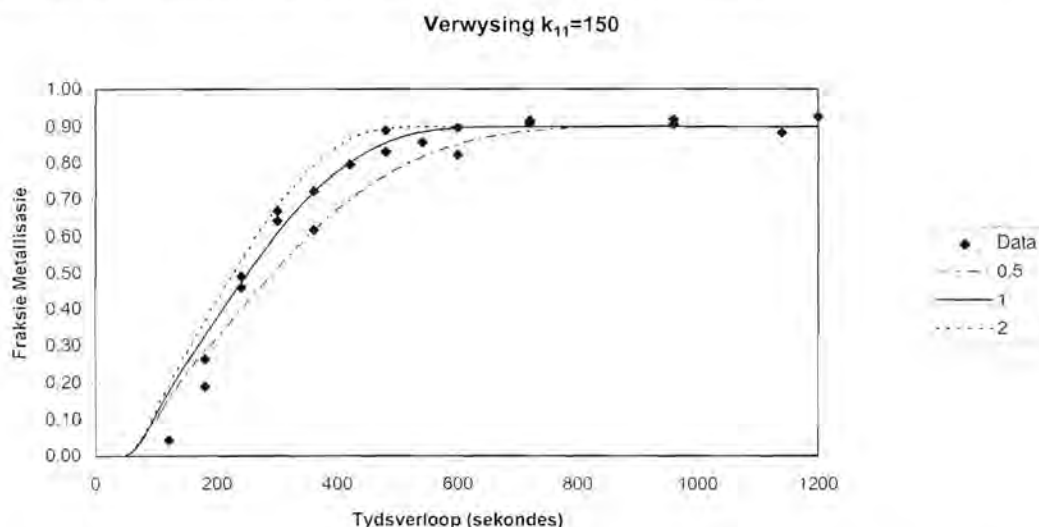
Die reduksiëreaksies verbruik vinnig CO gas. Die hoeveelheid CO beskikbaar sal dus daal om nader te kom aan die ewewigshoeveelheid vir die betrokke reduksie reaksie. Die tempo van die reduksiëreaksies wat afhanklik is van die partiële CO druk sal dan daal en die Boudouardreaksietempo sal styg totdat die twee in balans is. Die partiële CO druk waarby die twee reaksies gelyk kan plaasvind in die korrel sal dan nader aan die partiële CO druk van die ewewigsituasië vir die reduksiëreaksies wees. Dit is 'n

feit wat deur Sun en Lu (1996) se eksperimentele resultate aangetoon word. Daar sal dus na verwagting 'n groter effek wees op die algehele reduksietempo deur die Boudouard reaksie as die reduksiereaksies

6.2.2.1 Tempo van vergassing (Boudouard reaksie)

Die effek wat die tempo van Boudouard reaksie het op die algehele reaksietempo kan waargeneem word deur die tempokonstante wat in die model gebruik is vir die reaksie te varieer. Die konstante is verdubbel of gehalveer. In onderstaande figuur kan gesien word dat dit die reaksietyd vir 90% reduksie omtrent met 2 minute kan versnel of vertraag. Deur die effek egter te vergelyk met die effek wat oondtemperatuur het (Figuur 6-1) kan gesien word die tempo van die Boudouardreaksie nie die vernaamste faktor is nie.

Figuur 6-7 Effek van variasie van tempokonstante van Boudouardreaksie op algehele reaksietempo



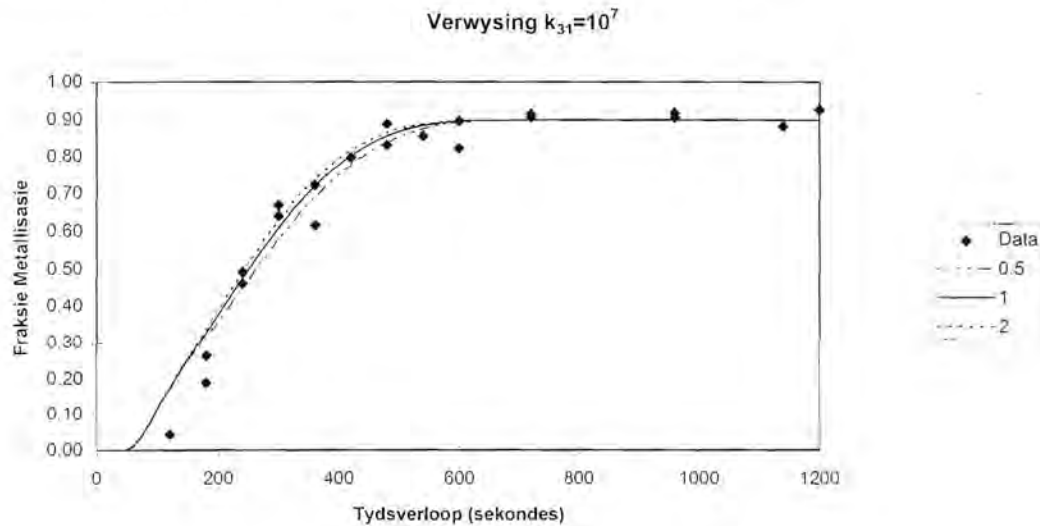
Die effek wat die byvoeging van ekstra koolstof is volgens die model net so sterk as die effek van verhoging in die tempokonstante van die Boudouard reaksie. Die keuse van die reduseermiddel het ook 'n groot invloed op die algehele reaksietempo gehad. (Paragraaf 5.2.3.3 en paragraaf 5.2.4)

6.2.2.2 Tempo van reduksiereaksies

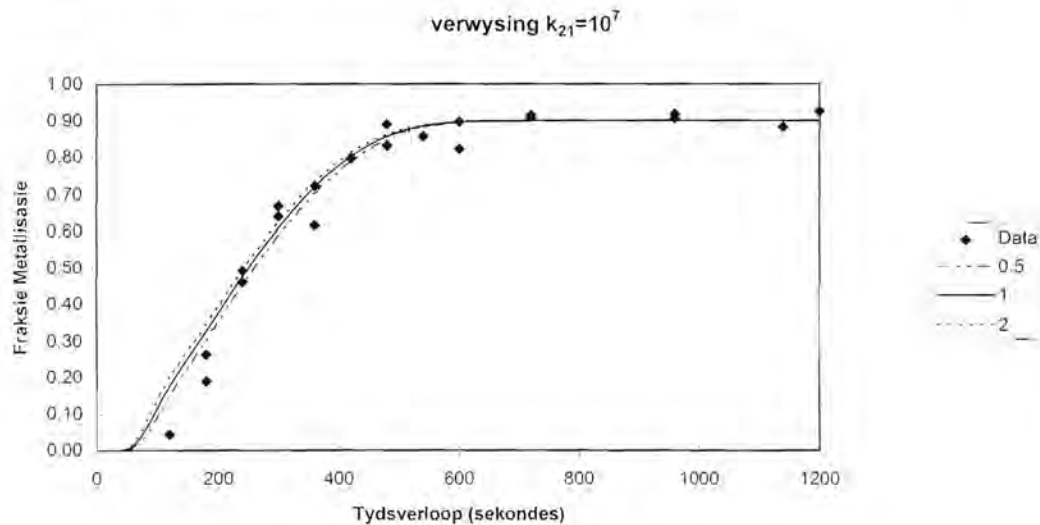
Die tempo waarteen reduksiereaksies plaasvind is gekoppel aan die tempo van die Boudouard reaksie. Die effek wat die verandering in tempokonstantes op die algehele tempo het kan egter met die hulp van die model beskou word. Daar is gekyk na watter effek die verandering van die wustiet of magnetiet reduksiereaksie se tempokonstantes op die totale tempo het. Die konstantes is onderskeidelik gehalveer, of verdubbel. Dit word in Figuur 6-8 en Figuur 6-9 getoon Daar kan gesien word dat

die algehele tempo taamlik onsensitief is vir variasie van die tempokonstantes. Hieruit word afgelei dat die tempo van reduksie nie tempobepalend is nie.

Figuur 6-8 Effek van variasie van tempokonstante van wustiet reduksie op algehele reaksietempo



Figuur 6-9 Effek van variasie van tempokonstante van magnetiet reduksie op algehele reaksietempo



6.2.2.3 Afleiding

Daar kan afgelei word dat die tempokonstantes van die reduksiereaksies nie van veel belang is in die bepaling van die algehele tempo nie. Die tempo van die Boudouard reaksie het egter wel 'n beduidende effek maar dit is nie die belangrikste nie.

6.2.3 Tempo van hitteoordrag na en in die korrel

6.2.3.1 Inleiding

Om te bepaal waar die grootste perk op hitteoordrag lê word drie hipotetiese gevalle beskou:

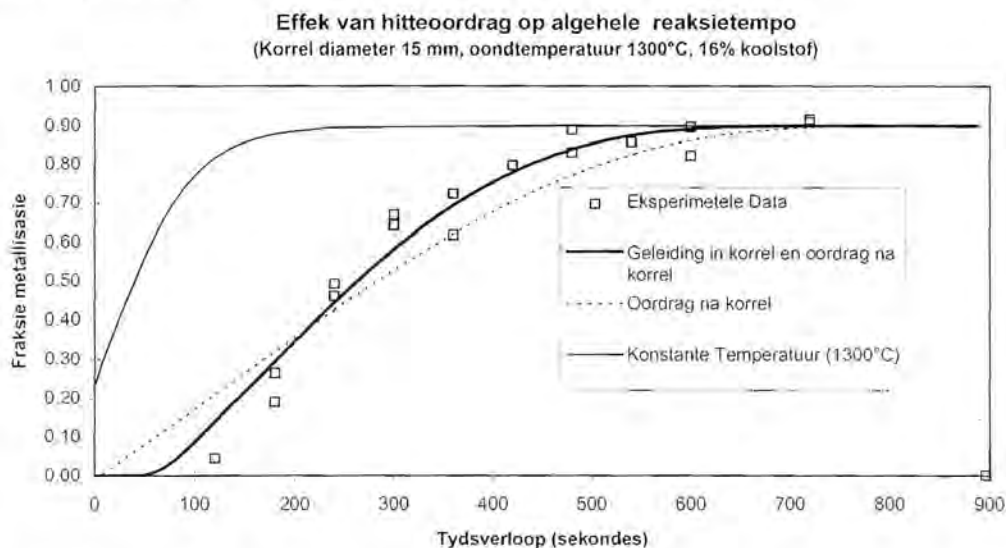
- Normaal: Hitteoordrag in en na die korrel volgens die model
- Homogene temperatuur in die korrel. Die model is dieselfde behalwe dat geleidingsvermoë neig na oneindig
- Konstante Temperatuur: Alle reagense en produkte word deurentyd by konstante oondtemperatuur gehou.

Deur na die eerste twee te kyk kan die effek van hitteoordragtempo in die korrel bepaal word. Deur na die laaste twee te kyk kan die effek tempo van hitteoordrag na die korrel toe waargeneem word. In die studie word fraksie metallisasie as aanduiding van die algehele reaksietempo gebruik (Figuur 6-10)

Die volgende figure toon die resultate van die verskillende gevalle

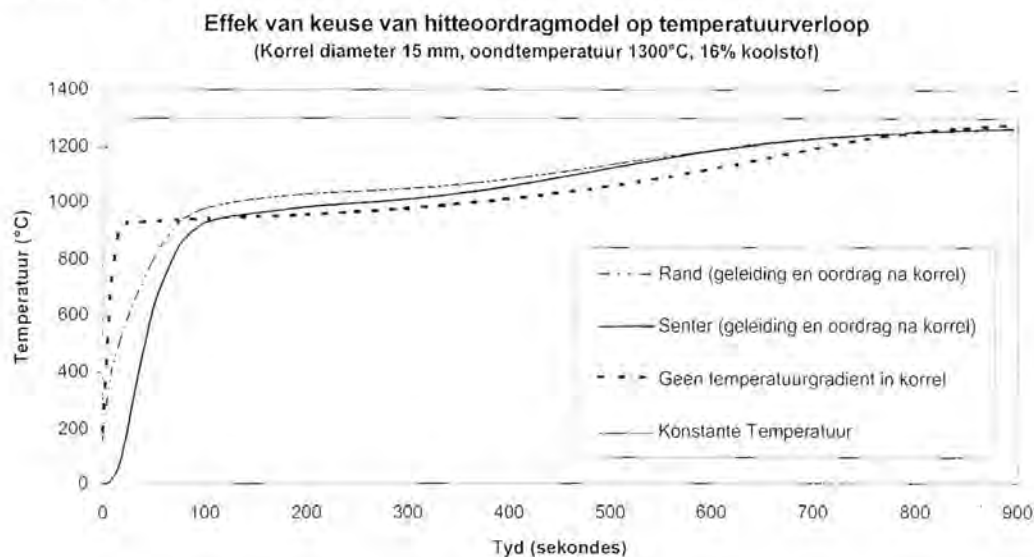
Let daarop dat die tempokonstantes van die reaksies wat gebruik is in die modelle wat 'n homogene of konstante temperatuur in die korrel gebruik dieselfde is.

Figuur 6-10 Verskillende hipotetiese gevalle



Daar sal in die bespreking wat volg telkens na die figuur terugverwys word.

Figuur 6-11 Temperatuurverloop vir verskillende hipotetiese gevalle



6.2.3.2 Normale situasie

Metallisasie verloop met tyd:

Die waardes in Figuur 6-10 is die gemiddelde metallisasie van die hele korrel. Daar kan gesien word dat eers na sowat 60 sekondes begin daar 'n reaksie plaasvind. Dit is ongeveer wanneer die temperatuur 900°C verbystee. Daarna klim die tempo van reaksie skerp en plat dan af soos wat die reduktant op gebruik raak en die reaksie voltooiing nader.

Temperatuur:

Die temperatuur styg taamlik skerp in die begin. Soos wat die Boudouardreaksie tempo optel met toename in temperatuur plat die temperatuur beide op die senter en op die rand van die korrel af. Wanneer die vergassingstempo afneem, begin die temperatuur weer skerper toe te neem totdat dit eindelijk die oondtemperatuur asimptoties nader.

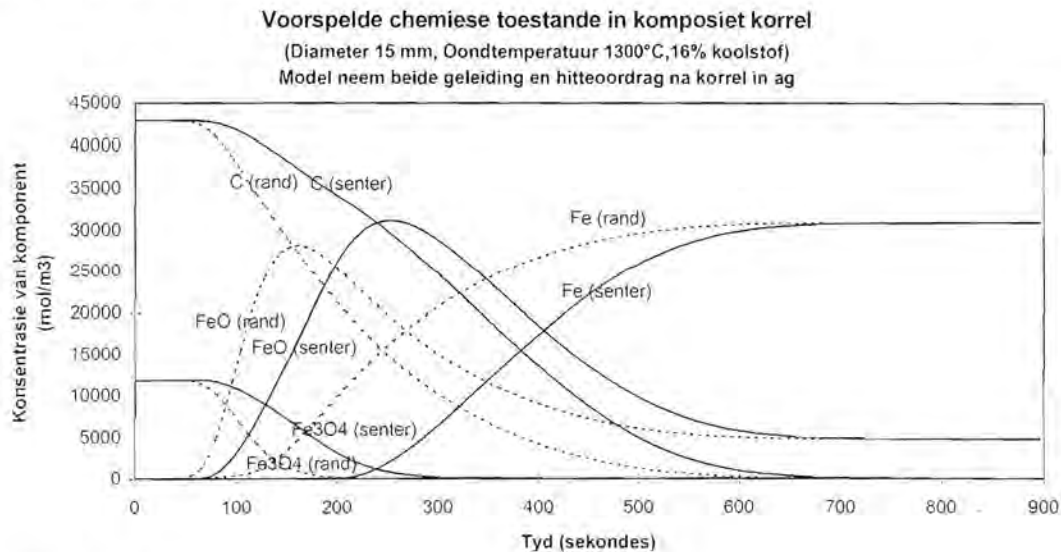
Daar is 'n redelike verskil in temperatuur tussen binne en buite gedurende die eerste 75 sekondes. 'n Maksimum van verskil 200°C word bereik maar na 100 sekondes is dit reeds minder as 50°C. Na 600 sekondes is daar geen merkbare verskil meer nie.

Fraksie koolstofmonoksied in gas (X_{CO}): (Figuur 6-13)

Die X_{CO} styg skerp saam met die ewewigsdruk van die Boudouardreaksie, solank daar nog geen merkbare reduksiereaksies is nie. Wanneer die reduksiereaksies begin is die tempo daarvan gou hoër as die van die Boudouard. Die X_{CO} word dan nou afgetrek na die ewewigslyn van eers die magnetietreduksie en as dit klaar raak, die ewewigslyn van die wustietreaksie. Op die rand van die korrel word die X_{CO} nie soveel verlaag nie. Hier vind die Boudouard reaksie ietwat vinniger plaas as in die senter. Soos wat

die koolstofhoeveelheid afneem (Figuur 6-12) neem die tempo van die Boudouardreaksie ook en daal nader die X_{CO} al meer die ewewigs X_{CO} van die wustiet reduksie. (In die geval waar daar 'n oormaat koolstof was, styg die X_{CO} na een nadat al die wustiet omgesit is na yster.)

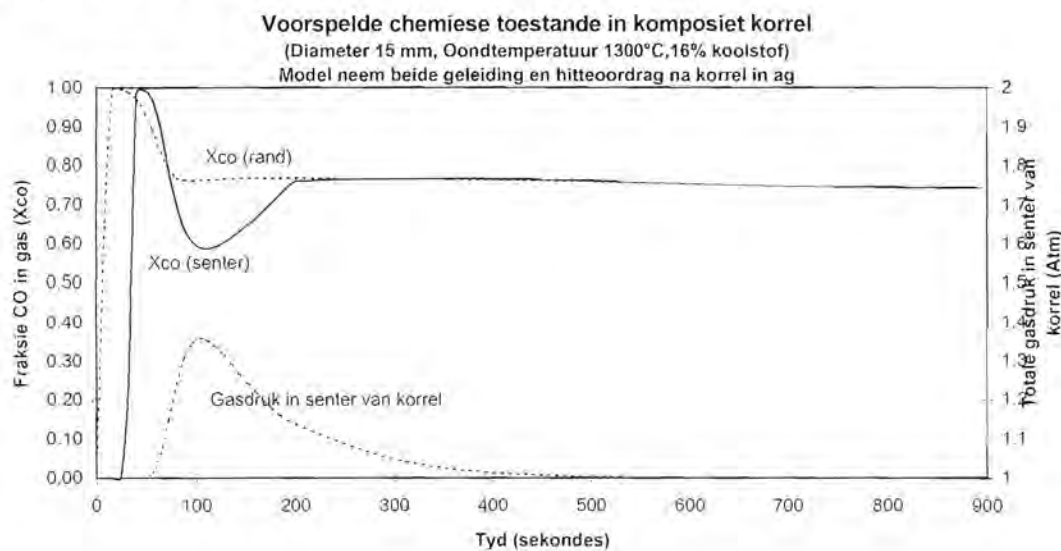
Figuur 6-12 Normale Model



Totale Druk

Die ontwikkeling van 'n drukverskil tussen binne en buite is hoofsaaklik verantwoordelik vir die verskil in tempo van Boudouardreaksie en gevolglik ook verskil in algehele reaksietempo tussen senter en rand. Dit word gestaaf in die volgende paragraaf.

Figuur 6-13 Normale Model



6.2.3.3 Homogene temperatuur in korrel

Met dieselfde modelparameters word nou 'n situasie beskou waar die temperatuur in die korrel homogeen is regdeur die verloop van die proses. Die ontwikkeling van druk en chemiese verskille is egter steeds in die berekening ingesluit. Dit is ekwivalent daaraan om te sê dat die geleidingsvermoë van die materiaal in die korrel neig na oneindig. Deur nou die resultaat van dié model met die vorige te vergelyk kan waargeneem word wat die effek van 'n beperkte geleidingsvermoë in die korrel is. Die chemiese reaksieverloop kan in Figuur 6-14 en Figuur 6-15 gesien word.

Metallisasie verloop met tyd:

Die waardes in Figuur 6-10 is die gemiddelde metallisasie van die hele korrel. Daar kan gesien word dat in die geval daar geen verhittingseffek is nie. Die reaksie begin binne die eerste paar sekondes plaasvind. Dit is omdat die temperatuur van die korrel heel gou 900°C verbystek. Daarna is die reaksieverloop taamlik soortgelyk aan die normale geval. Alhoewel die reaksies gouer begin, is die algehele tempo oor die volle reaksietyd stadiger as in die normale geval. Dit veroorsaak dat 90% metallisasie na ongeveer dieselfde tyd bereik word. Dit blyk dus dat al word die geleidingsvermoë tot oneindig verhoog dit bitter min effek het op die tyd nodig om die reaksies te voltooi.

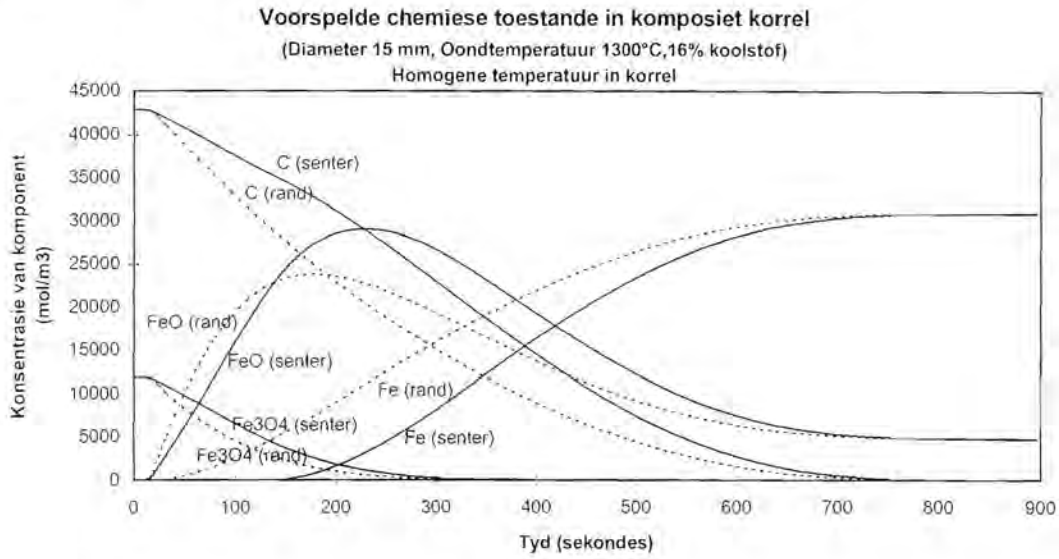
Temperatuur: (Figuur 6-11)

Die temperatuur verloop is baie dieselfde as in die normale geval. Dit is net aanvanklik heelwat hoër en daarna naby aan of laer as die gemiddelde temperatuur van die normale geval. Soos wat die Boudouardreaksie tempo optel met toename in temperatuur plat die temperatuur beide op die senter en op die rand van die korrel af. Wanneer die vergassingstempo afneem, begin die temperatuur weer skerper toe te neem totdat dit eindelijk die oondtemperatuur asimptoties nader.

Fraksie koolstofmonoksied in gas(X_{CO}): (Figuur 6-15)

Die X_{CO} baie styg skerp saam met die ewewigsdruk van die Boudouardreaksie omdat die temperatuur baie vinnig toeneem, solank daar nog geen merkbare reduksiereaksies is nie. Wanneer die reduksiereaksies begin is die tempo heelwat hoër as die van die Boudouard. Op die rand van die korrel word die X_{CO} nie soveel verlaag nie. Hier vind die Boudouard reaksie ietwat vinniger plaas as in die senter. Soos wat die koolstofhoeveelheid afneem (Figuur 6-14) neem die tempo van die Boudouardreaksie ook en daal nader die X_{CO} al meer die ewewigs X_{CO} van die wustiet reduksie. Alhoewel daar nou nie temperatuurverskil tussen senter en rand is nie, is daar steeds 'n geredelik verskil in chemiese samestelling.

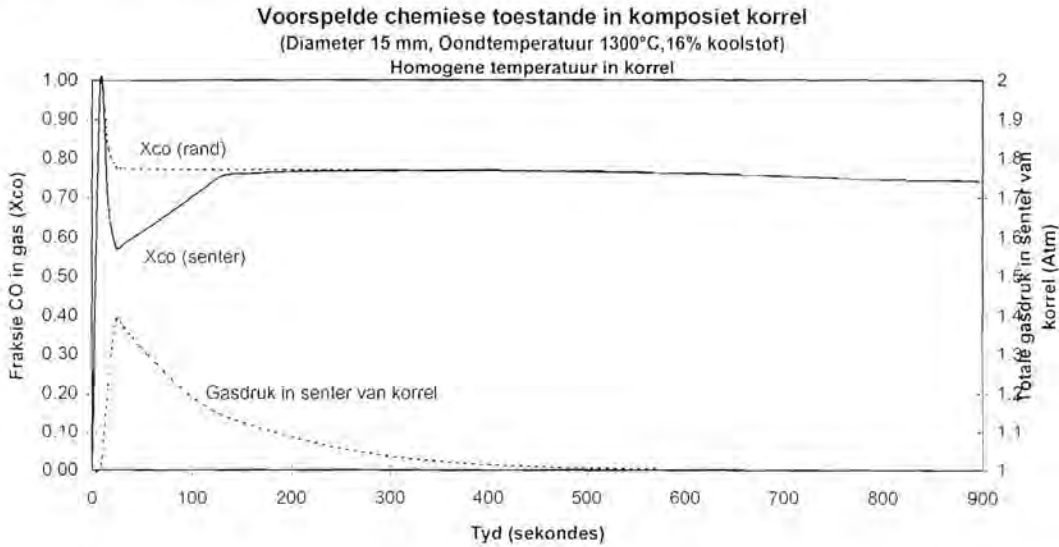
Figuur 6-14 Homogene temperatuur model



Totale Druk (Figuur 6-15)

Alhoewel daar geen temperatuurverskil is nie ontwikkel daar 'n netto hoeveelheid gas orals in die korrel. Die druk wat so opbou is genoeg om die Boudouard reaksie te vertraag. Die rede is dat die Boudouard reaksie produseer twee mol gas vir elke een mol gas wat dit verbruik. Omdat die Boudouardreaksietempo deur 'n vergelyking beskryf word wat afhanklik is van die partiële CO druk word dit word volgens Le Chatelier se beginsel dus vertraag as die totale druk toeneem.

Figuur 6-15 Homogene temperatuur model



6.2.3.4 Konstante temperatuur in korrel

In hierdie hipotetiese geval is dieselfde tempokonstantes en ander modelparameters weereens gebruik

Die korrel is egter dadelik by 1300°C geplaas en verder is daar geen energiebalans in die model ingesluit nie. Die temperatuur bly dus op 1300°C. Dit is ekwivalent daaraan dat enige hitte wat deur reaksie benodig word onmiddellik beskikbaar is. Soos gesien kan word in Figuur 6-10 het dit 'n baie drastiese effek op die algehele reaksietempo. Die tyd nodig om die reaksies te voltooi word omtrent 'n derde minder.

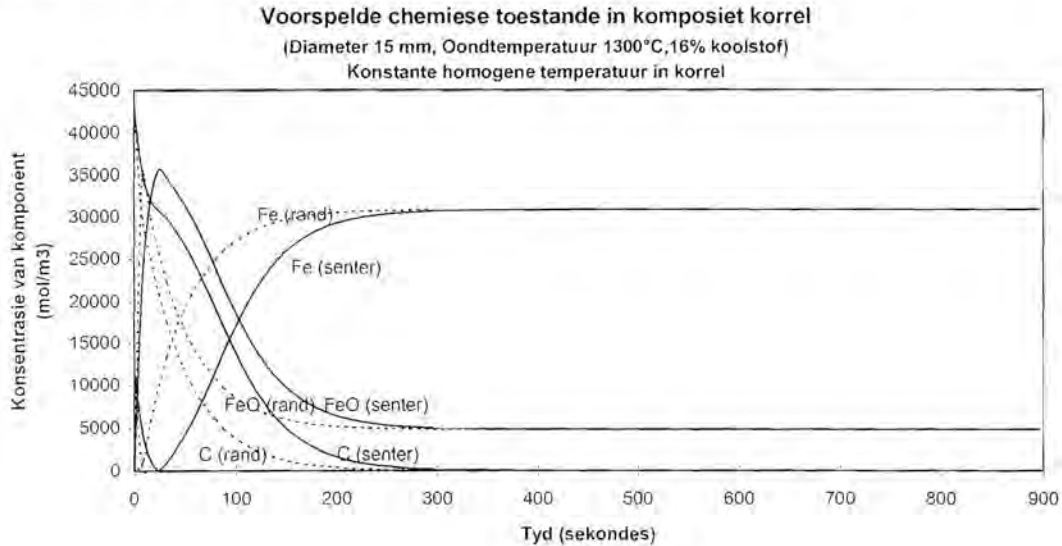
Volgens die figuur lyk dit of die fraksie reduksie by 'n hoër vlak begin as in die ander gevalle, maar dit is eintlik die vlak waar al die magnetiet omgesit is na wustiet. Die tyd waarin dit plaasgevind het is nie so duidelik op die tydskaal wat gebruik is nie.

Reaksieverloop:

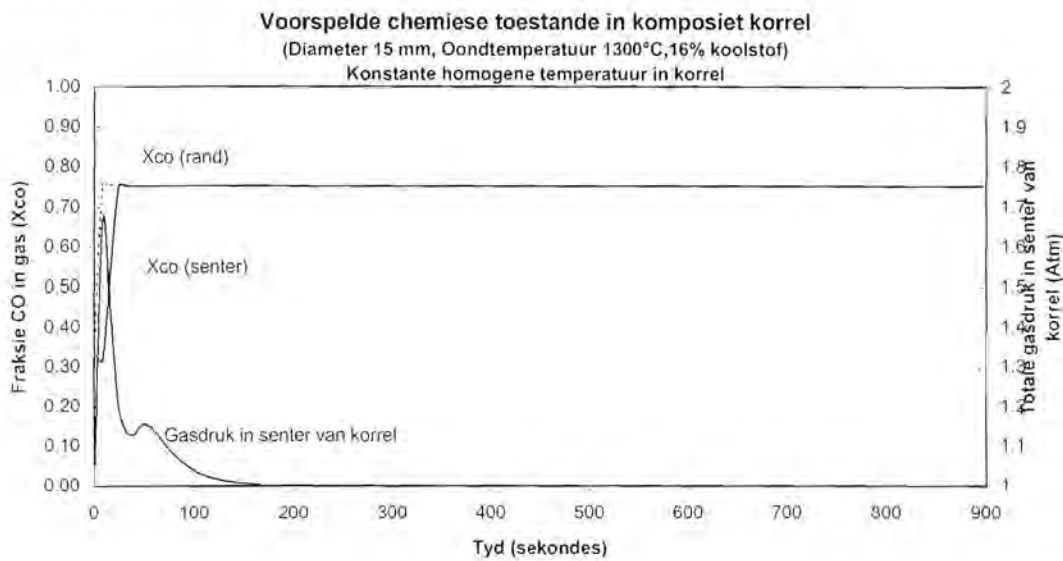
Daar is in die geval nog 'n veel groter verskil tussen die chemie in die senter en op die rand van die korrel (Figuur 6-16). Dit is as gevolg van die baie hoë druk (Figuur 6-17), wat weer die gevolg is van die hoë reaksietempo's

Daar ontwikkel so 'n groot gasdruk in die geval dat die korrel moontlik sal opbreek.

Figuur 6-16 Konstante temperatuur model



Figuur 6-17 Konstante temperatuur model



Uit voorafgaande bespreking blyk dit dus dat die tempo waarteen hitte aan die korrel verskaf word 'n groot perk plaas op die algehele reaksietempo. Die tempo waarteen hitte oorgedra word na die korrel word deur hoofsaaklik drie faktore bepaal:

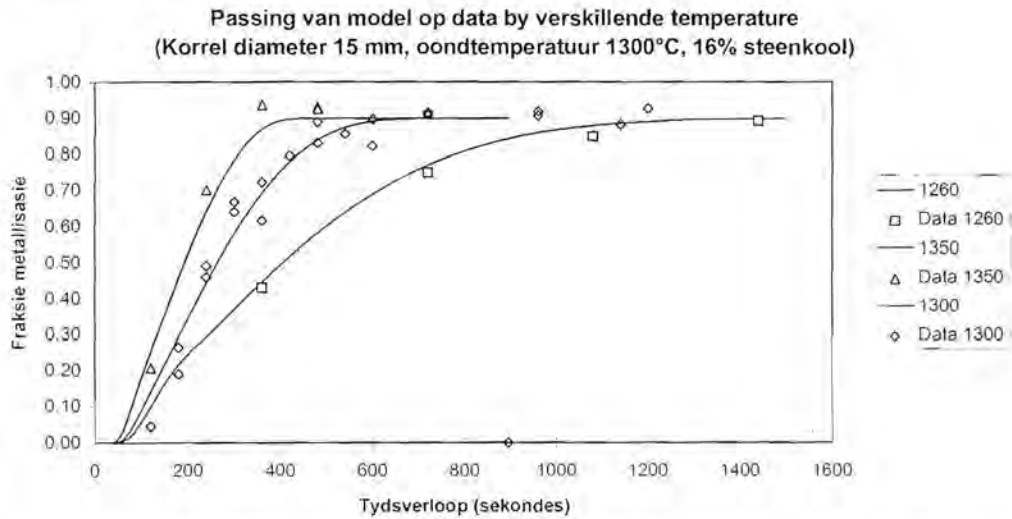
- die verskil tussen oondtemperatuur en korreloppervlak
- die emisiwiteit van die oppervlak.
- die grootte van die oppervlak

Prakties kan die effek wat elk van die faktore het aangetoon word in die volgende drie paragrawe.

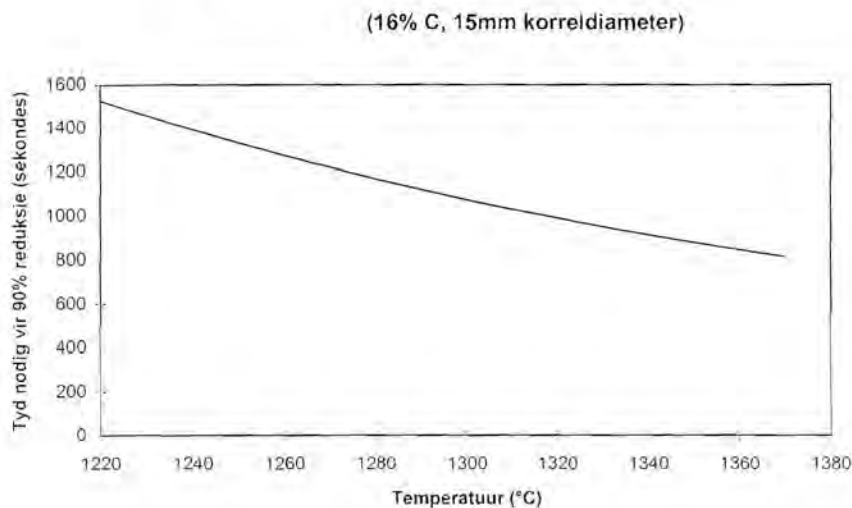
6.2.3.5 Oondtemperatuur

Deur die oondtemperatuur te verhoog word die verskil tussen die oond en oppervlaktetemperature verhoog. Die tempo word op twee wyse hierdeur bevoordeel. Eerstens deur dat die oondtemperatuur hoër is kan die korrel 'n hoër temperatuur bereik waarin die endotermiese reaksie "in balans" is met die tempo waarteen hitte verskaf word. Tweedens is die tempo van al die reaksies hoër by hoër temperature. Die effek word ondersteun deur eksperimentele resultate (Figuur 6-18) Hierdie resultaat kan ook deur die model geïnterpoleer en op 'n ander wyse voorgestel word (Figuur 6-19)

Figuur 6-18 Effek van oondtemperatuur op algehele reaksietempo



Figuur 6-19 Effek van Oondtemperatuur op algehele reaksietempo

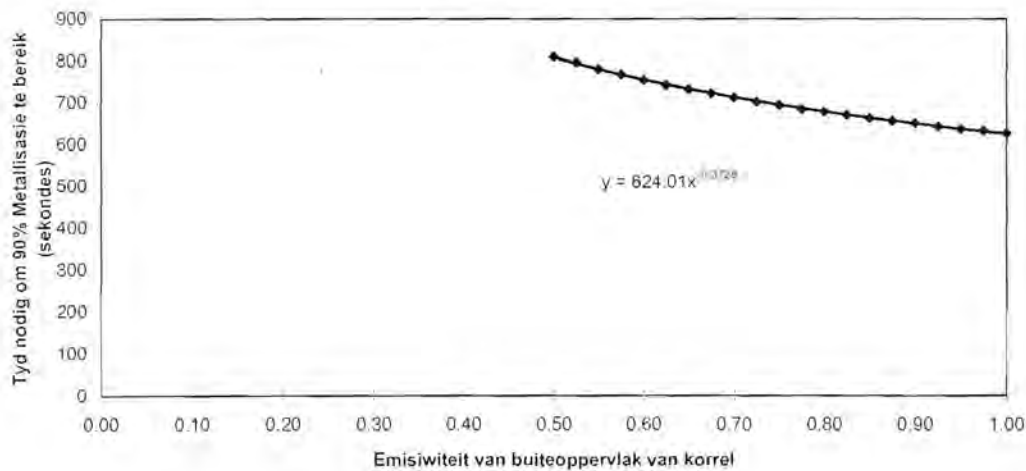


6.2.3.6 Emisiwiteit

Alhoewel dit moeilik is in die praktyk om die emisiwiteit van die korrels te verander is met die model getoets wat die effek is as dit gevarieer word vir waardes wat wissel van 0.5 tot 1.0. Die resultate is vir 'n korrel met diameter 15 mm en met 'n oondtemperatuur 1300°C. Die ander model parameters is soos in hoofstuk 4 gegee word. . Figuur 6-20 toon aan dat 'n halvering van die emisiwiteit en dus in effek die tempo waarteen hitte deur straling oorgedra kan word 'n 25 % effek op die totale reaksietempo het. Dit ondersteun die gevolgtrekking dat die tempo van hitteoordrag na die korrel toe 'n sterk beperking plaas op die algehele reaksietempo.

Figuur 6-20 Effek van verandering van emisiwiteit op algehele reaksietempo

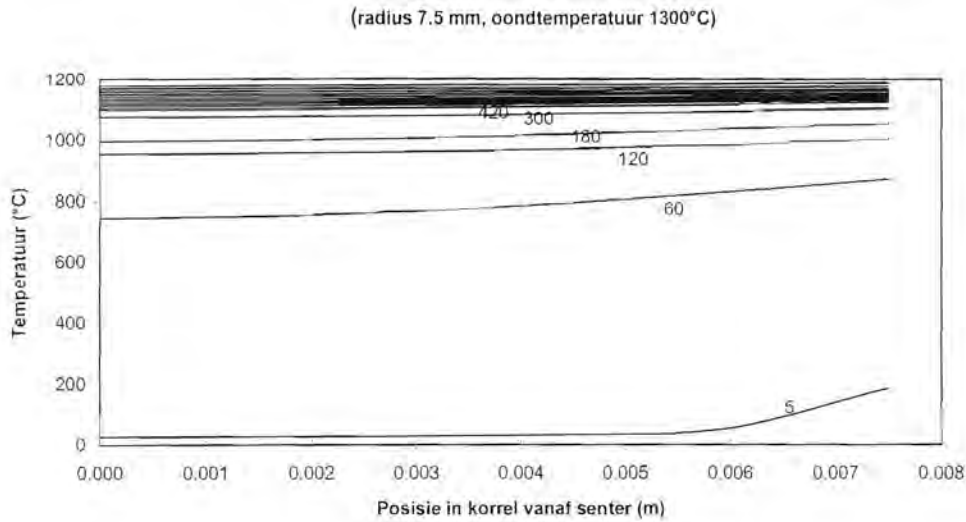
Oond temperatuur 1300°C 17% Koolstof, Sferiese korreldiameter 15 mm



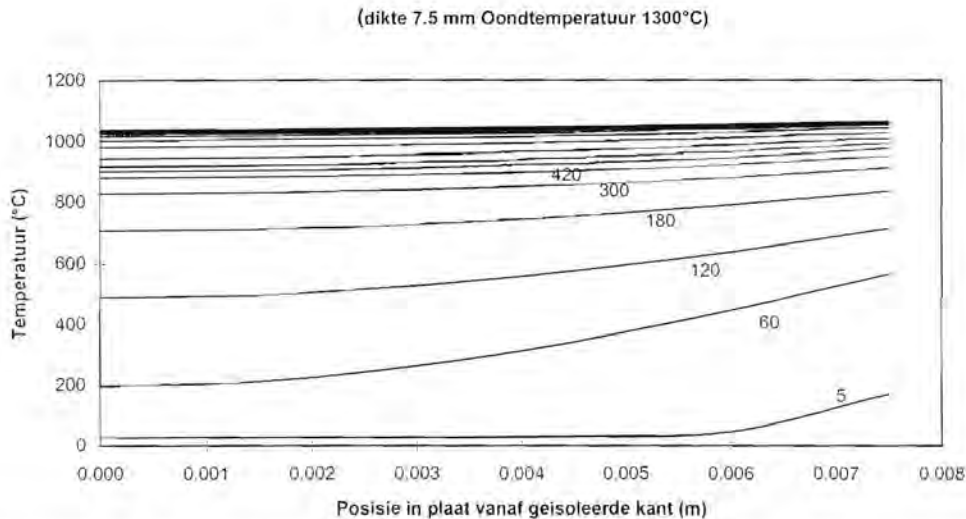
6.2.3.7 Geometriese vorm (Of effektiewe blootgestelde area)

Die effek van die keuse van die geometrie waarin die komposiet is word veral duidelik geïllustreer deur die verskil in die grootte en verandering van die temperatuurprofiel waar te neem tussen plaat en sferiese geometrie. Die plaat geometrie is as volg opgestel: Die materiaal word op plat vlak geplaas wat volkome geïsoleerd is. Dit word dan van die een kant af verhit op dieselfde wyse as die sfeer.

Figuur 6-21 Verandering in temperatuurprofiel met tyd in sferiese korrel



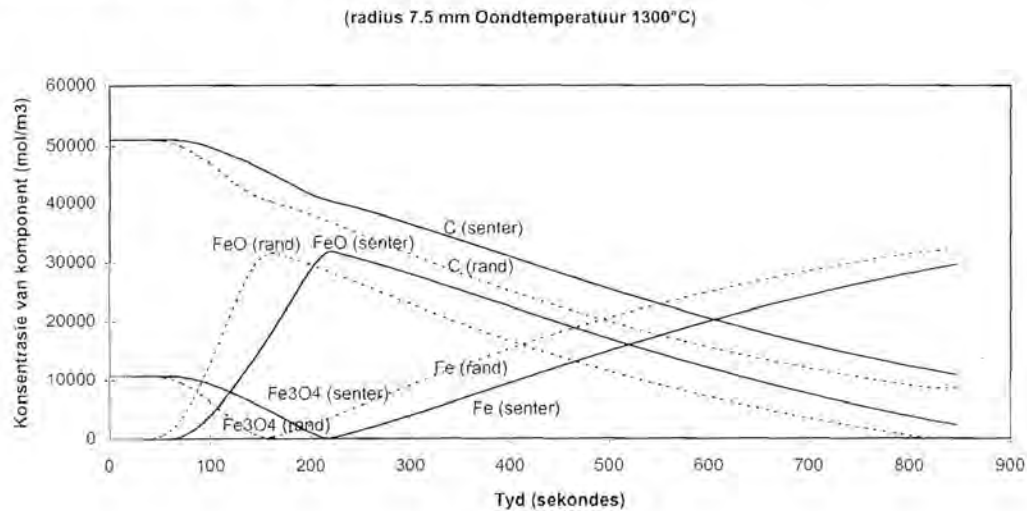
Figuur 6-22 Verandering van temperatuurgradiënt in komposiet plaat met tyd



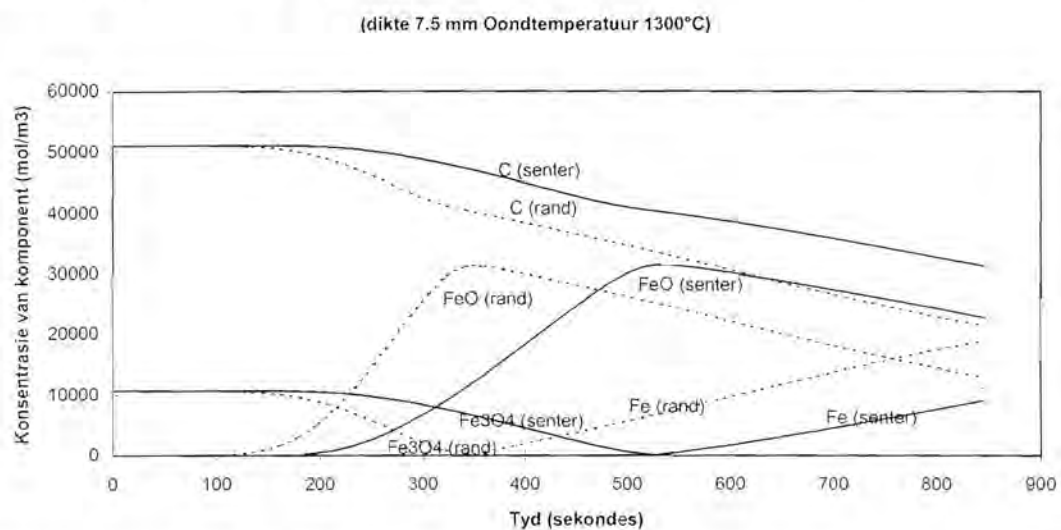
Die rede vir die verskil in gedrag is dat die plaat geval 'n baie groter volume tot oppervlak verhouding het op elke punt in die komposiet van buit af. Dit veroorsaak dat die plaat geval nie net langer neem om dieselfde temperature te bereik nie maar dat daar ook sterker temperatuurgradiënte ontwikkel. Met die silindriese geometrie is

die situasie beter as die plaat geval maar steeds swakker as die sferiese geval. In die praktyk waar die korrels op 'n bed gelaai word, en van een kant af verhit word, neig die hitteoordrag om meer soos die plaat geval op te tree. Dit is dus 'n aspek wat inderdaad aan aandag gegee moet word soos reeds in paragraaf 3.4.4 Hierdie verskil in geometrie het 'n nog groter effek in die chemiese situasie in die korrel. Dit kan gesien word deur die resultate vir plaat en sferiese geometrie te vergelyk in die volgende vier figure:

Figuur 6-23 Chemiese toestande in sferiese komposiet met verloop van tyd



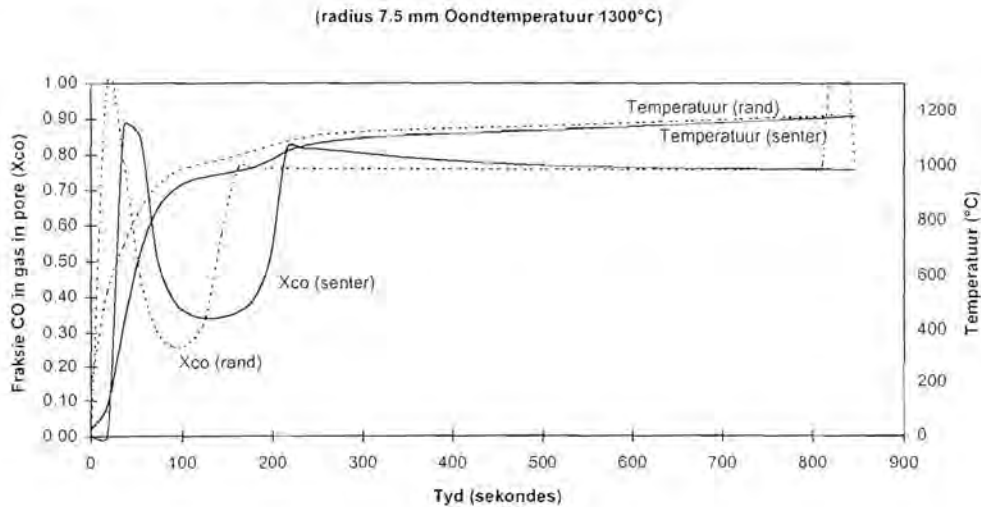
Figuur 6-24 Chemiese toestande in plaatvormige komposiet met verloop van tyd



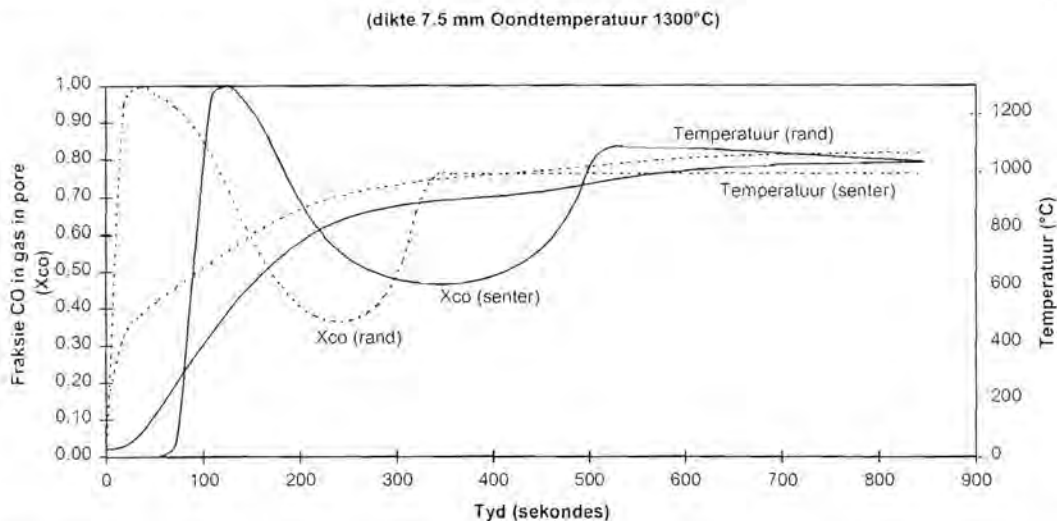
Eerstens word gemerk dat in die plaat geval daar 'n heelwat langer "verhittingstydperk" is. Dit is omtrent twee maal so lank as met die korrel. Al die chemiese reaksie vind ook omtrent die helfte so vinnig plaas. Daar is 'n groter verskil in samestelling tussen binne en buite. Dit is as gevolg van die groter temperatuurverskil wat ontstaan tussen binne (of geïsoleerde) kant en blootgestelde

kant. Die langer tyd wat die "binnekant" van die plaat by 'n hoër gasdruk is dra ook veral hiertoe by.

Figuur 6-25 Chemiese toestande in sferiese komposiet met verloop van tyd



Figuur 6-26 Chemiese toestande in plaatvormige komposiet met verloop van tyd



Bogenoemde figure toon duidelik die groot verskil in gedrag tussen plaat en sferiese geometrie. Met die plaat geval is daar heelwat groter verskil in temperature tussen binne en buite, as wat met die sferiese korrel die geval is. Verloop van die gassamestelling is ook soos die chemiese samestelling omtrent die helfte stadiger as met sferiese geometrie.

Bogenoemde waarnemings dui alles daarop die algehele reaksietempo drasties verbeter as die blootgestelde area tot volume verhouding ge-optimeer word. Aangesien hitteoordrag na die korrel 'n direkte funksie is van blootgestelde oppervlakarea, bevestig dit dat hitteoordrag na die korrels die algehele tempo beperk.

6.2.3.8 Geleidingsvermoë

Die geleidingsvermoë is een van die belangrikste faktore wat die temperatuurgradiënt in die korrel bepaal. Die faktore wat dit bepaal verander met tyd en verskil tussen die senter en die rand van die korrel.

Die faktore:

Temperatuur:

Soos die temperatuur verhoog, verhoog die geleidingsvermoë ook. In Figuur 6-27 verdubbel dit omtrent in die eerste 75 sekondes. Hierdie aanvanklike heelwat laer geleidingsvermoë aan die begin is die oorsaak van die sogenaamde verhittingseffek. Die korrel begin eers sigbaar te reageer na ongeveer 100 sekondes.

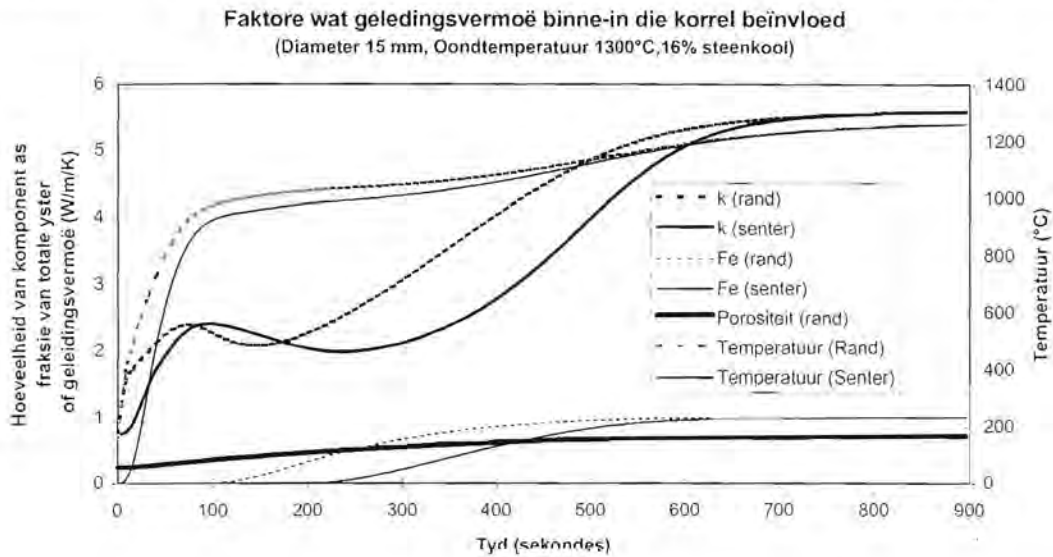
Porositeit:

Soos wat die reduksie reaksie begin en ook die Boudouard reaksie, raak die koolstof opgebruik. Die porositeit verhoog dus drasties soos wat die reaksies verloop. Dit het 'n negatiewe uitwerking op die geleidingsvermoë. In die senter verlaag dit heelwat

Metalliese yster:

Die Metalliese yster wat vorm het gemiddeld 'n heelwat beter geleidingsvermoë as die res van die materiaal. Soos wat al meer metaal gevorm word werk dit die effek van toenemende porositeit al meer teë. Vanaf die stadium dat 25% van die metaal gevorm het, oorheers die effek. Die geleidingsvermoë styg heelwat totdat dit weer 'n funksie van temperatuur nader wanneer al die metalliese yster gevorm het. Waar die temperatuur na die voltooiing van die reaksies nog styg, neem die geleidingsvermoë nog 'n bietjie toe. Daar kan ook gesien word dat die verskil in hoeveelheid metaal wat op 'n punt gevorm is 'n groot effek op die geleiding het.

Figuur 6-27 Veranderinge in geleidingsvermoë met tyd



Die modelberekeninge toon aan dat gedurende die reaksieverloop die gemiddelde geleidingsvermoë van die komposiet materiaal omtrent vervierdubbel. Die belangrikste oorsaak is die hoë geleidingsvermoë van die metaliese yster wat vorm.

Die waarde is egter voldoende sodat daar in die geval van die sferiese korrels van diameter kleiner as 15 mm nie 'n noemenswaardige temperatuurgradiënt is nie. (Sien ook Figuur 6-13). Die geleidingsvermoë is direk gekoppel aan reaksieverloop maar aangesien daar nie groot temperatuurverskille in dié korrels is nie is hitteoordrag in die korrels nie beperkend op die tempo nie.

Die praktiese implikasie is dat nie soveel sal help om te probeer om die geleidingsvermoë van die korrels van die grootte te verbeter om die algehele reaksietempo te verhoog nie.



6.2.3.9 Grootte van korrels

Met die grootte van die sferiese korrels is hitteoordrag in die korrels 'n weglaatbare effek maar met die groter silindriese korrels is daar duidelike temperatuurgradiënte in die korrel. Met groter korrels raak die tempo van hitteoordrag binne die korrels al hoe belangriker faktor wat die totale reaksietempo betref. Hierdie effek word geïllustreer deur Figuur 6-6.

6.2.3.10 Aanvanklike porositeit

Die aanvanklike porositeit het 'n driedubbele effek deurdat 'n verlaagde porositeit gasvloei in korrel vergemaklik, die geleidingsvermoë verlaag en maar verhouding van massa in korrel tot blootgestelde buite-area verhoog. Die modelresultaat toon dat die effekte mekaar in 'n mate uitkanseler deurdat daar nie 'n groot verandering in algehele tempo is met 'n verandering in porositeit van 20 na 35% nie.

6.2.4 Gasdruk in die korrel

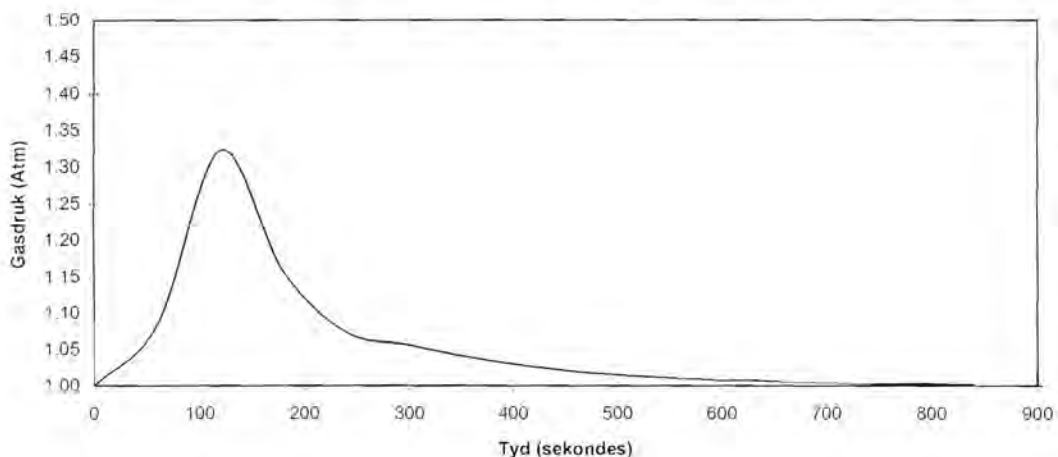
Die netto produksie van gas, die aanvanklik taamlik beperkte deurlaatbaarheid van die gas en die toename in die temperatuur van die korrel het tot gevolg dat 'n taamlike gasdruk in die korrels opbou. Dit bereik 'n maksimum aan die begin van die tyd wanneer die meeste gas geproduseer word. In Figuur 6-28 kan gesien word dat nog voor dat daar reaksies begin, daar reeds druk ontwikkel. Dit is as gevolg van toename in temperatuur. Die druk neem daarna skerp toe tot 'n piek. Dit is wanneer die reaksies 'n maksimum tempo bereik. Soos wat die proses verloop word die koolstof opgebruik en die digtheid van die vorm waarin die yster is neem ook af. Sodoende neem die porositeit baie toe. Die vergemaklik die vloei van gas heelwat. Hierdie "oopgaan" van die korrel verklaar dan die skerp afname in druk. Daarna neem die druk af saam soos wat die tempo van die reaksies afneem. Op die stadium wat die reaksies voltooi is, is die drukverskil ook weg. Figuur 6-29 toon die druk as funksie van posisie na verskillende tye.

Die groot effek wat die druk het op die chemie is waarneembaar in Figuur 6-12 asook in die eksperimentele resultate Figuur 6-2 en Figuur 6-3. Die rede hiervoor is reeds in paragraaf 6.2.3.2 bespreek. Dit is inderwaarheid 'n massa-oordrag effek. Die surplus gas kan aanvanklik nie vinnig genoeg uit die binnekant van die korrel uitkom nie.

Massa-oordrag speel dus ook 'n rol in die reaksiesistiem.

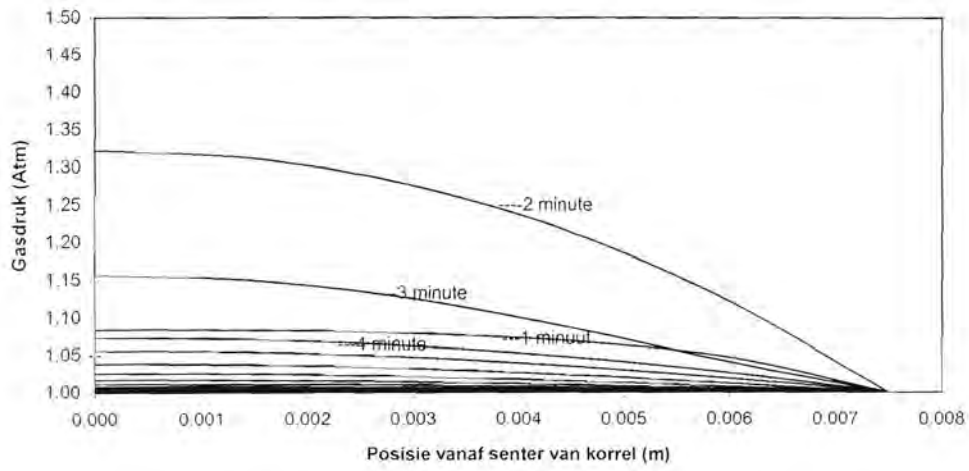
Figuur 6-28 Verandering in gasdruk in senter van korrel met verloop van tyd

(radius 7.5 mm Oondtemperatuur 1300°C)



Figuur 6-29 Verandering van gasdruk in korrel met tyd as 'n funksie van posisie

(radius 7.5 mm Oondtemperatuur 1300°C)



6.3 Ander Effekte

6.3.1 Effek van vlugstowwe

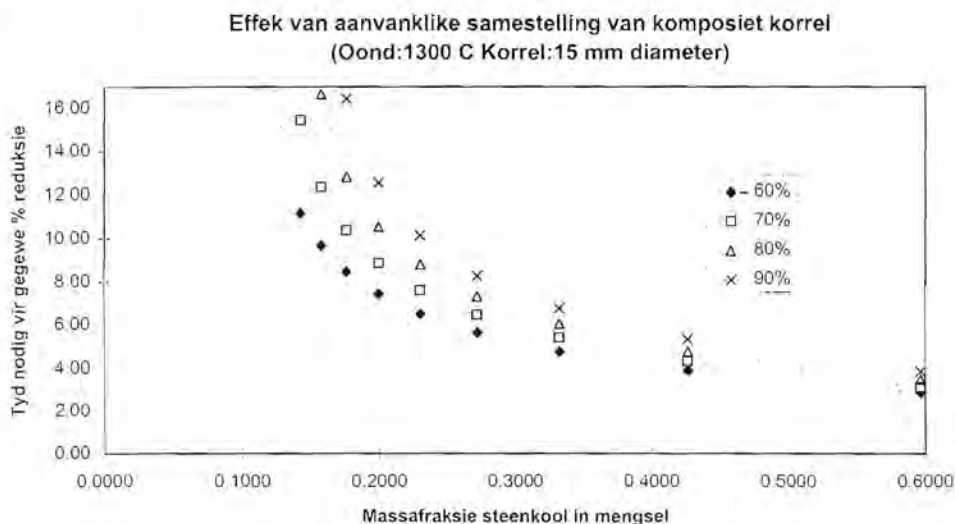
Aan die modelresultaat in word gesien dat daar nie 'n groot temperatuurgradiënt in die sferies korrels deur die model voorspel word nie. Die temperatuur is ook reeds bo die temperatuur waar daar verwag word dat die meeste vlugstowwe afgedryf word, vir die grootste deel van die tyd. Op die stadium wat die meeste reduksie plaasvind, kan daar volgens die model geen vlugstowwe meer wees wat kan deelneem aan die reaksies nie. (Sien Figuur 6-11)

Indien die afdryf van vlugstowwe in ag geneem word in die model sal dit alles plaasvind voordat noemenswaardige reduksie plaasgevind het. Dit is egter net geldig vir die gevalle waar daar nie 'n noemenswaardige temperatuurgradiënt in die korrel is nie. Met groter korrels kan die model egter nie uitspraak lewer oor die gedrag van vlugstowwe nie.

6.3.2 Aanvanklike samestelling

Die aanvanklike samestelling het die belangrikste effek op die finale samestelling van die produk wat betref swael en onsuierhede. Die vlak van metallisasie of finale koolstofinhoud word natuurlik ook hierdeur bepaal. Figuur 6-30 toon die tyd nodig om 'n verskillende vlakke van reduksie te bereik 'n Langer tyd beteken 'n laer algehele reaksietempo. Die grafieke toon asimptotiese gedrag soos verwag kan word uit die stoichiometrie. Solank as wat daar onvoldoende hoeveelheid koolstof beskikbaar is word die finale vlak van reduksie beperk daardeur.

Figuur 6-30 Byvoeging van ekstra koolstof



7. Gevolgtrekkings

Die studie toon aan dat 'n wiskundige model suksesvol aangewend kan word om die kinetika in 'n reagerende komposiet korrel te beskryf.

Die studie toon ook dat die tempo van hitteoordrag na en in die komposiet materiaal belangrike faktore is in die ontwerp en optimering van prosesse wat van komposiet materiaal gebruik maak.

Daar is gevind dat by korrels van die grootte wat getoets is hitteoordrag in die korrels nie beperkend is op die algehele reaksietempo nie. Volgens die modelvoorspellings is die temperatuurgradiënte in die korrel klein. Die studie toon ook aan dat die ontwikkeling van gasdruk binne die komposiet materiaal 'n belangrike invloed het op die chemiese samestelling daarvan. Daarvolgens kan die nie-homogene chemiese samestelling in die sferiese korrel verklaar word. Die bestaan van groot temperatuurgradiënte in die groot silindriese korrels toon aan dat in die groot korrels hitteoordrag in die korrels die algehele reaksietempo beperk.

Die tempo van die Boudouard reaksie speel egter ook 'n beduidende rol. Dit kan gesien word aan die hand van die beduidende effek wat die keuse van reduseermiddel het op die algehele reaksietempo (paragraaf 5.2.3.3). Dit word ook geïllustreer deur die modelresultaat in paragraaf 6.2.2.1

Volgens die berekende temperatuurverandering met tyd in die komposiet sferiese korrels is dit onwaarskynlik dat die vlugstowwe noemenswaardig aan die reaksies deelgeneem het omdat die temperature in die korrel reeds goed bo die temperatuur is waar vlugstowwe afgedryf word voordat enige noemenswaardig reduksie kan begin plaasvind.

Dit blyk uit die resultate dat swael is 'n wesentlike probleem in die tipe reaksiesisteme omdat omtrent alles daarvan in die produk herwin word.

8. Literatuurlys:

Abel P.R, Waters B.J, Koenig P.C, Squires R.G, Laurendeau N.M, *Reduction in accessible surface area and reactivity of a microporous coke upon catalyst addition,* FUEL, 1985, Vol 64, May, pp.613-615

Akiyama T, Ohta H, Takahashi R, Waseda Y. en Yagi J. *Measurement and Modeling of Thermal Conductivity for Dense Iron Oxide and Porous Iron Ore Agglomerates in Stepwise Reduction,* ISIJ INTERNATIONAL Vol 32 (1992), Nr 7, pp. 829 - 837

Balacerek T, *Midrex plans first commercial-scale Fastmet plant,* 13 August 1998, Metals Bulltin

Bandyopadhyay D. en Ahindra Ghosh, *Validity of rate equation based on Langmuir-Hinshelwood mechanism for gasification of carbon - a reappraisal,* Steel Research Vol 67 (1996) Nr.3

Chiu, Y. F., *Study of eoke petrography and factors affecting coke reactivity,* Ironmaking And Steelmaking, 1982, Vol 9, No 5, pp. 193-199

Chiu, Y-F and Hong, M-T, *Coke Reactivity: Effect of Fe_2O_3 and K_2CO_3 additions to the coal charge before carbonization,* FUEL, 1985, Vol 64 July, pp1007-1010

Donskoi E, D.L.S. McElwain, F. Lui, *Moddeling of FASTMET™ Process* Queensland University of Technology, School of Mathematics , 1996

Fogler H. Scott, *Elements of Chemical Reaction Engineering,* Tweede uitgawe, Prentice-Hall International Editions, 1992

Freund, H, *Kinetics of carbon gasification by CO_2 ,* FUEL, 1985, Vol 64, pp 657-660

Fruehan, R.J. *The rate of reduction of iron oxides by carbon.* Metall. Trans. B, vol 8B. 1977. pp 270-286

Hoffman G.E, Harada T, *A Status Report on the FASTMET™ Process From the Kakogawa Demonstration Plant,* Iron and Steel Maker, May 1997

Holman J.P, *Heat Transfer SI Metric Edition,* McGRaw-Hill, 1998

Hyslop W. *Carbon Solution and Coke Quality,* The Coke Oven Managers Yearbook, 1980, pp 131 - 152

Iwanaga, Y. and Takatani, K., *Mathematical Model Analysis for Oxidation of Coke at High Temperature,* ISIJ International, Vol 29 (1989) Nr 1, pp 43-48

- Kasai, A., Murayama, T., en Ono, Y.,** *Measurement of effective Thermal Conductivity of Coke*, ISIJ INTERNATIONAL Vol 33(1993), Nr 6, pp. 697 - 702
- Kaye, G.W.C, Laby, T.H,** *Tables of Physical and Chemical Constants* Longman, London, 1973, ISBN 0 582 46326 2
- Lepinski, J.A. and D.C Meissner,** *Application of the Fastmet Process Based on US Conditions*, SKILLINGS' MINING REVIEW, 22 Februarie 1992, pp. 4-6.
- Lepinski, J.A,** *A Midrex Technology Update: The FASTMET Process*, Direct from Midrex 4th Quarter 1992.
- Matthew S.P, Hayes P.C,** *In Situ Observations of the Gaseous Reduction of Magnetite*, Metallurgical Transactions B, Vol 21B, February 1990, pp.141-151
- Matthew, S.P, Hayes, P.C,** *Microstructural Changes Occuring during the Gaseous Reduction of Magnetite*. METALLURGICAL TRANSACTIONS B Vol 21B Feb 1990, pp 153-172
- Miura, Y.** *The Coke Oven Managers Yearbook*, 1978, p 292
- Nishioka K., Murayama T. en Ono Y.,** *Estimation of Effective Thermal Diffusivity of Porous Solid Using Data for Image Processing*, ISIJ INTERNATIONAL Vol 36(1996), Nr 2, pp. 150 - 155
- Patrick J.W. and Wilkinson H.C.** *Coke Reactivity*, *The Coke Oven Managers Yearbook*, 1980, pp 191 - 219
- Ramivex W.F,** *Computational Methods for Process Simulation*, pp 6-9, 1989
- Rao Y.K en Jalan B.P.,** *A Study of the Rates of Carbon-Carbondioxide Reaction in the Temperature Range 893°C to 1050°C* , Metallurgical transactions, Vol 3, September 1972 pp 2465-2477
- Rao, Y.K,** *The kinetics of the reduction of hematite by carbon*, Metall Trans., vol 2, 1971, pp. 1439-1447
- Riggion, J.M, Cohen, E, Lang, C,** *The Development of a Pelletizing Process for Fine Iron Ores*, JOURNAL OF THE IRON AND STEEL INSTITUTE, May 1954, pp.60-63
- Seaton. C.E, Foster, T.S. and Velasco, J.** *Reduction Kinetics of Hematite and Magnetite Pellets containing Coal Char*, ISIJ Transactions, Vol 23, 1983, pp 490-496
- Sharma, T.,** *Reduction of iron ore fines with coal fines*, Ironmaking and Steelmaking, Vol 20 No 5, 1993, pp. 362 - 265

Stephenson R.L, Smailer Ralph M. *DIRECT REDUCED IRON Technology and Use*, 1980, The Iron and Steel Society of AIME,

Sun S and Lu W-K, *A Study of Kinetics and Mechanisms of Iron Ore Reduction in Ore/Coal Composites*, STEELMAKING CONFERENCE PROCEEDINGS, Canada, 1996, pp 641 - 648,

Sun S and Lu W-K, *Mathematical Modelling of Reaction in Iron Ore - Coal Composites*, ISIJ INTERNATIONAL Vol 33. ,1993, Nr 10, pp. 1062 - 1069.

Sundarmurti N.S, Rao, V, *Effect of Firing Temperature and Porosity on Thermal Conductivity and Difusivity of Iron Ore Pellets*, ISIJ International Vol 36, (1996), No 8, pp 991-999

Szekely J, Aderibigbe D.A, *Coke Reactivity and its Effect on Blast Furnace Performance*, Ironmaking And Steelmaking 1981, Nr 4, pp. 420 - 429

Szekely J, Aderibigbe D.A, *Studies in Coke Reactivity: Part 2 mathematical model of reaction with allowance for pore diffusion and experimental verification*, Ironmaking And Steelmaking 1982, Nr 1 pp 32 - 43

Szekely J, Evens J.W, Hong Yong Sohn, *Gas-Solid Reactions*, 1976, ACADEMIC PRESS, London

Theron, J.A., *Swaelverdeling gedurende die direkte reduksie van ystererts*, Verhandeling, Universiteit van Pretoria, 1985

Van Niekerk ,W.H. Vegter N.M and Botha A.J. *Carbotermic Reduction of Pelletized Electric-arc-furnace Dust*, SAIMM, 1994, vol 2, pp. 35-43

Whitaker S. *Forced Convection Heat-Transfer Correlations for Flow in Pipes past Flat Plates, Single Cylinders, Single Spheres, and Flow in Packed Beds and Tube Bundles*, AIChE J. Vol 18 (1972), pp. 361

Wynnyckyj, J.R, McCurdy W.A. *Causes of the Shell and Core Structure and Layered Inhomogeneity in Iron Ore Pellets*, METALLURGICAL TRANSACTIONS Vol. 5 Okt 1974, pp.2207-2215

Zamalloa M., Ma D. en Utigard, T.A. *Oxidation Rates of Industrial Cokes with CO₂ and Air*, ISIJ International, Vol 35 (1995) Nr. 5 pp 458 - 463

9. Bylae

9.1 Eksperimentele metodes

9.1.1 Ondersoek na effek van tipe reduseermiddel

Die vier reduseermiddels is elk in 3 verhoudings gemeng met magnetiet erts en bentoniet as bindmiddel.

Die bindmiddel was in elke geval 1% van die mengsel.

Die samestellings is bereken volgens die %vaste koolstof wat elk van die reduseermiddels bevat. Daar is bepaal wat die stoichiometriese hoeveelheid koolstof is wat nodig is om al die Fe_3O_4 na Fe te reduseer as aanvaar word dat al die C na CO geoksideer word. Dan is daar nog twee ander samestellings vir elke brandstof bereken. Een met 10% meer vaste koolstof as wat stoichiometries nodig is en een met 10% minder koolstof. Die persentasie yster in die erts is 70% volgens Tabel 9-2. Daar is 1% bentoniet as bindmiddelgebruik

Die samestellings is bereken met die volgende formule

$$\%Reduseermiddel \in mengsel = \frac{100 - \%Bindmiddel}{1 + 3.663 \frac{\%VC \text{ in reduseermiddel}}{\%Fe \text{ in erts}}}$$

Die samestellings wat gebruik is, is dus soos in Tabel 9-1

Tabel 9-1 Samestellings wat getoets is (massa persent reduseermiddel)			
Reduseermiddel	10% minder	Stoichiometries	10% meer
Leeuwan-steenwou	23.9	25.9	27.7
Kooks	17.3	18.9	20.4
Antrasiet	17.0	18.5	20.0
Grafiet	14.9	16.3	17.6

Van die mengsel is korrels gemaak met diameter wat wissel tussen 13 en 18 mm.



Volgens die toets wat Midrex gedoen het, is 12 minute voldoende om die reaksie te voltooi.

'n Vertikale buis word gebruik om die toets te doen. 'n Mulliet buis is gebruik met lengte van 70cm en 5cm binnediameter. Die toets is gedoen in 'n oond waardeur N_2 gas gevoer is. 'n Gasvloei tempo van 10 l per uur is gebruik.

Die toets temperatuur is tussen $1275^\circ C$ en $1285^\circ C$. Die oond se beheermeganisme is ingestel op $1288^\circ C$. Daar is gemeet dat die temperatuur in die oond ongeveer $5^\circ C$ laer is in die sentrale as op die wand. Die temperatuur verspreiding in die oond is bepaal voor die toets uitgevoer is. Die temperatuur in die middelste 10cm, waar die korrels geplaas word, het nie meer as $10^\circ C$ verskil nie.

Daar is drie verskillende tye waarvoor elke samestelling getoets is. Ten minste twee toetses is vir elke tyd gedoen. Die tye wat die korrels getoets is, is onderskeidelik 4 min, 8 min en 12 min.

Korrels is met die hand uitgesoek en geweeg sodat die grootte nie veel verskil van toets tot toets nie. In die geval van die antrasiet en kookskorrels is 'n gemiddelde massa per korrel van 7.1 gram gebruik. Omdat die ander brandstowwe ander samestellings vereis het, is ander gemiddelde massas van toepassing om 'n soortgelyke grootte te verkry.

Die massa van elke korrel is voor en na 'n toets gemeet sodat massaverlies bepaal kan word. Die massaverlies is direk nadat 2 toetses gedoen is bereken. As dit meer as 5% verskil het is nog 'n toets of twee gedoen.

Die toetsprosedure word in 'n opvolgende paragraaf uiteengesit

9.1.2 Eksperimentele metode vir bepaling van beeldanalises (volume fraksie metaal)

Metallografiese bereiding:

Die gedroogde korrel word gemonteer in koue set hars en deurgesny. Die deurgesnyde oppervlak word dan weer m.b.v vakuüm met hars geïmpregneer. Die doel is om alle fyn los deeltjies vas te bind sodat dit nie tydens polering verlore gaan en in o.a in die polleerdoek beland nie. Dit is belangrik dat die oppervlak 'n verteenwoordigende snit is.

Ondersoek en bepaling van fases:

Foto's word geneem op verskillende posisies op die snit. Die posisies moet noukeurig aangeteken word.

Elke foto word dan geskandeer om 'n beeld te lewer opgebou uit 256 skakerings van grys. M.b.v 'n beeldverwerkingsprogram word die beeld verwerk sodat daar net 4 kleure is:

- Swart: Pore
- Donkergrys: wüstiet
- Liggrys: magnetiet
- Wit : Ystermetaal

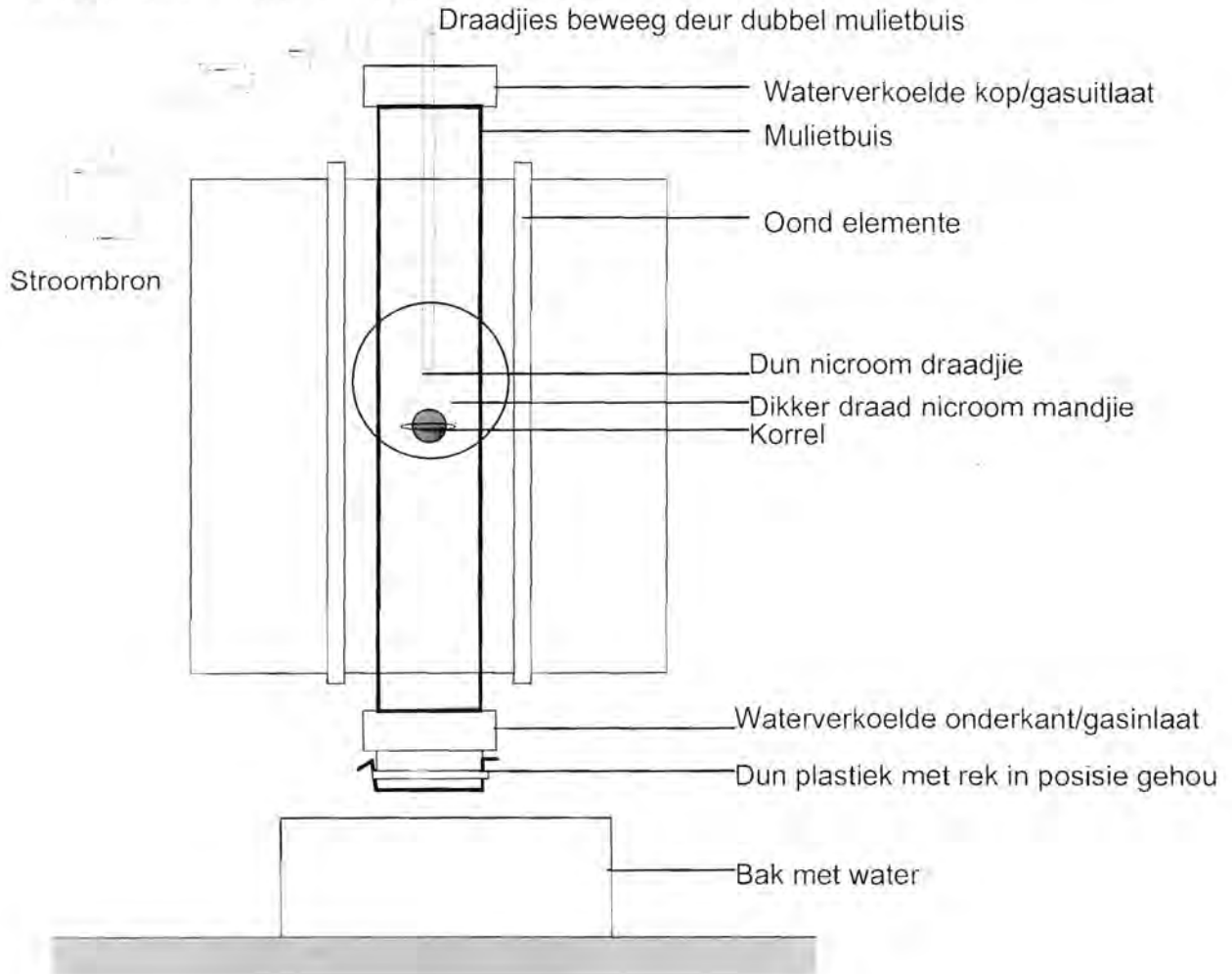
Tel van fases:

Die verwerkte beeld word gestoor in 'n lêer. M.b.v 'n ander program word die aantal piksels van elke kleur bepaal en omgesit in 'n mineralogiese analise. Deur die mineralogiese analises saam met die posisie in ag te neem word 'n resultaat verkry soos in Figuur 6-2 en Figuur 6-3.

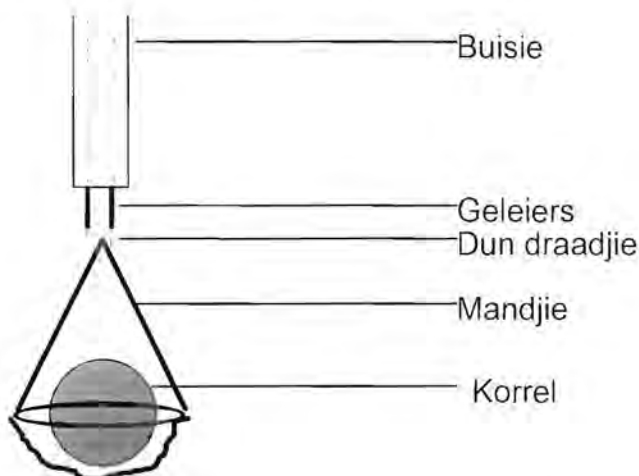
9.1.3 Eksperimentele opstelling vir enkelkorreltoetsing

Figuur 1 toon die hele opstelling saam met die oond. Die omringde gedeelte word verder vergroot en toegelig in figuur 2

Figuur 9-1 Oond en afblussisteesem



Figuur 9-2 Korrel in mandjie

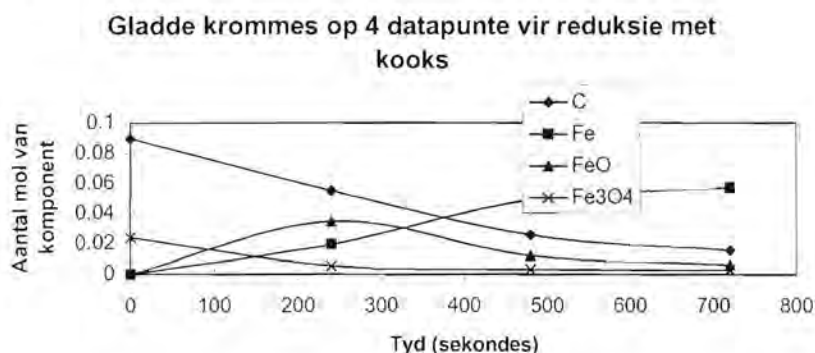


Aan die hand van bogenoemde twee figure word die eksperimentele opstelling wat gebruik is verduidelik. Die oond is vooraf verhit tot by die verlangde temperatuur terwyl die stikstof gas teen 2 cm/s in die buis opvloeit (by STD) Die boonste deksel kan verwyder word. Aan die deksel hang daar 'n muliet buisie waardeur daar twee nicroom draadjies gaan. Die onderpunte van die draade is verbind met 'n dun nicroom draadjie. Aan die dun draadjie hang 'n mandjie. Die mandjie is so gemaak dat maksimum straling die korrel wat daarin geplaas is kan bereik. Die lengte van die buisie is vooraf so verstel dat die korrel dadelik in die warmste deel van die buisoond geplaas word. Die tydelike deksel word nou verwyder en die samestelling word in die buis laat sak sodat die deksel op die bokant rus en die korrel dan in die oond hang. Die Tydsverloop vandat die oond oopgemaak is totdat die korrel op posisie is, is minder as 5 sekondes. Die boonste ente van die nicroomdrade word verbind aan 'n stroombron. Op die gegewe tyd wat die korrel verwyder moet word, word genoeg stroom deur die draade gestuur om die dun gedeelte waaraan die mandjie hang onmiddelik af te smelt. Die mandjie en korrel val dan deur die plastiek bodem van die oond. Die korrel word dadelik uit die water verwyder om heroksidasie te verhoed. Wanneer die korrel uit die water verwyder word is die korrel onmiddelik droog en amper nog te warm om vas te hou. Dit word egter verder met lug afgekoel. (Die korrel gloei niks meer as dit uit die water uit kom nie.

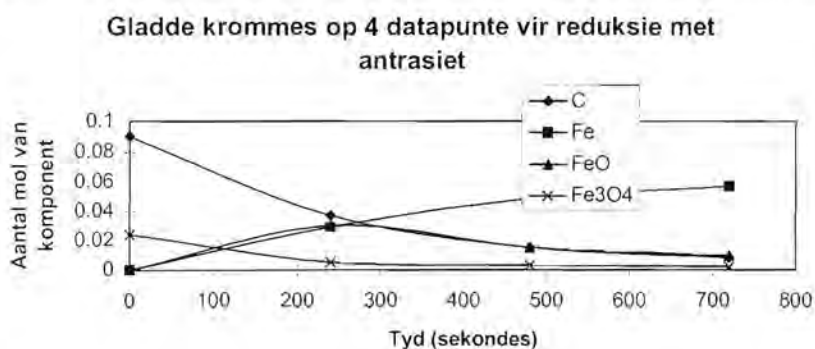
Oksidasie deur die water is as 'n moontlikheid beskou, maar mikroskopiese beskouing van die korrels het getoon dat daar geen waarneembare hoeveelhede hematiet of ysterhidroksied teenwoordig was nie

9.2 Verder verwerkte resultate van eerste reeks toetse

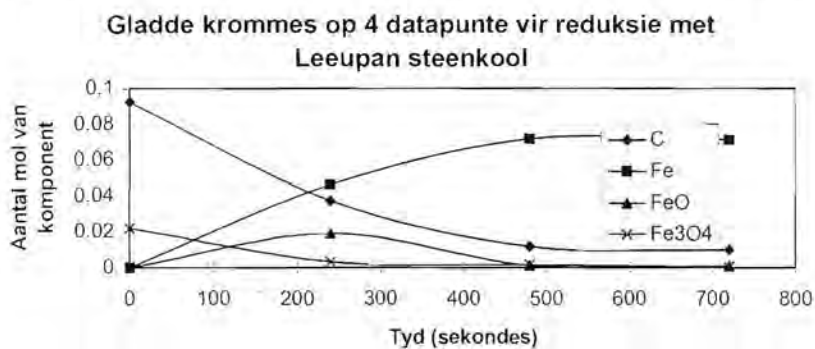
Figuur 9-3 Kinetika met kooks as reduseermiddel



Figuur 9-4 Kinetika met antrasiet as reduseermiddel

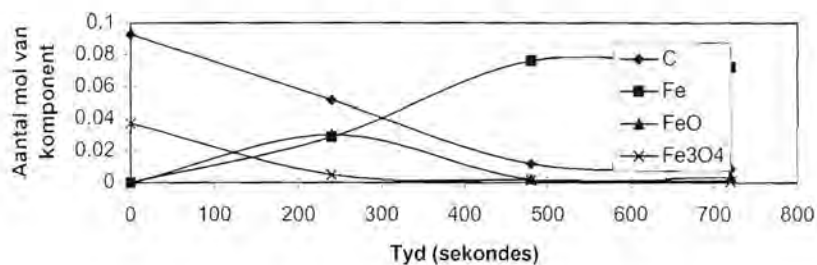


Figuur 9-5 Kinetika met Leeupan steenkool as reduseermiddel



Figuur 9-6 Kinetika met grafiet as reduseermiddel

Gladde krommes op 4 datapunte vir reduksie met grafiet



9.3 Eksperimentele data in onwerkte vorm

9.3.1 Eerste reeks toets

Tabel 9-2 Chemiese analyses van grondstowe wat gebruik is in die toetswerk

Hoeveelhede is in massa persentasie

Komponent	Erts	Kooks	Antrasiet	Leeuwpan steenkool	Grafiet
Vlug		5.64	9.63	22.89	1.2
As		13.36	7.37	16.11	1.8
Vaste C		81	83	61	97
Fe(totaal)	70				
SiO ₂	1.35	7.77	4.09	8.9	0.92
Al ₂ O ₃	0.19	3.84	2.03	5.46	0.78
S	0.08	0.77	0.74	1.00	0.01
CaO	0.11	0.8	0.42	0.42	0.063
MgO	0.18	0.18	0.09	0.33	0.028



Tabel 9-3 Rou chemiese data eerste toetsreeks

Rou chemiese data van eerste reeks toetse																
Reduseer																
Middel	Dosis	Tyd	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Fe(tot)	Swael	C	FeO	Fe(tot)	Fe ^o	Fe ²	Fe ³	C	
K	-	4"	3.12	1.31	0.47	0.32	68.1	0.22	10.20	53.20	68.10	17.20	41.34	9.56	10.097	
K	-	8"	3.39	1.33	0.46	0.29	79.0	0.24	5.06	25.60	79.00	50.70	19.89	8.41	5.897	
K	-	12"	3.51	1.52	0.44	0.28	85.2	0.26	2.81	12.80	85.20	82.20	9.95	-6.95	3.508	
K	s	4"	3.5	1.05	0.57	0.27	67.6	0.25	10.50	46.50	67.60	22.10	36.13	9.37	10.290	
K	s	8"	3.84	1.17	0.67	0.29	77.2	0.27	6.03	20.20	77.20	56.20	15.70	5.30	6.591	
K	s	12"	3.8	1.44	0.44	0.28	85.9	0.29	3.67	10.50	85.90	72.60	8.16	5.14	3.238	
K	+	4"	3.25	1.28	0.39	0.24	65.0	0.26	12.90	46.90	65.00	15.70	36.44	12.86	11.292	
K	+	8"	3.23	1.24	0.39	0.26	78.5	0.29	7.26	19.60	78.50	55.50	15.23	7.77	6.090	
K	+	12"	3.5	1.33	0.44	0.26	82.1	0.29	5.31	18.00	82.10	60.70	13.99	7.41	4.702	
A	-	4"	2.24	0.72	0.29	0.23	72.4	0.18	5.30	57.00	72.40	16.80	44.29	11.31	8.440	
A	-	8"	2.51	0.82	0.41	0.26	80.2	0.17	1.56	44.10	80.20	33.70	34.27	12.23	5.434	
A	-	12"	2.56	0.85	0.39	0.27	83.6	0.18	0.29	35.10	83.60	46.80	27.27	9.53	4.124	
A	s	4"	2.61	1.01	0.38	0.24	74.9	0.24	8.92	34.00	74.90	39.70	26.42	8.78	7.477	
A	s	8"	2.75	1.03	0.36	0.25	80.6	0.27	5.41	15.90	80.60	64.10	12.35	4.15	5.280	
A	s	12"	2.79	1.01	0.35	0.26	86.1	0.26	3.56	10.00	86.10	75.50	7.77	2.83	3.161	
A	+	4"	2.47	0.88	0.39	0.24	71.7	0.22	9.11	41.80	71.70	28.90	32.48	10.32	8.710	
A	+	8"	2.68	0.92	0.42	0.26	81.0	0.23	3.90	18.40	81.00	62.10	14.30	4.60	5.126	
A	+	12"	2.83	0.95	0.42	0.27	86.9	0.24	2.40	8.16	86.90	77.30	6.34	3.26	2.853	
L	-	4"	3.73	2.08	0.73	0.33	75.0	0.3	6.46	32.00	75.00	42.10	24.86	8.04	7.438	
L	-	8"	3.72	2.06	0.74	0.32	84.8	0.34	1.97	7.55	84.80	75.20	5.87	3.73	3.662	
L	-	12"	3.68	2.02	0.68	0.32	86.5	0.34	1.04	4.06	86.50	80.90	3.15	2.45	3.007	
L	s	4"	3.84	2.34	0.77	0.32	74.0	0.34	7.98	30.00	74.00	44.90	23.31	5.79	7.824	
L	s	8"	3.52	1.98	0.69	0.3	85.2	0.36	1.78	3.13	85.20	81.20	2.43	1.57	3.508	
L	s	12"	4.31	2.43	0.8	0.36	85.0	0.4	2.44	1.08	85.00	84.20	0.84	-0.04	3.585	
L	+	4"	4.14	2.44	0.77	0.34	71.0	0.39	9.19	21.80	71.00	49.00	16.94	5.06	8.980	
L	+	8"	4.57	3.35	0.84	0.36	87.1	0.4	4.56	1.69	87.10	80.20	1.31	5.59	2.775	
L	+	12"	4.6	2.67	0.84	0.36	85.0	0.4	3.94	0.79	85.00	84.50	0.61	-0.11	3.585	
G	-	4"	1.85	0.44	0.41	0.25	72.7	0.066	8.39	44.60	72.70	29.30	34.65	8.75	8.325	
G	-	8"	2.66	0.5	0.43	0.27	86.5	0.081	2.18	9.86	86.50	75.90	7.66	2.94	3.007	
G	-	12"	2.05	0.59	0.53	0.32	88.0	0.084	0.64	7.03	88.00	82.90	5.46	-0.36	2.429	
G	s	4"	1.74	0.4	0.43	0.23	71.5	0.074	11.20	42.60	71.50	29.30	33.10	9.10	8.787	
G	s	8"	1.64	0.4	0.47	0.25	93.3	0.082	3.11	3.72	93.30	86.80	2.89	3.61	0.386	
G	s	12"	0.93	0.26	0.45	0.22	88.9	0.073	2.20	1.78	88.90	92.60	1.38	-5.08	2.082	
G	+	4"	1.68	0.39	0.41	0.23	72.0	0.073	12.90	45.20	72.00	25.20	35.12	11.68	8.594	
G	+	8"	1.09	0.4	0.36	0.19	93.2	0.083	3.11	1.79	93.20	88.30	1.39	3.51	0.425	
G	+	12"	1.15	0.46	0.47	0.21	95.1	0.091	3.66	11.00	95.10	76.80	8.55	9.75	-0.307	



Tabel 9-4 Grootteverspreiding van grondstowwe gebruik

um	Gemid	Log(gemid)	Grootteverspreiding van grondstowwe									
			Antrasiet		Kooks		Steenkool		Grafiet		Zandrivierspoort	
			Klas	Kum	Klas	Kum	Klas	Kum	Klas	Kum	Klas	Kum
2.4	2.81	0.3802	1.7	1.7	3.2	3.2	1.6	1.6	0	0	0.2	0.2
3.3	3.94	0.5185	4.9	3.2	8	4.8	4.9	3.3	0	0	1.2	1
4.7	5.57	0.6721	9.8	4.9	14.6	6.6	9.9	5	0.9	0.9	3.4	2.2
6.6	7.88	0.8195	14.5	4.7	19.6	5	15.3	5.4	2.9	2	5.6	2.2
9.4	11.05	0.9731	23.2	8.7	27.7	8.1	23.4	8.1	7.9	5	12.5	6.9
13	15.72	1.1139	28	4.8	35.3	7.6	31.3	7.9	14	6.1	22.5	10
19	22.65	1.2788	35.9	7.9	44.1	8.8	40.6	9.3	21.7	7.7	34.9	12.4
27	32.03	1.4314	44.2	8.3	57.4	13.3	50.8	10.2	33.1	11.4	50.3	15.4
38	44.88	1.5798	54.2	10	70.7	13.3	61.3	10.5	45.9	12.8	65.8	15.5
53	63.05	1.7243	65.8	11.6	83.8	13.1	72.6	11.3	59.9	14	79.2	13.4
75	89.16	1.8751	79	13.2	92.6	8.8	84.7	12.1	76.8	16.9	91.8	12.6
106	126.10	2.0253	91.8	12.8	97.5	4.9	94.5	9.8	88.6	11.8	97.9	6.1
150	178.33	2.1761	97.9	6.1	99	1.5	98.5	4	96.5	7.9	99.5	1.6
212	252.19	2.3263	100	2.1	100	1	100	1.5	100	3.5	99.7	0.2
300		2.4771	100	0	100	0	100	0	100	0	100	0.3
				100		100		100		100		100

Tabel 9-5 Partikelgrootte

Gemiddelde grootte van partikels, Dp [um]	
Antrasiet	18.9
Kooks	14.6
Steenkool	17.83
Grafiet	35.71
Zandrivierspoort	24.72

Tabel 9-6 Partikel deurlaatgrootte

Deurlaat groottes in [um]					
Persentasie deur	Antrasiet	Kooks	Steenkool	Grafiet	Zandrivierspoort
%10	4.78	3.73	4.73	10.6	8.37
%50	33.37	23	26.36	42.2	26.87
%80	77.39	48.67	66.49	83.5	54.35



9.3.2 Tweede reeks toetse onverwerkte data

Tabel 9-7 Massadata in gram na verskikkelende tye van behandeling van met 15% kooks as reduseermiddel

1300°C	Voor	Na	
	2	5.65	5.55
	3	6.20	5.73
	3	5.68	5.08
	4	5.79	4.65
	4	6.08	4.96
	5	4.38	3.21
	5	4.72	3.51
	6	7.34	5.53
	6	5.40	3.84
	7	6.07	4.14
	7	5.59	3.81
	8	6.35	4.24
	8	4.19	2.70
	9	6.19	4.07
	10	7.39	4.96
	10	5.72	3.67
	12	5.00	3.17
	12	5.04	3.21
	16	5.91	3.74
	16	4.94	3.15
	19	5.64	3.65
	20	5.45	3.43

Tabel 9-8 Massa in gram van toets waar korrel van verskillende diameters almal 10 minute by 1300°C behandel is (samestelling selfde as vorige)

Voor	Na
7.39	4.96
5.72	3.67
5.55	3.58
6.75	4.44
5.00	3.18
5.66	3.71
6.15	3.97



Tabel 9-9 Massadata van korrels getoets by verskillende temperature, materiaal selfde as in vorige tabel

1280°C	Voor	Na	
	6	4.83	3.73
	10	6.01	4.22
	16	5.96	3.85
	24	6.75	4.29
1260°C			
	6	6.16	5.10
	12	6.01	4.21
	18	6.10	4.03
	24	6.00	3.86
1327°C			
	3	6.18	5.31
	6	5.95	4.03
	9	4.23	2.71
	12	3.17	1.88
1350°C			
	2	5.67	5.2
	4	5.35	3.85
	6	5.42	3.39
	8	5.08	3.19
	8	5.67	3.57

9.3.3 Resultate van eerste reeks toetse verwerkte waardes

Redid	Tyd	Mass Gem	Swael Gem	C Gem	Fe(tot) Gem	Fe(tot)+vs gem	Fe(tot)-vs gem	Fe(tot)ber Gem	FeO Gem	Fe ¹ Gem	Fe ² Gem	Fe ³ Gem	SiO ₂ Gem	Al ₂ O ₃ Gem	CaO Gem	MgO Gem	
K	0	1.00	0.21	15.28	56.79	56.79	56.79	56.79	0.00	24.34	0.00	16.93	37.86	2.56	0.88	0.24	0.08
K	4	0.64	0.24	11.20	66.90	66.00	67.80	67.80	-0.90	48.87	16.33	37.97	10.60	3.29	1.21	0.48	0.28
K	8	0.72	0.27	6.12	76.23	77.21	79.26	79.26	-1.02	21.80	54.13	16.94	7.16	3.49	1.25	0.51	0.28
Korrels	12	0.67	0.28	2.93	84.40	84.46	84.34	84.34	0.00	13.77	67.17	10.70	6.54	3.60	1.43	0.44	0.27
A	0	1.00	0.20	15.36	57.05	57.05	57.05	57.05	0.00	24.45	0.00	19.01	38.04	1.86	0.51	0.17	0.07
A	4	0.81	0.21	7.78	73.00	75.35	70.65	70.65	2.35	44.27	28.47	34.40	10.14	2.44	0.87	0.35	0.24
A	8	0.72	0.22	3.62	80.60	81.64	79.56	79.56	1.04	26.13	53.30	20.31	6.99	2.65	0.92	0.40	0.26
Antisiel	12	0.68	0.23	2.08	85.53	86.65	84.41	84.41	1.12	17.75	66.53	13.79	5.21	2.73	0.94	0.39	0.27
L	0	1.00	0.32	15.78	51.92	51.92	51.92	51.92	0.00	22.25	0.00	17.30	34.61	3.30	1.55	0.19	0.14
L	4	0.71	0.34	7.88	73.33	73.75	72.92	72.92	0.41	27.93	45.33	21.79	6.30	3.90	2.29	0.76	0.33
L	8	0.63	0.37	2.77	85.70	88.38	83.02	83.02	2.66	4.12	78.87	3.20	3.63	3.94	2.46	0.76	0.33
van steel	12	0.60	0.38	2.47	85.50	84.64	86.36	86.36	-0.86	1.98	83.20	1.54	0.76	4.20	2.37	0.77	0.35
G	0	1.00	0.07	15.78	58.61	58.61	58.61	58.61	0.00	25.12	0.00	19.53	39.06	1.28	0.20	0.10	0.06
G	4	0.80	0.07	10.83	72.07	70.91	73.22	73.22	-1.16	44.13	27.03	34.29	9.84	1.76	0.41	0.42	0.34
G	8	0.62	0.06	2.80	91.00	88.04	93.96	93.96	-2.96	5.12	83.57	3.98	3.35	1.80	0.43	0.42	0.24
Gruel	12	0.59	0.06	2.17	90.73	82.32	99.15	99.15	-8.42	6.60	84.10	5.13	1.50	1.38	0.44	0.48	0.25

9.3.4 Mikroskopiese foto's van snitte deur korrels

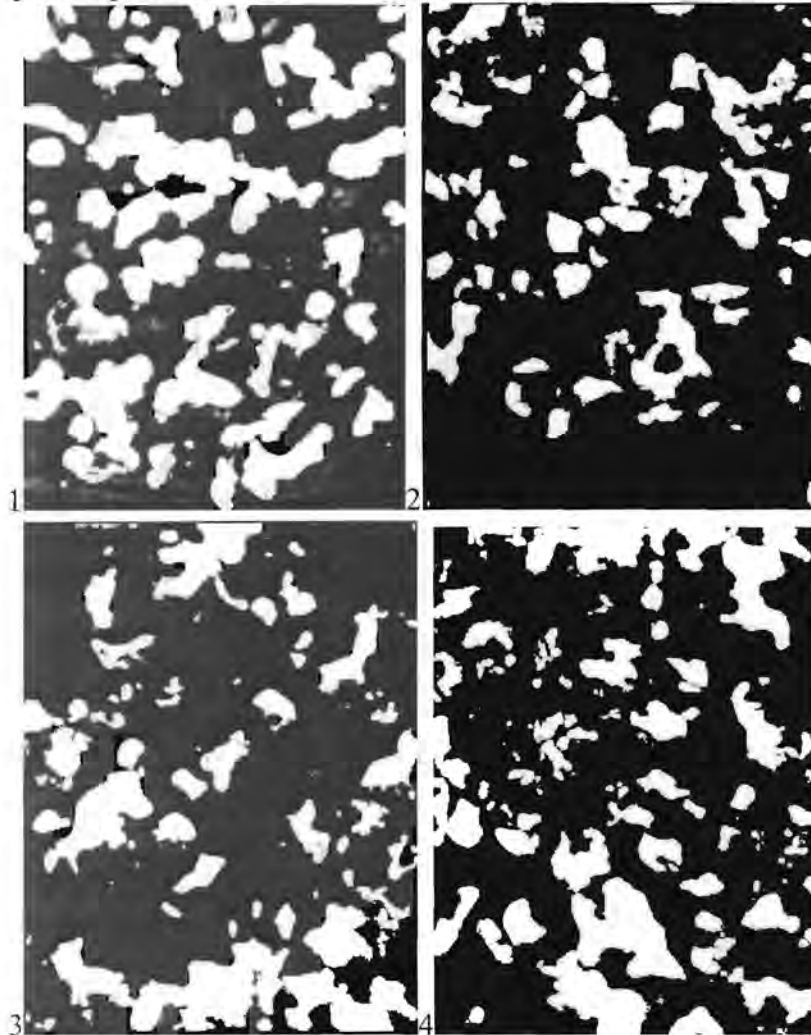
Die donkergrys is magnetiet. Die liggrys is wüstiet, Die wit is yster, 'n Donkergrys fase met 'n grower tekstuur is oorblyfsels van die kooks. Die swart is pore.

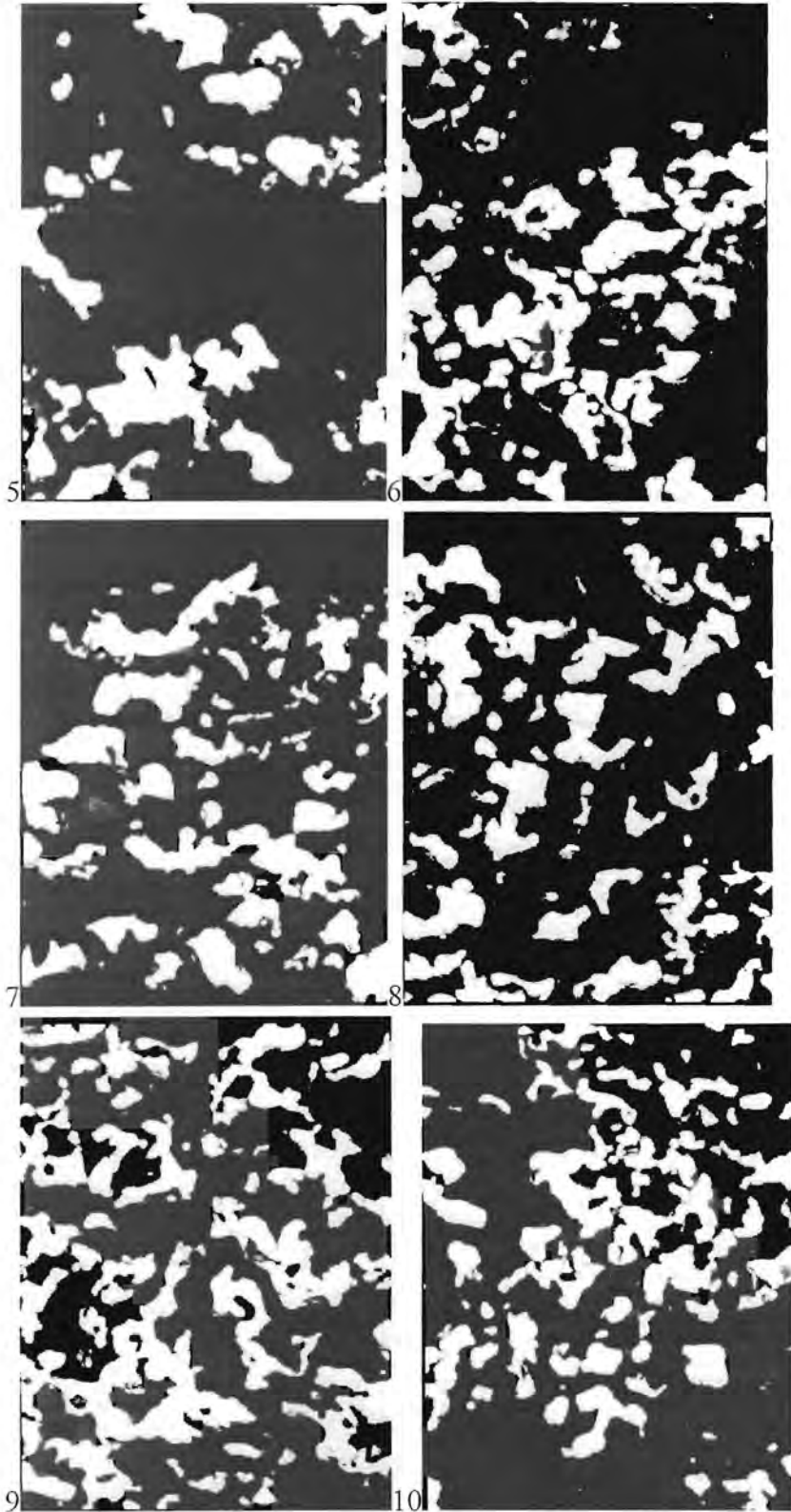
Die fotos is van 'n monsters wat by 1300°C behandel is vir 12 minute.

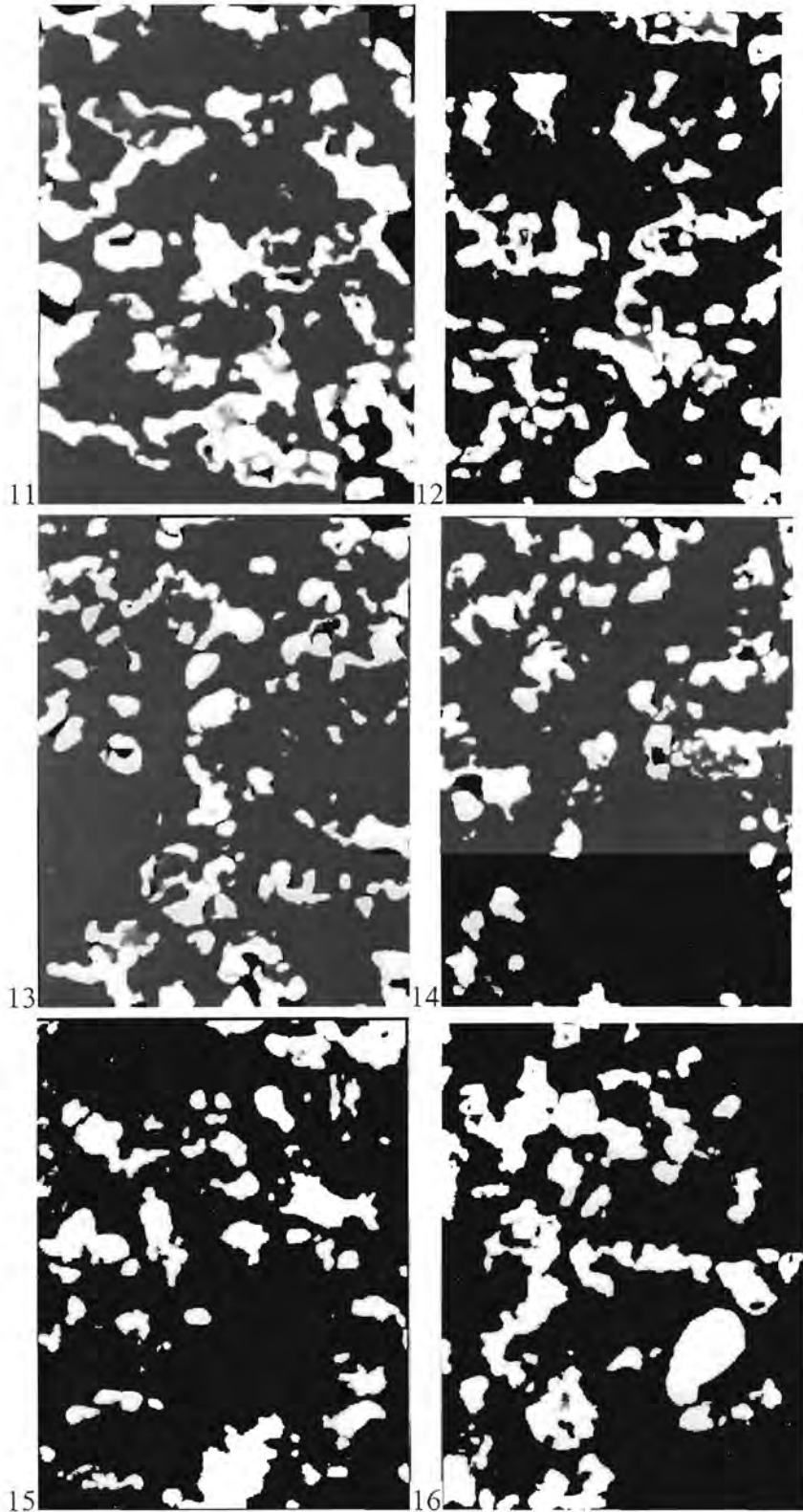
Eerste monster (Antrasiet as reduseermiddel):

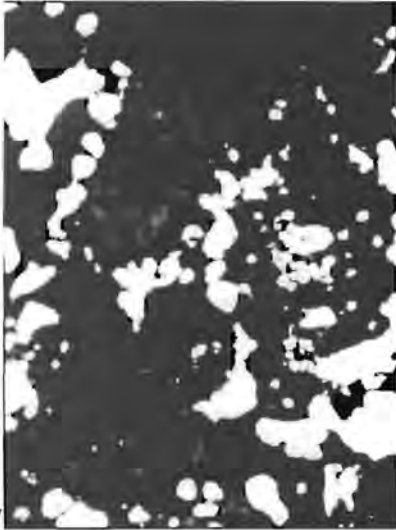
L.W die foto's is in volgorde van binne na buite geneem Die vergroting is so dat elke foto ongeveer 'n halwe milimeter wyd is. Die eerste stel foto's is genummer van 1 tot 17 die linkerkant van elke foto sluit direk aan by die regterkant van die volgende een. Die linkerkant is die naaste aan die middel van die korrel.

Figuur 9-7 Mikroskopiese beelde van 'n snit deur 'n gereageerde korrel (Antrasiet as reduseermiddel)









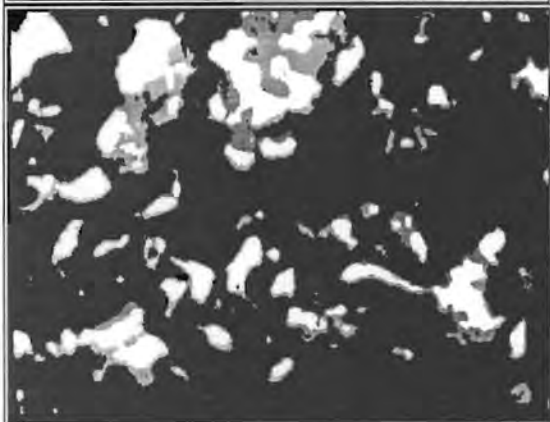
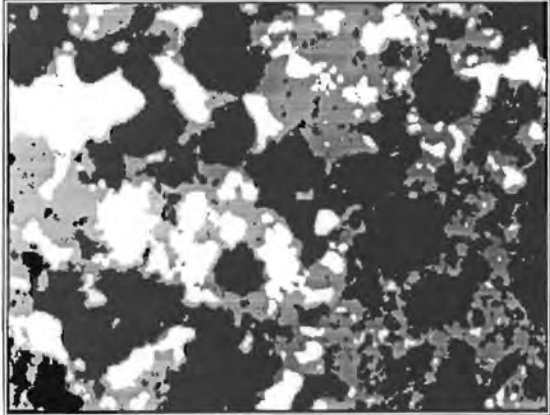
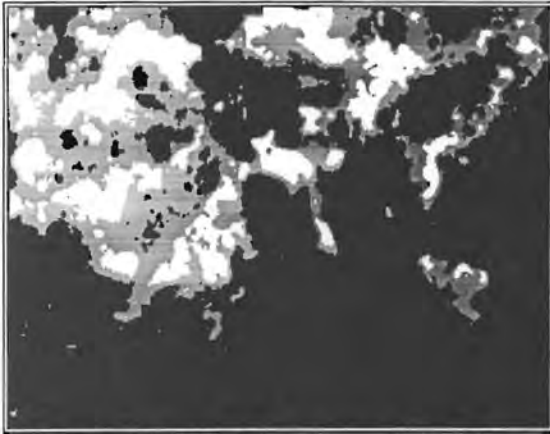
17

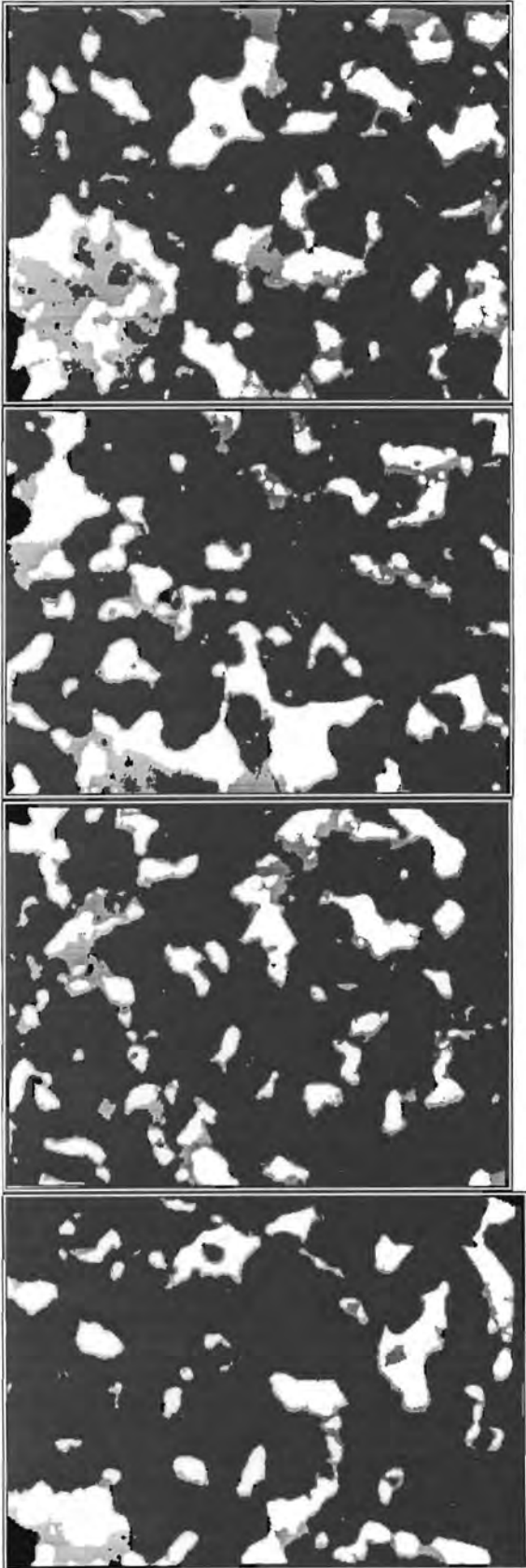
Tweede monster: (Grafiet as reduseermiddel)

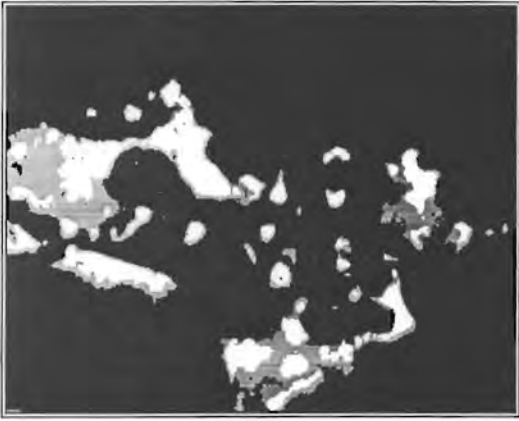
Die Foto's is anders gerangskik as in lg geval. Hier sluit die onderkant kant van elke by die bokant van volgende foto aan. Die foto's is oor die volle deursnit van 'n korrel bepaal. M.a. w die middelste foto's is in die senter van die korrel. Die vergroting is so dat elke foto is omtrent 1 mm hoog.

Figuur 9-8 Mikroskopiese beelde van snit deur gereageerde korrel na 12 minute, Grafiet as reduseermiddel











9.4 Rekenaarprogram

Program Korrelmodel;

Uses graph, Inset, Crt, Grafies, Ewewig1, N, Rho, gelei, Hitte, grinset, Crou;

```
const tol=1E-1;
```

```
    {komponent=(CO,CO2,C,Fe,FeO,Fe3O4,Fe2O3,Inert,H,Swael,gas);}
```

```
Var
```

```
    i:integer;
```

```
    NN,      {aantal stappe}
```

```
    j:longint; {tydindeks}
```

```
    tel:integer;
```

```
    komp:kpnt;
```

```
    tf:real;   {maksimum tyd (sekondes)}
```

```
    tt:real;   {tyd (sekodes)}
```

```
    dFH:real;
```

```
    RandIn:real;
```

```
    fout:real;
```

```
    Rrr:real;
```

```
    lr:text;
```

```
    netnou:real;
```

```
    mErts:real; {massa erts}
```

```
    mKool:real; {massa steenkool}
```

```
    FetC:real; {aanvanklike massa-verhouding van Erts tot steenkool}
```

```
    Ri:array[0..MMM,0..3] of real; {skikking vir gebruik in gelyktydige  
                                     oplossing van energievergelykings}
```

```
    dataN:word;
```

```
    data:array[1..2,1..30] of real; {eksperimentele data word hierin geplaas}
```

```
Var
```

```
    ai,br,r1,r2,r3,r5,
```

```
    k11,k12,k13,
```

```
    k21,k22,k31,k32,
```

```
    k5,
```

```
    E11,E12,E13,
```

```
    E21,E22,E31,E32,
```

```
    E5,
```

```
    ent:real;
```

```
Var
```

```
    Metallisasie:real;
```

```
    Metallisasietyd:real;
```

```
    Metaal,Ooor:real; {hoeveel mol O oor in korrel}
```

```
{Prosedure wat die tempos van die verskillende reaksies bereken}
```

```
PROCEDURE TEMPOVGS(C:smst;Var X:real,Pt,Tp,w,wco:real);
```

```
{ Toevoer: C, Pt, Tp, w, wco}
```

```
{Resultaat: X, r1, r2, r3, r5}
```




```
var
  X1,X2,X3 : real; {ewewigsdrukke van FeO/Fe2O3 en FeO/Fe}
  Ewewigsposisie : byte; {1 = bo, 2= middel, 3= onder}
  Bb,Dd : real;
  nn,kwad : real;
A,A1,A2,B,B1,D,D1,E : real;

const
  maksfout=1E-18;

function Verskil(x:real):real;

begin
  ar:=A*(2*(X1-X)/(A1*X+A2) + wco - ((X1-X)/(A1*X+A2)+w));

  if X>X3 then Bb:=B else Bb:=B1;
  if X>X2 then Dd:=D else Dd:=D1;
  br:=(Bb+Dd+E)*X - Bb*X3 -Dd*X2;

  Verskil:=br-ar;

end;

Begin

if tp>1000 then begin
  write;
end;
if Tp<538+273 then begin
  D:=0; D1:=0;
  B:=0; B1:=0;
end else begin
  D :=k21*C[Fe3O4] * exp( -E21/R/Tp)/Pt; { Fe3O4 > FeO }
  D1 :=k22*C[FeO] * exp( -E22/R/Tp)/Pt; { FeO > Fe3O4}
  B :=k31*C[FeO] * exp( -E31/R/Tp)/Pt; { FeO > Fe }
  B1 :=k32*C[Fe] * exp( -E32/R/Tp)/Pt; { Fe > FeO }
end;

A := k11*C[CC] *exp( -E11/R/Tp)/Pt; { C+CO2 > CO }
A1 := k12 *exp( -E12/R/Tp)/Pt; { C+CO2 > CO }
A2 := k13 *exp( -E13/R/Tp)/Pt; { C+CO2 > CO }
E := k5 *C[Fe2O3] *exp( -E5 /R/Tp)/Pt; { Fe2O3 > Fe3O4}

X1 := Cew(Tp)/pt;
X2 := Fe3O4ew(Tp);
X3 := FeOew(Tp);

X:=1;
nn:=1;

if Tp>538+273 then begin {impliseer dat geen reaksie onder 538 C}
  repeat
```



```
nn:=nn*2;  
kwad:=verskil(X);  
if kwad<0 then x:=x+1/nn else x:=x-1/nn;  
until (abs(kwad)<maksfout) or (nn>1E10);  
end else begin  
X:=X1;  
Bb:=0;  
Dd:=0;  
end;
```

```
r1 := A*(X1-X)/((A1*X+A2));  
r5 := E*X;  
r2 := Dd*(X-X2);  
r3 := Bb*(X-X3);
```

End;

{SI Rapport}

{ Die volgende twee funksies is daar om sekere vektor operasies uit te voer;
function Z(A,B:smst):real; {bereken die puntproduk van A en B}

```
var v:kpnt;  
zz:real;
```

Begin

```
zz:=0;  
for v:=CO to Al2O3 do begin  
zz:=zz+A[v]*B[v];  
end;
```

Z:=zz;

End;

```
procedure ZZ(Var A,B:smst;aa:real); {A = aa*B}
```

```
var v:kpnt;
```

Begin

```
for v:=CO to Al2O3 do begin  
A[v]:=B[v]*aa;  
end;
```

End;

```
Procedure Trans(X:skik:Var T:skik);
```

Type

```
ary=record  
a:real;  
xx:skik;  
end;
```

Var

```
XXX:ary absolute X;
```

Begin

```
T:=XXX.XX;
```

End;

{Die volgende drie prosedures bereken volumes en areas
vir verskillende Geometrie}



Procedure BepaalSfeerVolumeEnAreaDoppe;

Begin

If M=0 then begin

rr[0]:= dr;

AA[0]:= pi*4*rr[0]*rr[0];{buite oppvlak van dop i}

V[0]:= pi*4/3*dr*dr*dr;

End else begin

For i:=0 to M do begin

rr[i]:= i*dr;

if i=0 then begin

V[i]:= pi*4/3*dr*dr*dr/8;

AA[i]:= pi*dr*dr;{buite oppvlak van dop i}

end else begin

if i=M then begin

V[i]:= pi*4/3*((rr[i])*(rr[i])*(rr[i])
-(rr[i]-dr/2)*(rr[i]-dr/2)*(rr[i]-dr/2));

AA[i]:= pi*4*rr[i]*rr[i];{buite oppvlak van dop i}

end else begin

V[i]:= pi*4/3*((rr[i]+dr/2)*(rr[i]+dr/2)*(rr[i]+dr/2)
-(rr[i]-dr/2)*(rr[i]-dr/2)*(rr[i]-dr/2));

AA[i]:= pi*4*(rr[i]+dr/2)*(rr[i]+dr/2);{buite oppvlak van dop i}

end;

end;

End;

End;

End;

Procedure BepaalSilinderVolumeEnAreaDoppe;

Begin

If M=0 then begin

rr[0]:= dr;

AA[0]:= 2*pi*dr*rk;{buite oppvlak van dop i}

V[0]:= pi*dr*dr*rk;

End else begin

rr[0]:=0;

V[0]:= pi*rk*dr*dr/4;

AA[0]:= pi*rk*dr;{buite oppvlak van dop i}

For i:=1 to M-1 do begin

rr[i]:= i*dr;

V[i]:= pi*rk*((rr[i]+dr/2)*(rr[i]+dr/2)-(rr[i]-dr/2)*(rr[i]-dr/2));

AA[i]:=2*pi*(rr[i]+dr/2)*rk;{buite oppvlak van dop i}

end;

rr[m]:= rk;

V[m]:= pi*rk*((rk*rk)-(rk-dr/2)*(rk-dr/2));

AA[m]:= 2*pi*rk*rk;{buite oppvlak van dop i}

End;

End;



```
Procedure BepaalKasVolumeEnArea;
```

```
Begin
```

```
  For i:=0 to M do begin
```

```
    rr[i]:= i*dr;
```

```
    AA[i]:= 0.00001;
```

```
    V[i]:= dr*0.00001;
```

```
  End;
```

```
  V[0]:= dr/2*0.00001;
```

```
  V[M]:= dr/2*0.00001;
```

```
End;
```

```
Procedure BepaalCn(i:integer); {Bereken konsentrasie in mol/m3}
```

```
var
```

```
  ele:kpnt;
```

```
Begin
```

```
  For ele:=CO to gas do Cn[i][ele]:=S[i][ele]/V[i];
```

```
End;
```

```
var dtmin:real;
```

```
  dims:byte;
```

```
  tyd:word; {tyd in minute}
```

```
  reel:string;
```

```
  lr1:text;
```

```
  lr2:text;
```

```
  fak:real;
```

```
  kmpt:kpnt;
```

```
  endmet:real;
```

```
  Ttyd:real;
```

```
const   raport = true;
```

```
        raport2 = false;
```

```
        Nieoordraginkorrel = 0;
```

```
        Geenoordrag = 0;
```

```
Begin
```

```
  assign(lr1,'enkel63.pas');
```

```
  reset(lr1);
```

```
  repeat readln(lr1,reel) until reel='Begin{*}';
```

```
  assign(lr,'11-0.txt'); {skryf die gekose parameters oor in 'n ander leer}
```

```
  rewrite(lr);
```

```
  writeln(lr,'Multi model.');
```

```
  for i:=1 to 35 do begin
```

```
    readln(lr1,reel);
```

```
    writeln(lr,reel);
```

```
  end;
```

```
  close(lr1);
```



Begin{*}

```
em := 0.8; {emisiwiteit}
Rk := 0.0075; {korrelradius}
endmet := 0.90; {eindelijke metalisasievlak}
tyd := 20; {tyd in oond}
NN := tyd*30; {aantal berekeningstappe}
tf := tyd*60; {totale tydsverloop in sekondes}
dt := tf/NN; {tydstapgrootte}
M := 5; {aantal doppe-1}
dims := 2; {geometrie 0=plaat 1= silinder 2=sfeer}
FetC := 5.2; {17% Verhouding van Yster tot koolstof in die korrel}
Ept := 0.202; {Beginporositeit van korrel}
Tomg := 1300+273; {oondtemperatuur}
T00 := 300; {bbegintemperatuur}
fak := 1; {faktor wat geleiding uit is}

k11 := 150 ; {primere Boudouard tempokonstante}
k21 := 10000000;
k31 := 10000000;
k31 := 10000000;
E11 := 90000 ;
E21 := 190000 ;
E31 := 200000 ;
```



```
Erts := NULsmst;
Skool := NULsmst;
Erts[Fe3O4] := 0.98; {fraksie van komponent}
Erts[FeO] := 0;
Erts[Fe] := 0;
Erts[SiO2] := 0.02;
Skool[CC] := 0.95; {fraksie van komponent}
Skool[SiO2] := 0.03;
Skool[Al2O3] := 0.02;

{minder belangrike tempokonstantes}
k12:= 0;
k13:= 2;
k22:= 300;
k32:= 500;
k5:= 1300;
E32:= 200000; E5:= 61000;
E22:= 100000;

assign(lr1,'data.pas');reset(lr1);{lees eksperimentele data}
repeat readln(lr1,data[1,1]) until (data[1,1]=Tomg-273) or eof(lr1);
if eof(lr1) then begin
  dataN:=2;
  data[1,1]:=0;data[1,2]:=0;
  data[2,1]:=0;data[2,2]:=0;
end else begin
  readln(lr1,dataN);
  for j:=1 to dataN do begin
    read(lr1,data[1,j],data[2,j]);
  end;
  j:=0;
  close(lr1);
end;

{Beginvolume}
case dims of
  0: Vt := Rk*0.00001;
  1: Vt := pi*Rk*Rk*Rk;
  2: Vt := 4/3*pi*Rk*Rk*Rk;
end;

{bereken massas steenkool en erts in korrel op grond van
gegewe volume porositeit en verhouding}

mkool:= (1-Ept)*Vt/(FetC*Z(Erts,Ohr)+Z(Skool,Ohr));
mErts:= FetC*mkool;

{chemiese samestelling bereken
met geewe verhouding porositeit en volume}

For komp:=CO to gas do begin
  S0[komp]:= (mErts*Erts[komp]+mkool*Skool[komp])/Mgetal[komp];
End;
```



```
M1:=M+1;
if M = 0 then dr:=Rk else dr := Rk/M;
rr[0]:=0;

case dims of
2:BepaalSfeervolumeenAreadoppe;
1:BepaalSilindervolumeenAreadoppe;
0:BepaalKasVolumeEnArea;
end;

For i:=0 to M do begin
  ZZ(S[i]{=},S0{*},V[i]/Vt); {bereken die hoeveelheid van elke komponent in dop i}
  T[i]:= T00;           {alle doppe by begintemperatuur}
  Ep[i]:= Ept;         {ale doppe by beginporisiteit}
  k[i]:= kk(i);       {alle doppe met selfde geleidingsvermoe}
  Pco[i]:= Fe3O4ew(T[i]-273); {pco bereken as in alle doppe in ewewig met Fe3O4}
  Pc2[i]:= Ptot-Pco[i]; {Pco2 vanaf Pco bereken}
  Pt [i]:= Ptot;      {Totale druk oorals dieselfde in begin}
  X [i]:= Pco[i]/Pt[i]; {Bereken begin fraksie CO}

  BepaalCn(i);       {Bepaal konsentrasie van elke komponent in elke dop}
End;

Pt[M]:=1.0;

if raport then Opskrifte(Cn[M],Pco[M],Pc2[M],T[M],Ep[M],Cn[0],Pco[0],Pc2[0],T[0],Ep[0]);

So0:=S;

j:=0;

if geenoordrag=1 then begin
  read(lr2,tyd);
  readln(lr2,Tomg);
end;

Repeat

{konstnate temperatuur model}
If geenoordrag=1 then if j*dt>=Ttyd then begin
  read(lr2,Ttyd);
  readln(lr2,Tomg);
  for i:=0 to M do T[i]:=Tomg*1300+273;
end;

T0:=T;
So:=S;
```



```

{*****}
{Bereking van Tempo's en oplos van massabalans vir tydstep j}
{*****}

For i:=0 to M do begin

  BepaalCn(i);

  Tempovgs(Cn[i],X[i],Pt[i],T[i],w[i],wco[i]);

  Pco [i]:=Pt[i]*X[i];
  Pc2 [i]:=Pt[i]*(1-X[i]);

  S[i][CC ]:= S[i][CC ] + ( - r1)*V[i]*dt;
  S[i][Fe2O3]:= S[i][Fe2O3] + ( -3*r5)*V[i]*dt;
  S[i][Fe3O4]:= S[i][Fe3O4] + ( 2*r5 - r2)*V[i]*dt;
  S[i][FeO ]:= S[i][FeO ] + ( 3*r2 - r3)*V[i]*dt;
  S[i][Fe ]:= S[i][Fe ] + ( r3 )*V[i]*dt;
  S[i][CO ]:= S[i][CO ] + ( 2*r1 - r2 - r3 - r5)*V[i]*dt;
  S[i][CO2 ]:= S[i][CO2 ] + ( -r1 + r2 + r3 + r5)*V[i]*dt;

  Ep[i] := Poros(S[i],V[i]); {porisiteit berekening}

  O[i] := 150*(1-Ep[i])*(1-Ep[i])/Ep[i]/Ep[i]/Ep[i]
        *mu(i)*lamda*lamda*dr/dp/dp/101300/101300; {weerstand
        teen gasvloei}
  k[i] := kk(i)*fak; {geleidingsvermoe}

  {bereken netto gasgenerasie}

  gco[i] := 2*r1 - r2 - r3 - 4*r4 - r5;
  gc2[i] := -r1 + r2 + r3 + 4*r4 + r5;

  w[i+1] := {0;} (gco[i]+gc2[i])*V[i]+w[i];
  wco[i+1] := {0;} gco[i]*V[i]+wco[i];
  wc2[i+1] := {0;} w[i+1]-wco[i+1];

End; {For i=0 to M} {massabalans}

{*****}
{Bepaling van druk in korrel}
{*****}

For i:=M-1 downto 0 do begin
  Pt[i]:=0.5*(Pt[i+1]+sqrt(Pt[i+1]*Pt[i+1]+4*(R*T[i]*O[i]*w[i+1]/Aa[j])));
End;

```




```

{*****}
{ENERGIEBALANS}
{*****}

For i:=0 to M do begin
  Eo[i] := E(So[i],T0[i]); {Joule} {Energiee in vorige stap}
End;

BepaalSAenSB;
BepaalSA0enSB0;

If Geenoordrag=1 then begin {konstante temperatuur model}
end else
If Nieoordraginkorreel=1 then begin {homogene temperatuur model}

  T[M]:=((wco[M+1])*B[co]+(wc2[M+1])*B[co2]-SB[M]/dt+SB0[M]/dt
    +( hwaarde(T0[M]) *Aa[M ] ) *Tomg
    +SA0[M]/dt*T0[M]
  )/(
    +hwaarde(T0[M]) *Aa[M ]
    +SA[M]/dt
    +wco[M+1]*A[co]+wc2[M+1]*A[co2]
  );
  for i:=M-1 downto 0 do T[i]:=T[i+1];

end else begin

Ri[1,3]:=-SB[0]/dt - Eo[0]/dt + wco[1]*B[co]+wc2[1]*B[co2];
Ri[1,0]:= 0;
Ri[1,1]:=-SA[0]/dt -k[1]*Aa[0]/dr - wco[1]*A[co]+wc2[1]*A[co2];
Ri[1,2]:= k[1]*Aa[0]/dr;

For i:=1 to M-1 do begin
  Ri[i+1,3]:=+SB[i]/dt -Eo[i]/dt - wco[i]*B[co]+wc2[i]*B[co2]
    + wco[i+1]*B[co]+wc2[i+1]*B[co2];
  Ri[i+1,0]:= k[i]*Aa[i-1]/dr + wco[i]*A[co]+wc2[i]*A[co2];
  Ri[i+1,1]: -SA[i]/dt -k[i]*Aa[i-1]/dr - k[i]*Aa[i]/dr
    - wco[i+1]*A[co]+wc2[i+1]*A[co2];
  Ri[i+1,2]:= k[i]*Aa[i]/dr;
End;
Ri[M+1,3]:=+SB[M]/dt - Eo[M]/dt - wco[M]*B[co]+wc2[M]*B[co2]
  + wco[M+1]*B[co]+wc2[M+1]*B[co2]
  -Hwaarde(T0[M])*AA[M]*Tomg;
Ri[M+1,0]:= k[M]*Aa[M-1]/dr + wco[M]*A[co] + wc2[M]*A[co2];
Ri[M+1,1]:=-SA[M]/dt-k[M]*Aa[M-1]/dr - Hwaarde(T0[M])*AA[M]
  - wco[M+1]*A[co]+wc2[M+1]*A[co2];
Ri[M+1,2]:=0;

  Crout(M1,Ri,T);
  Trans(T,T);
end;
{*****}

```



```
{
  *****
}
{Bereken metallisasie}
{
  *****
}

Se:=NULSmst;
Ooor:=0;
For i:=0 to M do begin
  Oori[i]:=S[i][FeO]+4*S[i][Fe3O4]+3*S[i][Fe2O3];
  Metali[i]:=1-Oori[i]/(So0[i][FeO]+4*So0[i][Fe3O4]+3*So0[i][Fe2O3]);
  VSi[i]:=S[i][Fe]/(S[i][FeO]*PFeO+S[i][Fe3O4]*PFe3O4+S[i][Fe]*PFe)*PFE;
  Ooor:=Ooor+Oori[i];
  for kmpt:=CO to Al2O3 do Se[kmpt]:=Se[kmpt]+S[i][kmpt];
End;
Metallisasie:=1-Ooor/(S0[FeO]+4*S0[Fe3O4]+3*S0[Fe2O3]);

{
  *****
}

{raporteer resultate op skerm}
if raport then
Raporteer(Cn[M],Pco[M],Pc2[M],T[M],Ep[M],Cn[0],Pco[0],Pc2[0],T[0],Ep[0],metallisasie);
if (j mod 25)=0 then begin
gotoXY(1,j mod 24+1); clreol;
write(Cn[0][Fe]/1000:3:0,' ');
write(Cn[M][Fe]/1000:3:0,' ');
write( k[0]:3:3,' ');
write( k[M]:3:3,' ');
write(Pt[0]:3:3,' ');
write(Pt[M]:3:3,' ');
write(' ',metallisasie:3:3);
end;

{**** Einde van Lus as tyd nognie verby keer weer terug na berkening
van tempovergelykngs}
Inc(j);Until (Metallisasie>0.99) or (j>NN) or keypressed;

Metallisasietyd:=dt*j;

{Voer parameters vir grafiekprosedude en teken grafiek}

if raport then begin
Wag(1,whereY+1);
Xgrens(0,round(metallisasietyd/200)*200);
Asse(round(gr.u2/100),5,10,5);
Ygrens(0,50000);
Ygrens2(0,1);
Grafiek;
closegraph;
end;
```



{Voer parameters vir grafiekprosedude en teken grafiek}

```
if raport2 then begin
  Nuwelyn(0,1,15,'+', 'Eksperimentele Data');
  for i:=1 to dataN do begin
    nuwepunt(data[1,i],data[2,i]);
  end;
  Nuwelyn(1,1,9," 'Model Voorspelling');
  for i:=0 to M do begin
    nuwepunt(rr[i]*1000,vSi[i]-0.05);
  end;
end;
Ygrens(0.5,1);
Xgrens(0,8);
Grafiek;

End;

close(lr);

End.
```



Eenhede

```
Unit N; {Konstantes en veranderlikes gebruik in die model}
interface
const MMM=90;
Type
{ real=extended;}
kpnt=(CO,CO2,CC,Fe,FeO,Fe3O4,Fe2O3,SiO2,Al2O3,H,Swael,gas);
skik=array[0..MMM] of real;
Smst=array[kpnt] of real;
Maat=array[0..MMM] of smst;
Kelvin=real;
const
NULSmst:smst=(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0);
faseS:array[kpnt] of string[5]= ('CO ','CO2 ','C ','
                               'Fe ','FeO ','Fe3O4','Fe2O3',
                               'SiO2','Al2O3','H ','Swael','Gas ');

Dp:real = 0.000020; {gemiddelde partikel diameter} {LW is funksie van samestelling}
{Dp Kooks:15um Antrasiet:19um Steenkool:18um Grafiet:36um Magnetiet:25um}
lamda:real = 1.1; {vormfaktor van partikels}
R      = 8.314;
Pr: real= 0.72;    {prandtl getal gemiddeld vir gasmengsel en alle temp}
Mgetal : Smst=(28,44,12,55,85,71,85,231,55,159,7,60,101,96,2,32,18);
```

Const

{Gekose begintoestande}

```
Rk: real=0.0075; {m}    {radius van korrel}
T00: kelvin=300{1573}; {aanvanklike temperatuur}
Ptot: real=1; {atm}    {Aanvanklike gasdruk}
Ept: real=0.202;
```

{Gekose berekeningskonstantes}

```
M: integer=0; {aantal doppe}
M1: word=1; {aantal doppe+1}
dt: real=0.1; {s} {tydstapgrootte}
dr: real=0.00075; {m} {dikte van dop} {word bereken vanaf Rk en M}
```

Var

```
T0:skik;{K}    {temperatuur in vorige interval}
T:skik;{K}    {temperatuur in huidige interval}
S:Maat;{mol}   {aantal mol van al die komponente in kontrole volumes}
So:Maat;{mol}  {selfde as S maar vir vorige berekeningstydstep}
So0:Maat;{mol} {372 0357}
```

```
Ep:skik;{}    {porositeit}
k:skik;{W/m/C} {geleidingsvermoe}
```

```
Cn:Maat;{mol/m3} {aantal mol van al die komponent in kontrole volumes}
```



X:skik;{Fraksie} {CO in gas}
gc2:skik;{mol/s/m3} {netto gasgenerasietempo van co2}
gco:skik;{mol/s/m3} {netto gasgenerasietempo van co}

wCO:skik;{mol/s} {CO gasvloeiempo in element i in}
w:skik;{mol/s} {gasvloeiempo in element i in}

O:skik;{Pa s/m} {weerstand teen gasvloei}
u:skik;{m/s} {gasvloeisnelheid}
Pt:skik;{Pascal}
Pco:skik;{Pascal}

Pc2:skik;{Pascal}
wc2:skik;{mol/s} {CO2 gasvloeiempo in element i in}

Ee:skik;{J} {entalpieinhoud van element}
Eo:skik;{J} {entalpieinhoud van element vorige tydsinkrem}
SA:skik;{J/K}
SB:skik;{J}
SA0:skik;{J/K}
SB0:skik;{J}
Oori:skik;
Metali:skik;
Vsi:skik;{volumefraksie yster}

{Slegs van toepassing in begin van bereking}

Erts:smst;{fraksie} {samestelling van erts}
Skool:smst;{fraksie} {samestelling van steenkool}
S0:smst;{mol} {aanvanklike chemiese samestelling van korrel}
{totale aantal molle van elk in die hele korrel}
Se:smst;

{Wordbepaal in begin en bly dan konstant regdeur berekening}

rr:skik;{m} {buiterradius van dop}
AA:skik;{m2} {arrea van dop met radius rr}
V:skik;{m3} {volume van dopelement}
Vt:real;{m3} {Totale volume van korrel}

komp:kpnt;

r1,r2,r3,r4:real;

const Atm=101000;

implementation

begin
end.



```
Unit Rho; {Digthede van verskillende spesies en mengsel}
interface
Uses N;
{m.a.w waardes i.t.v m3/mol}
const
  PC:real=6.316E-6;    {SG:1.9 koolstof steenkool=1.4}  {12}
  PFe:real=7.16E-6;   {SG:7.8}  {55.85}  {formule **** M/1E6/p *****}
  PFeO:real=12E-6; {m3/mol} {SG:5.6 g/cm3} {Fe 0.95 O} {MFexO = 69.6}
  PFe3O4:real=41.35E-6;  {SG:5.6 g/cm3} {231.55}
  PFe2O3:real=32E-6;    {SG:5} {159.7}
  {P:smst=(0.0224,0.0224,8.6E-6,7.2E-6,12E-6,45E-6,32E-6,22.2E-6,0.0224,0.0224,0.0224);}
  {Ohr:smst=(0,0.534.7E-9,128.2E-9,166.6E-9,178.6E-9,200E-9,370.3E-9,312.5E-9,0,0,0);}
  { kpnt=(CO,CO2,CC,Fe,FeO,Fe3O4,Fe2O3,SiO2,Al2O3,H,Swael,gas);}

Function VolS(S:smst):real;
Function Poros(S:smst;V:real):real;
Function Mu(i:integer):real;

implementation

Function VolS(S:smst):real;
Begin
  VolS:=PC*S[CC]+PFe*S[Fe]+PFeO*S[FeO]+PFe3O4*S[Fe3O4];
End;

Function Poros(S:smst;V:real):real;
Begin
  Poros:=(V-VolS(S))/V;
End;

Function Mu(i:integer):real; {viskositeitsfunksie}
Begin {hierdie is vir CO2}
  Mu:=1E-5*(-1.1188E-06*T[i]*T[i] + 5.0256E-03*T[i] + 9.3761E-02);
End;
End.
```



```
Unit Ewigig1; {Ewigigsfunksies }
interface
Uses Inset, Grafies, N;

Const Ptew:real=1;

type celsius=real;

Function Cew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met C}
Function FeOew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met FeO}
Function Fe3O4ew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met Fe3O4}

implementation
Function Cew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met C}
var z,P,Q:real;

Begin
  If T<=200 then P:=0 else begin
    Q:=exp(19940/T-20.5); {exp(A/R/T+B/R);}
    P:=(sqrt(4*Q*Ptew/atm+1)-1)/2/Q;
  End;
  Cew:=-P*atm;
End;

Function FeOew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met FeO}
Begin
  FeOew:=(6.339E-11*T*T*T-6.299E-7*T*T+0.00133*T-0.0426)*Ptew;
End;

Function Fe3O4ew (T:celsius):real; {parsiele druk van CO by ewewig met Fe3O4}
Begin
  If T<538 then begin
    Fe3O4ew:=(-4.89E-7*T*T+0.0008933*T+0.1609)*Ptew;
  end else begin
    Fe3O4ew:=(-5.484E-10*T*T*T+2.100E-6*T*T-0.00294*T+1.560)*Ptew;
  end;
End;

End.
```



Unit Hitte; {Berken entalpiewaardes van komponente in korrel}

interface

Uses Grafies, Inset, N;

const

A:smst=(32.6,52.3,20.8,40.4,66.7,207,146.1,68.9,122.9,0,0,0);

B:smst=(-121000,-411400,-8037.2,-14475,-297030,-1183400,-872650,
-931430,-1717600,0,0,0);

Function HFe(T:kelvin):real;

Function HFeO(T:kelvin):real;

Function HFe3O4(T:kelvin):real;

Function HFe2O3(T:kelvin):real;

Function HC(T:kelvin):real;

Function HCO(T:kelvin):real;

Function HCO2(T:kelvin):real;

Function HSiO2(T:kelvin):real;

Function HAl2O3(T:kelvin):real;

Procedure BepaalSAenSB;

Procedure BepaalSA0enSB0;

Function E(var S:smst;T:kelvin):real; {mol en Kelvin}

implementation

Function HFe(T:real):real;

Begin

HFe:=A[Fe]*T+B[Fe];

End;

Function HFeO(T:real):real;

Begin

HFeO:=A[FeO]*T+B[FeO];

End;

Function HFe3O4(T:real):real;

Begin

HFe3O4:=A[Fe3O4]*T+B[Fe3O4];

End;

Function HFe2O3(T:real):real;

Begin

HFe2O3:=A[Fe2O3]*T+B[Fe2O3];

End;

Function HC(T:real):real;

Begin

HC:=A[CC]*T+B[CC];

End;

Function HCO(T:real):real;

Begin

HCO:=A[CO]*T+B[CO];

End;



```
Function HCO2(T:real):real;  
Begin  
  HCO2:=A[CO2]*T+B[CO2];  
End;
```

```
Function HSiO2(T:real):real;  
Begin  
  HSiO2:=A[SiO2]*T+B[SiO2];  
End;
```

```
Function HAl2O3(T:real):real;  
Begin  
  HAl2O3:=A[Al2O3]*T+B[Al2O3];  
End;
```

```
Procedure BepaalSAenSB;  
var i:word;  
Begin  
  for i:=0 to M do begin  
    SB[i]:=(S[i][Fe]*B[Fe]+S[i][CC]*B[CC]+S[i][FeO]*B[FeO]+S[i][Fe3O4]*B[Fe3O4]+  
      +S[i][Fe2O3]*B[Fe2O3]+S[i][SiO2]*B[SiO2]+S[i][Al2O3]*B[Al2O3]  
      +S[i][CO]*B[CO]+S[i][co2]*B[Co2]);  
    SA[i]:=S[i][Fe]*A[Fe]+S[i][CC]*A[CC]+S[i][FeO]*A[FeO]+S[i][Fe3O4]*A[Fe3O4]+  
      +S[i][Fe2O3]*A[Fe2O3]+S[i][SiO2]*A[SiO2]+S[i][Al2O3]*A[Al2O3]  
      +S[i][CO]*A[CO]+S[i][co2]*A[Co2];  
  end;  
End;
```

```
Procedure BepaalSA0enSB0;  
var i:word;  
Begin  
  for i:=0 to M do begin  
    SB0[i]:=(So[i][Fe]*B[Fe]+So[i][CC]*B[CC]+So[i][FeO]*B[FeO]+So[i][Fe3O4]*B[Fe3O4]+  
      +So[i][Fe2O3]*B[Fe2O3]+So[i][SiO2]*B[SiO2]+So[i][Al2O3]*B[Al2O3]  
      +So[i][CO]*B[CO]+So[i][co2]*B[Co2]);  
    SA0[i]:=So[i][Fe]*A[Fe]+So[i][CC]*A[CC]+So[i][FeO]*A[FeO]+So[i][Fe3O4]*A[Fe3O4]+  
      +So[i][Fe2O3]*A[Fe2O3]+So[i][SiO2]*A[SiO2]+So[i][Al2O3]*A[Al2O3]  
      +So[i][CO]*A[CO]+So[i][co2]*A[Co2];  
  end;  
End;
```

```
Function E(var S:smst;T:kelvin):real; {mol en Kelvin}  
Begin  
  E:=S[Fe]*HFe(T)+S[CC]*HC(T)+S[FeO]*HFeO(T)-S[Fe3O4]*HFe3O4(T)+  
    +S[Fe2O3]*HFe2O3(T)+S[SiO2]*HSiO2(T)+S[Al2O3]*HAl2O3(T)  
    +S[CO]*HCO(T)+S[CO2]*HCO2(T);  
End;  
  
End.
```



```
Unit Gelei; {Berken geleidingsvermoe in korrel}  
interface  
Uses N, Rho, grafies;  
Const sigma=5.670E-8; {W/m2/K4}  
Em:real=0.8; {emisiwiteit van vastestof}  
Tomg:kelvin=1573;
```

```
Function kk(i:word):real;  
Function Hwaarde(T:kelvin):real;
```

Implementation

```
Function kN2 (T:kelvin):real;  
Begin  
kN2:= -2.35E-8*T*T+8.82E-5*T+2.50E-7 ;  
End;
```

```
Function km(Komp:kpnt;T:kelvin):real;  
begin  
case komp of  
CC:km:=0.444+2.9E-3*(T-273);  
CO:km:=-6.702E-9*T*T +3.61E-6*T+2.72E-5;  
CO2:km:=-6.702E-9*T*T +3.61E-6*T+2.72E-5;  
Fe:km:=2.54E-5*T*T - 0.0553*T + 65.3;  
FeO:if T<825 then km:=1/(2.335E-4*T+0.1136) else km:=1/(-9.739E-5*T+0.3795);  
Fe3O4:if T<906 then km:=1/(1.693E-4*T) else km:=1/(2.967E-6*T+0.1508);  
Fe2O3:if T<912 then km:=1/(1.887E-4*T) else km:=1/(8.319E-5*T+0.09243);  
SiO2:km:=806*exp(-0.803*ln(T));  
Al2O3:km:=30241*exp(-1.1832*ln(T));  
end;  
end;
```

```
Function KK(i:word):real;  
var  
Kmp:kpnt;  
ks,kg:real;  
Stot:real; {totale vastestof mol}  
Begin  
Stot:=S[i][CC];  
ks:=S[i][CC]*ln(km(CC,T[i]));  
for Kmp:=Fe to Al2O3 do begin  
Stot:=Stot+S[i][Kmp];  
ks:=ks +S[i][Kmp]*ln(km(Kmp,T[i]));  
end;  
Ks:=exp(ks/Stot);  
kg:=km(CO,T[i]);  
Kk:=ks*(2*ks+kg-2*ep[i]*(ks-kg))/(2*ks+kg+ep[i]*(ks-kg)); {laat straling buite rekening in die bepaling van k}  
End;
```

```
Function Hwaarde(T:kelvin):real;  
var hs:real; hk:real;  
BuiteArea:real;  
Begin  
hs:=Em*Sigma*(Tomg+T)*(Tomg*Tomg-T*T);
```



```
hk:=6;  
Hwaarde:=(hs+hk)  
End;  
End.
```

```
{Numeriese prosedure vir oplos van tridiagonale stelsel}
```

```
{r1 r2 0 0 = r3}  
{r0 r1 r2 0 = r3}  
{0 r0 r1 r2 = r3}  
{0 0 r0 r1 = r3}  
{LW R[i,1] is die diagonaal element in ry i}  
{ R[i,3] is die regterkant in elke vergelyking}  
{ R[1,0] en R[N,2] word dus glad nie gebruik nie}  
{ Na faktorisering bevat R[i,1] en R[i,0] die L matriks se elemente}  
{ R[i,2] bevat die Diagonaal in die U matriks}
```

```
Unit Crou;
```

```
Interface
```

```
Procedure CrouT(Var N:word;Var Ri;Var Xi);
```

```
Type
```

```
Rye=array[0..1500,0..3] of real;
```

```
Ry=array[0..1500] of real;
```

```
Implementation
```

```
Procedure CrouT(Var N:word;Var Ri;Var Xi);
```

```
Var
```

```
R:Rye absolute Ri;
```

```
X:Ry absolute Xi;
```

```
i:word;
```

```
Begin
```

```
R[1,2]:=R[1,2]/R[1,1];
```

```
For i:=2 to n-1 do begin
```

```
  R[i,1]:=R[i,1] - R[i,0]*R[i-1,2];
```

```
  If R[i,1]=0 then begin N:=0;Exit;end;
```

```
  R[i,2]:=R[i,2]/R[i,1];
```

```
End;
```

```
R[n,1]:=R[n,1] - R[n,0]*R[n-1,2];
```

```
If R[n,1]=0 then begin N:=0;Exit;end;
```

```
R[1,3]:=R[1,3]/R[1,1];
```

```
For i:=2 to n do R[i,3]:=(R[i,3] - R[i,0]*R[i-1,3])/R[i,1];
```

```
X[n]:=R[n,3];
```

```
For i:=n-1 downto 1 do X[i]:=R[i,3]-R[i,2]*X[i+1];
```

```
End;
```

```
End,
```