622.341.1－188：542.941

S 2

(2)　**多孔質酸化鉄ペレットの還元における反応モデル**

70278

八幡製鉄㈱　東京研究所　　○原　行明

1. **緒　言：** 多孔質な酸化鉄ペレットの還元において、マクロな意味での"トポケミカルモデル"が成立するかどうかは反応解析において重要な問題である。厳密には多孔質なペレットでは中心核の内部にもガスが拡散するから、ペレット構成粒子の何層かが同時に反応することになり反応帯が形成される。この反応帯の巾が粒径に比較して小さければ、近似的にトポケミカルモデルが適用可能になる。そこで粒内において還元反応とガス拡散が並列的に進行するとしたモデルによる数値解析から、反応帯内における還元率とガス濃度の分布を求めた結果を報告する。

2. **反応モデルと基礎式：** 反応モデルとして、ペレットは均一球状緻密小粒子の集合体であるとし、小粒子の還元は化学反応律速で進行するとした。この場合、ペレット粒内のガス濃度と還元率について次の基礎式が成立する。ただしガス境膜抵抗は無視できるとしてある。

$$\varepsilon\cdot\frac{\partial C}{\partial\theta}=De\left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\cdot\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{3(1-\varepsilon_0)}{r_c}\cdot k_c\left(1+\frac{1}{K}\right)(1-R)^{2/3}(Ce-C) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (1)$$

$$\frac{\partial R}{\partial\theta}=\frac{3}{d_0 r_c}\cdot k_c\left(1+\frac{1}{K}\right)(1-R)^{2/3}(Ce-C) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (2)$$

$$\varepsilon=\varepsilon_0+A\cdot R \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (3) \qquad De=B\cdot\varepsilon^a=B\cdot(\varepsilon_0+A\cdot R)^a \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (4)$$

$$\bar{R}=\frac{1}{(4/3)\pi r_0^3}\int_0^{r_0}4\pi r^2 R\,dr \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (5)$$

A、B、a は定数である。数値積分は(1)、(2)式を差分化して、ペレット半径を微少区間 Δr に分割し、各区分毎に微少時間 $\Delta\theta$ 内の還元率とガス濃度の変化を求める計算を繰返すことにより求まる。ただし計算の収束条件として、次の条件が必要である。

$$m_0\leq\phi \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (6) \qquad M\leq 4.0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (7)$$

こゝにm_0はペレット半径の分割数であり、ϕは Thiele モデュラスであり、次式で表わされる。

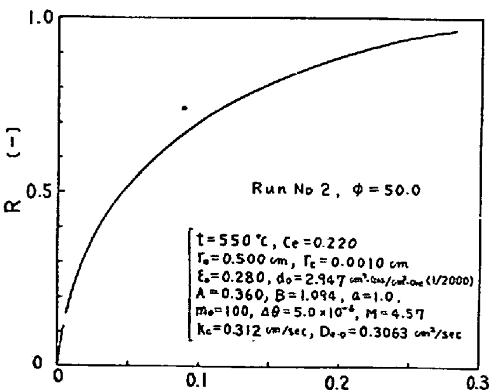
$$\phi=r_0\left[3(1-\varepsilon_0)k_c(1+1/K)/r_c D_e\right]^{1/2} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (8)$$

Mは計算モデュラスで、(7)式は時間刻み $\Delta\theta$ を規定する。

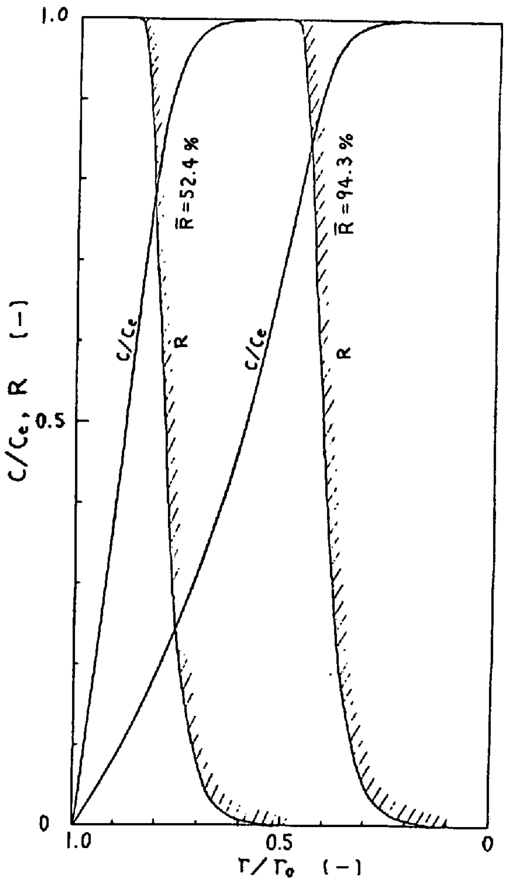
$$M=\varepsilon_0^2\Delta r^2/D_{e\cdot 0}\cdot\Delta\theta \quad \cdots (9)$$

3. **計算結果**

(7)式の条件をそのまゝ計算すると計算時間が過大のため、被還元酸素濃度 d_0を 1／560 にして計算した例を図・1、2に示した。



図・1　還元曲線の計算例



図・2　還元率とガス濃度の分布（ϕ＝26.5）