

# 冶金过程动力学与冶金反应工程学

## ——对其学科内容及研究方法的 某些意见的商榷

魏 寿 昆

(北京钢铁学院)

化学反应工程学于1957年在国际上被公认之后,日本学者赖岩于1972年提出冶金反应工程学,但此命名尚未被欧美学者所采用。冶金过程动力学是冶金过程物理化学一个主要组成部分。近年来国内外冶金工作者对冶金过程动力学及冶金反应工程学二学科在内容及研究方法上有所混淆或误解。本文意在对此二学科的区别及相互关系进行讨论,提出个人的观点,以期进一步更全面地发展冶金反应工程学。

### 一、引 言

近二十年来国内外对冶金过程动力学及冶金反应工程学二学科领域的研究工作比较活跃。但文献上对此二领域在学科内容及研究方法上存有不同程度的混淆或误解。下列各点拟说明此问题。

1. 冶金过程动力学与冶金反应工程学在学科内容上视为等同。例如常用的矿石还原的未反应核模型本应属于冶金过程动力学的范畴,而在同一书<sup>[1]</sup>内竟在反应动力学及反应工程学二章同时加以叙述。又如《冶金过程中的速率现象》<sup>[2]</sup>及《提取冶金中的速率》<sup>[3]</sup>二书似应属于阐明冶金过程动力学的专门书籍,但有人认为是冶金反应工程学的成就。

2. 将化学反应工程学的设计要求及研究方法无条件地加之于冶金反应工程学。自计算机广泛应用于科学技术及工业之后,在化学反应工程学领域内,可以利用计算机基本上对某些有机化合物制备车间不经过中间工厂的试验进行设计,决定反应器的尺寸

及几何形状,确定最优化操作条件,设计自动化控制的措施。由于冶金,特别是火法冶金,各种冶金反应设备(冶金炉)多采用经验数据进行设计,化学反应工程学的一系列研究方法尚不能完全应用于冶金过程。冶金反应工程学尚未发展到成熟阶段。但有将化学反应工程学的研究方法硬搬到冶金反应工程学的趋势,将化学反应工程学的内容称为冶金反应工程学,从而造成一定程度的混淆。

为此,本文对上述学科内容及研究方法,就其区别及相互关系提出一些个人观点进行讨论,以期进一步更全面地发展冶金反应工程学。

### 二、冶金过程

任何提取冶金流程都包括物料及各种冶金过程。冶金过程包括高温的火法冶金过程及低温的湿法冶金过程。电冶金过程既有低温的水溶液电解过程,又有高温的熔盐电解及电热的电弧冶炼过程。一般来讲,冶金过程是极其复杂的多相和多物质的反应,含有气-液-固三态的物质,而其中的液态或固态

物质,经常以两个或更多的相出现。气态物质包括 $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $SO_2$ ,  $SO_3$ ,  $HCl$ ,  $H_2SO_4$ , 碳氢化合物气体,各种金属或其化合物的蒸汽以及混合气体。液态物质包括金属液、熔渣、熔盐、熔铋(冰铜、冰镍、冰钴及黄渣等),水溶液及有机溶液等。固态物质包括矿石(烧结块、球团或精矿粉)、熔剂、固体燃料、耐火材料、固体金属合金及其化合物等。这些多相物质相互结合,造成错综复杂的冶金过程。冶金过程有属于物理性质的,如蒸发、升华、凝聚、熔化、凝固、溶解、结晶、熔析、蒸馏、过滤、吸附、萃取等、以及传输现象中的物质扩散、热量传递、流体输运等物理过程。这些物理过程仿照化学工程学可称为单元操作(unit operation)。当然,选矿过程中的破碎、细磨、筛分、重力分选、浮选、磁选、电场分离等也可称为属于物理性质的冶金过程。属于化学性质的冶金过程有:燃烧、焙解(煅烧)、焙烧、烧结、氯化、造铋熔炼、造渣、还原冶炼、氧化吹炼、氧化精炼、浸取、溶液净化、离子交换、沉淀、电沉积、电解等。炼钢经常有四脱二去,即脱硫、脱磷、脱碳及脱氧的化学过程及去气及去非金属夹杂物的物理过程。这些化学过程均可称为单元反应或单元过程(unit process)。它们和化学工程学中的硝化、磺化、酯化、烃化、聚合、分解、合成等的单元过程相似。可以看出,冶金的物理过程主要是由于物质的相的转变,物质的转移或分离而造成。冶金的化学过程都伴有化学反应发生,因之它们也可称为冶金的化学反应过程。

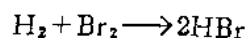
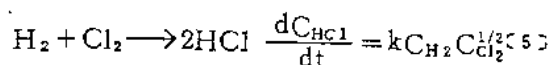
### 三、冶金过程动力学

冶金过程动力学是冶金过程物理化学的一个重要组成部份。如所周知,冶金过程热力学研究分析冶金过程进行的可能性,即其进行的方向,以及反应产物能得到最大收得

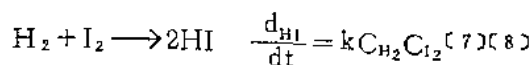
率的热力学条件。冶金过程动力学则研究分析冶金过程进行的速率及机理,求出其中限制速率的环节,提高反应强度及缩短反应时间的途径。带有化学反应的冶金过程,其反应速率除受温度、压力和化学组成及结构等因素的影响外,还受冶金反应设备(冶金炉)内的物体流动,热量传递及物质扩散的影响。当反应的条件变化时,反应进行的途径(即步骤)也即反应机理也要发生变化。1957年Van Krevelen<sup>[4]</sup>将单纯从分子理论微观地研究化学反应的速率及机理称为微观动力学(microkinetics),也即通常在物理化学中讲授的化学动力学,而对伴有传质、传热及物质流动情况下研究化学反应的速率及机理则称为宏观动力学(macrokinetics)。冶金过程动力学属于宏观动力学范畴。

化学动力学所研究的化学反应有不同类型,例如单向反应、可逆反应、并行反应、连续反应、自动催化反应、链锁反应(包括直链及支链)等等。绝大部分的反应是属于均相的气体反应或水溶液反应,一部分是多相反应,类如有催化剂参加的气-固相反应。

化学动力学的重点在于研究化学反应的机理。由于反应机理不同,对同类型反应则可能有不同的反应速率表达式,即通常称之为速率动力学方程,例如:



$$\frac{dC_{HBr}}{dt} = \frac{k C_{H_2} C_{Br_2}^{1/2}}{1 + k' C_{HBr} / C_{Br_2}} \quad (6)$$



冶金过程动力学则比较复杂,和化学动力学相比,有下列不同点:

1. 反应速率可用多种的表示方法

$$\frac{dC_i}{dt} \quad \text{mol/cm}^3 \cdot \text{s} \text{ 或 } \text{g/cm}^3 \cdot \text{s}$$

$$\cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/s}$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/cm}^3 \cdot \text{s}$$

$V$ ——流体体积(均相反应)

$$\frac{1}{W} \cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/g} \cdot \text{s}$$

$W$ ——固体重量(气固或液固反应)

$$\frac{1}{S} \cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/cm}^2 \cdot \text{s}$$

$S$ ——界面反应(气液或液固的界面反应)

$$\frac{1}{V_s} \cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/cm}^3 \cdot \text{s}$$

$V_s$ ——固体体积(气固反应)

$$\frac{1}{V_R} \cdot \frac{dn_i}{dt} \quad \text{mol/cm}^3 \cdot \text{s}$$

$V_R$ ——反应器体积

$$\frac{d[\%i]}{dt} \quad 1/\text{s} \quad \text{炼钢过程中的溶液反应}$$

2. 由于冶金过程动力学涉及到多相反应, 它不研究均相内部的反应速率(intrinsic rate of reaction), 而更多地研究全过程的综合反应速率(global或overall rate of reaction)。

3. 冶金过程动力学不着重研究反应机理, 而着重研究整个多相反应过程中控制速率的环节。常用的研究方法有:

(1) 准稳态处理法 化学动力学常用的稳态处理法始于本世纪二十年代<sup>[9]</sup>, 它作出中间产物浓度不变的假设。冶金过程动力学进一步认为各个反应步骤的速率近似地相等, 发展为准稳态处理法<sup>[10]</sup>, 例举二例如下:

液-液相反应采用的双膜理论模型, 其计算公式为:

$$\frac{dn}{dt} = \dot{n} = \frac{A(C^I - \frac{C^II}{k})}{\frac{1}{\beta^I} + \frac{1}{k_I} + \frac{1}{k\beta^II}}$$

式中,  $\dot{n}$  为传质速度;  $A$  为界面面积;  $C^I$ ,  $C^II$  为第一、第二相的内部浓度;  $k$  为反应的平衡常数或分配常数;  $\beta^I$ ,  $\beta^II$  为第一、第二相的传质系数,  $k_I$  为反应前进方向的速率常数。

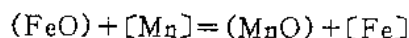
气-固相反应的未反应核模型(或称退缩核模型)的计算公式为:

$$\frac{dn}{dt} = \dot{n} = \frac{4\pi r_0^2(C_0 - C^*)}{\frac{1}{\beta_g} + \frac{r_0(r_0 - r)}{D_{\text{eff}} \cdot r} + \frac{K}{K(1+K)} \cdot \frac{r_0^2}{r^2}}$$

式中,  $\dot{n}$  为总反应速率;  $r_0$  为球形颗粒的半径;  $r$  为未反应核的半径;  $C_0$  为气体内部还原气体的浓度;  $C^*$  为同气体产物平衡的还原气体的浓度;  $\beta_g$  为通过气体边界层的传质系数;  $k$  为前进反应的速率常数;  $K$  为反应的平衡常数;  $D_{\text{eff}}$  为有效扩散系数。

上列二模型均系典型例子。界面上的化学反应经常按一级反应处理。二式中分母的各项代表各步骤的阻力。阻力最大的步骤即是控制速率的环节。

(2) 虚设的最大速率处理法(Virtual maximum rate method)<sup>[11]</sup> 对液-液反应, 例如



可假定在界面上只有一个元素  $i$  的  $C_i$ , 等于平衡浓度  $C_i^*$ , 其余元素的浓度均等于溶液内部的浓度, 则元素  $i$  由金属相向熔渣转移的最大速率  $\dot{n}_i$  为:

$$\dot{n}_i = A \cdot \frac{D_i}{\delta_i} \cdot C_i \left(1 - \frac{Q}{K}\right)$$

若该元素  $i$  由熔渣向金属液转移, 其最大速率则为:

$$\dot{n} = A \cdot \frac{D_i}{\delta_i} \cdot C_i \left( \frac{K}{Q} - 1 \right)$$

式中  $A$  为界面面积;  $D_i$  为扩散系数;  $\delta_i$  为边界层;  $K$  为反应的平衡常数;  $Q$  为溶液内部浓度积的商。通过每个元素的计算, 可求出最慢的步骤, 也即速率的控制环节。

(3) 非稳态处理法<sup>[12、13]</sup> 利用Fick第二定律处理物质的扩散速度, 肯定溶液内部浓度随时间变化, 即:

$$C_i(x, 0) = C_i^0$$

$$C_i(x, t) = C_i^1$$

而  $C_i^1 \neq C_i^0$

这种处理方法比较正确, 但很复杂, 正在发展中。

4. 上列几种研究方法可在恒温条件下进行研究。但必须指出, 平衡常数  $K$ , 反应速率常数  $k$ , 扩散系数  $D$ , 传质系数  $\beta$  等都与温度有关。同时, 一个反应进行时经常有热效应发生, 所以较准确的分析必须在温度变化或传热条件下进行。此外, 扩散系数、传质系数也与物质的流动状态有关, 所以又必须考虑物质的流动也即动量传递的关系。

5. 冶金反应动力学研究有化学反应发生的冶金过程动力学。但物理过程如连铸中的凝固现象, 其冷却速度对金属锭的表面质量及内部结构产生决定性作用。因之研究凝固动力学有重要意义。这种物理过程动力学不能称为冶金反应动力学, 但可称为冶金过程动力学, 因之, 冶金过程动力学比冶金反应动力学是更全面更适宜的名词。

6. 结合流体力学, 冶金过程动力学有很广泛的研究课题<sup>[14]</sup>, 诸如: 冶金熔体的自然对流及强制对流对传质的作用, 冶金系统内搅拌的作用, 气泡、液滴及固体颗粒在熔体中运动的规律及其对传质和各种物质交换的影响, 乳浊液及泡沫渣生成机理及对传质的影响, 喷射气流 (包括加入的固体颗粒) 与熔体间的作用, 非金属夹杂物上浮规律及其影响因素, 凝固过程中晶核成长动力学,

凝固过程中冷却速度的影响, 以及结合流体力学在不同温度、浓度及速度场下的模拟实验等等。

#### 四、化学反应工程学

化学反应工程学的定名始于1957年, 在荷兰首都召开的第一次欧洲化学反应工程会议<sup>[15、16]</sup>。载在各专门书籍中该学科的定义例举如后:

以化学反应器的成功设计及操作为目的的工业规模的化学反应应用研究的工程学科 (Levenspiel<sup>[17]</sup>); 关于各种类型反应器的设计及最优化的学科 (Roberts等<sup>[18]</sup>); 确定生产化学产品的反应器的形状及尺寸, 并对现有各种反应器进行评价的学科 (Cooper & Jeffrey<sup>[19]</sup>); 将反应器内发生的化学反应速率, 和热量、质量及动量等物理变化的速率, 分别按反应速率理论和传输现象理论进行分析的工程学科, 其重要课题则为设计反应器, 分析其特性, 确定反应的条件和控制反应的过程 (鞭岩与森山昭<sup>[20]</sup>); 有关化学反应过程的设计及操作的工程学科 (森山昭<sup>[21]</sup>); 看来, 化学反应工程学包括的内容为: (1) 分析研究化学反应动力学; (2) 设计反应器; (3) 求出最优化操作的条件; 及 (4) 寻求自动控制的措施。

化学反应工程学的研究方法可分为下列步骤:

1. 化学反应动力学方程的建立 对均相反应通过实验室或小型装置的实验研究求出反应速率与浓度 (对溶剂则应以活度代替浓度) 的关系式, 即所谓的内部反应速率式或内部动力学方程 (intrinsic rate equation)。对多相反应, 结合传质、传热及动量传递现象进行分析, 作出必要的假定, 求出反应的综合动力学方程 (Overall rate equation)。为便于计算, 动力学方程内的浓度有时以转化率代替。

2. 反应器的过程分析及数学模型的建

立 根据反应器内物料流动、混合、停留时间及分布状况等以及传热、传质和动量传递等理论,利用物料衡算、热量衡算及动量衡算在某些假定条件下,对反应器内所发生的过程进行数学的描述,即列出一组或几组代数方程,微分方程,偏微分方程或差分方程。这些方程统算为数学模型。

3. 反应器的数学模拟实验 按照数学模型用电子计算机进行数值计算,或改变各种参数对反应器(或实验装置)进行模拟的“数学实验”(或简称模拟实验)。用计算结果与中小型实验在相同条件下测得的结果进行核对,以验证数学模型是否正确。如果二者不符,则重新调整某些原始数据或改正数学模型,直至理论模型与实验结果相符合为止。通过此数学模拟,可决定出反应器的几何形状及尺寸,并求出产物能达到的收得率或反应的转化率。

4. 最优化的操作条件的研究 在给定的原料、产品规格、设计决定的反应器尺寸及工艺条件等所谓限制性条件下,考虑到经济效益、安全生产、环境保护及劳动舒适等因素对工艺操作进行综合分析,运用最优化数学方法求出最优化的操作条件。

5. 反应器的动态分析及自动控制 研究反应器及整个过程当受到外界条件波动或干扰时的稳定性及操作控制的灵敏性,寻求高效率好效果的调节控制方法,以维持在给定条件下的检测,建立自动控制的调节措施。

进行上列研究需用大量参数的数据,如物料的密度、热容、焓、自由能、平衡常数、反应速率常数、粘度、扩散系数、传质系数、导热率、传热系数等等。一些参数则以无量纲的准数形式出现。有些数据可查自文献,有的则需要自行测定,例如某些反应的速率常数,一定流动条件下的传质系数,某些多孔物体的迷宫度等。

对绝大多数的化学反应过程,通常只进

行物料衡算及热量衡算,动量衡算则应用的很少。物料流动对好多参数如扩散系数、传质系数、传热系数、物料分布及停留时间等均有显著的影响。不可逆过程热力学的“熵平衡”在化学反应工程学尚未见采用。

在计算机未被广泛应用之前,通过中间试验厂的研究被誉为工业化生产的摇篮。当时,一个产品制备的过程是:在工业化生产之前,必须经过一段中间实验厂的实验研究,求得必要的工艺参数,进行逐步放大,最后达到工业化的大规模生产。但有了计算机之后,运用数学模拟实验,可以不经过中间实验厂的过程开发及工程放大,即可得到设计反应器资料,直至建厂投产。这在一些现象比较明确的设备如固定床反应器、搅拌釜等已有成功的实例<sup>[22]</sup>。

Levenspiel<sup>[17]</sup>一书是以“化学反应工程学”命名,但有化学反应工程学的内容而用其他命名的书籍也不少。例如 Smith<sup>[23]</sup>一书\*,则以“化学工程动力学”命名,第一版发行于1956年,比 Levenspiel 之书\*\*的第一版早6年。Hill<sup>[24]</sup>一书则称为“化学工程动力学及反应器设计”,Cooper与Jeffreys<sup>[19]</sup>之书则名为“化学动力学及反应器设计”等等。总之,化学反应工程学是一门涉及反应器设计的工程科学。

## 五、冶金反应工程学

将化学反应工程学的研究方法应用于冶金,即形成冶金反应工程学。1972年日本鞭岩等有冶金反应工程学<sup>[25]</sup>一书问世。但英美冶金界迄未起用冶金反应工程学的名称,原因在于作为一门学科它尚不很成熟,尚难以达到成为独立学科的阶段。从上面化学反应工程学的简略叙述来看,化学反应工程学的特点是:(1)以反应动力学为基础;(2)利用数学模拟实验,进行反应器设计并求得

\*: 现已发行到第三版(1981)

\*\* : 现已发行到第二版1972

最优化操作及自动控制调节的条件,而其关键在于反应器的设计。

从上面化学反应工程学研究方法的五个步骤来看,第一步动力学方程的建立属于冶金过程动力学的范畴,在此方面已作过不少工作。而第二到第五步,如果全面地加诸于冶金反应过程,在现时便很难达到化学反应工程学能达到的要求。当然对某些湿法冶金过程如浸取,或某些火法冶金过程如焙烧,可以利用化学反应工程学对浸取釜或焙烧炉进行设计研究,但对绝大多数火法冶金过程,如高炉炼铁、转炉或电弧炉炼钢等等,全盘采用化学反应工程学的数学模拟方法对冶金炉进行设计或进行过程分析,则为时尚早。其原因为:

1. 冶金过程所用原料比化工原料成份既复杂而又多种多样。化工合成制备所用的原料基本上是单一的较纯的化学物品。

2. 冶金产品绝大部分不是纯净的物质。钢铁、有色金属锭都含有杂质。在金属凝固过程中经常伴有化学反应发生,如 $\text{CO}$ 、 $\text{SO}_2$ 气泡及非金属夹杂物的生成,又有晶体偏析、杂质偏析、相变过程等。这些都使过程的分析复杂化。

3. 冶金炉炉型设计基本上依靠经验数据。欲扩大高炉产量,主要扩大其炉身各部分的直径,其高度受到焦炭强度的限制,不能无限度地加高。高炉炉身各部分都按经验数据设计。对高炉只能作局部的炉料衡算,局部的热量衡算,和上升气体局部的动量衡算。对转炉炉型,如高度与直径之比,基本上按经验数据放大决定。转炉的水力模型难以模拟高温的生产操作。

4. 高温测试手段颇不完备,所得信息既不稳定又欠准确,对复杂的多相反应难以进行准确的数学模拟。

纵然如此,冶金反应工程学仍在逐步发展,特别是作为它的基础的冶金过程动力学的研究工作,近二十余年来非常活跃,研究

成果也较显著。喷射冶金开始采用动量衡算以分析射入气流或颗粒的运动规律。以美国Szekely为首的学派大量研究不同流场中流动速度、温度及浓度的分布规律。局部自动控制在不同的冶金过程或阶段已加以应用,例如高炉布料,转炉终点控制,连铸钢流在结晶器内流速及温度自动控制等等,对提高产品质量,降低产品成本等均收到显著的成效。

作为一门工程学,研究冶金反应工程学必须考虑到工程学的意义。工程是利用先进技术改造自然,造福人民大众的事业,例如水利工程、铁道工程、市政工程等。另一方面,工程又是开发运用先进技术以制备具有高经济效益的生产设备或产品的事业。而工程学则是研究这些工程事业系统的科学。冶金过程动力学和冶金反应工程学不同,是一门带有理科性质的应用基础科学。它可以从理论上研究某些不涉及反应器实际的反应动力学规律。但冶金反应工程学则属于工科性质的工程科学。它必须联系实际,联系生产,注重经济效益,所以进行冶金反应工程学的研究必须具有生产观点和经济观点,必须结合反应器研究其中发生的过程,提出数学模型进行模拟实验。为此,我们务必熟悉冶金生产过程,进行合理分析,准确地用数学语言对冶金过程进行描述,求出答案,然后在生产实践或中大型实验中加以验证,反复修改模型,提出改进操作,逐步达到最优化的自动调节和控制。

## 六、结 语

冶金过程动力学是冶金反应工程学的基础,它不涉及反应设备(冶金炉)研究冶金过程的动力学规律。

建立数学模型,开展数学模拟实验是冶金反应工程学的关键。必须熟悉冶金过程,根据生产实际,运用数学工具,建立冶金炉内各种反应过程的数学模型,进行数学模拟

实验。运用无目的的不结合生产实际的数学模型进行模拟实验是徒劳无功的。

冶金反应工程学尚很不成熟，有待于创造性的开发。作为一门工程学科，它必须涉及反应器（冶金炉）的设计、操作及最优化的自动调节与控制。

(1985年2月5日收到)

### 参 考 文 献

- [1] 盛利贞等, 陈襄武等译: 钢铁冶金基础, 冶金工业出版社, 北京, 1980, 78, 106.
- [2] Szekely, J. et al., Rate Phenomena in Process Metallurgy, Wiley-Interscience, New York, 1971.
- [3] Sohn, H. Y. et al., Rate Processes of Extractive Metallurgy, Plenum Press, New York, 1979.
- [4] Van, Krevelen, D. W., The First European Symposium of Chemical Engineering, Pergamon Press, London, 1957, 8.
- [5] 唐有祺, 化学动力学和反应器原理, 科学出版社, 北京, 1974, 51.
- [6] Laidler, K. J., Reaction Kinetics, Pergamon Press, London, 1963, V. I., p. 163.
- [7] Moore, W. J., Physical Chemistry, Longman, London, 1976, 399; 另见文献 [5], 57.
- [8] 见文献 [6], 43.
- [9] 见文献 [6], 163.
- [10] 韩其勇主编: 冶金过程动力学, 冶金工业出版社, 北京, 1983, 152.
- [11] Wagner, C., Physical Chemistry of Steelmaking, M. I. T. Technology Press, Cambridge, Massachusetts, 1958, 241.
- [12] 魏季和, Mitchell, A., 冶金反应动力学学术讨论会论文集, 重庆, 4月12~16日, (1983), 下册, 159.
- [13] 魏季和, Mitchell, A., 第二届冶金反应动力学学术会议论文集, 鞍山, 5月5~7日, (1984), 上册, 261.
- [14] Dahl, W. et al., Kinetik Metallurgischer Vorgänge bei der Stahlherstellung, Verlag Stahleisen, Dusseldorf, 1972.
- [15] 李启兴、唐玉华、程光钱、谭立业, 化学反应工程学基础——数学模拟法, 人民教育出版社, 北京, 1981, 2.
- [16] 陈敏恒、翁元垣等, 化学反应工程基本原理, 化学工业出版社, 北京, 1982, 1; 另见 Rietema K., Chemical Reaction Engineering, Pergamon Press, London, 1957, 1.
- [17] Levenspiel, O., Chemical Reaction Engineering, Wiley and Sons, New York, 2nd, Ed, 1972, Preface.
- [18] Roberts, F. et al., High Temperature Chemical Reaction Engineering, Institution of Chemical Engineers, London, 1971, 13.
- [19] Cooper, A. R. et al., Chemical Kinetics and Reactor Design, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1971, 1.
- [20] 赖岩、森山 昭, 冶金反应工程学 (原版1972年) 蔡志鹏、谢裕生译, 科学出版社, 北京, 1981, 2.
- [21] 森山 昭, 金属(日文), 47(1977), № 11, 60.
- [22] 见文献 [15], 6.
- [23] Smith, J. M., Chemical Engineering Kinetics, Mc Graw-Hill, London, 1981, 3rd Ed.
- [24] Hill, C. G., Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design, Wiley Sons, New York 1977.
- [25] 见文献 [20].

## SOME VIEWPOINTS ON THE SCOPE AND METHODS OF STUDY OF KINETICS OF PROCESS METALLURGY AND METALLURGICAL REACTION ENGINEERING

Wei Shou-kun

(Beijing University of Iron and Steel Technology)

Received 5 February, 1985

### ABSTRACT

Following the establishment of the subject Chemical Reaction Engineering in 1957, a new subject called Metallurgical Reaction Engineering was introduced by the Japanese

author I. Muchi in 1972, although this name has not yet been adopted in western countries. Kinetics of Process Metallurgy, as one of the main parts of Physical Chemistry of Process Metallurgy, deals with the rate and mechanism of metallurgical reactions in process metallurgy. However, in recent times, confusion or misunderstanding has arisen among metallurgists of domestic and other asiatic countries concerning the scope and methods of study between Kinetics of Process Metallurgy and Metallurgical Reaction Engineering. For instance, first, items that belong really to the scope of Kinetics of Process Metallurgy such as the reduction of iron ore with the non-reacting core model are regarded as topics of Metallurgical Reaction Engineering. And secondly, methods of investigation on Chemical Reaction Engineering are applied without any restraint to Metallurgical Reaction Engineering in spite of the special characteristics of metallurgical processes. It is the purpose of this paper to elucidate some personal viewpoints on the scope and methods of study of Kinetics of Process Metallurgy and Metallurgical Reaction Engineering with a view to promoting the proper development of the latter subject.

The physical and chemical processes pertaining to the flow sheet of the extraction of a metal in the process metallurgy is at first briefly summarized. Then discussion on the difference between macrokinetics and microkinetics is made. It is quite evident that Kinetics of Process Metallurgy belongs to the field of macrokinetics, in the respect that the rate of a metallurgical reaction is greatly influenced by the flow conditions of the reacting substances and their mass and heat transfer. Methods of investigation of Chemical Reaction Engineering are discussed with respect to the following 5 steps:

1. Formulation of the chemical kinetics equation;
  2. Mathematical modeling of the chemical process involved in the reactor;
  3. Simulation experimentation by calculation with the computer technique;
  4. Optimization study of the dimensions and operation conditions of the reactor;
- and
5. Dynamic analysis and automatic control of the reactor.

Analysis is made of the intrinsic complicated nature of metallurgical processes, as manifested by the complexity of the raw materials, the presence of more phases taking part in the reaction, the empirical method of design of metallurgical furnaces, the varied composition of the metallurgical products, the complication during the cooling of metal ingots, as well as the difficulty and imperfection of the measuring techniques at high temperatures. All these factors make Metallurgical Reaction Engineering far more complicated than Chemical Reaction Engineering. While Kinetics of Process Metallurgy forms the theoretical foundation of Metallurgical Reaction Engineering, new methods of investigation for the development of the latter subject should be devised basing on the special characteristics of metallurgical processes. Mathematic modeling and simulation experimentation with the computer technique should be applied to metallurgical processes only when with close contact with the industrial practice. Any imaginary aimless mathematic modeling that could not be proved or identified experimentally either in the laboratory or in the industrial practice would mean much labor without reward.