

DOI: 10.34185/1991-7848.itmm.2026.01.051

## МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КІНЕТИКИ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ЧАВУНУ ПРИ ВІДНОВЛЕННІ ЗАЛІЗА З ГЕМАТИТУ ТВЕРДИМ ВУГЛЕЦЕМ

Пантейков С.П. [ORCID]

*Дніпровський державний технічний університет к.т.н., доцент, Україна*

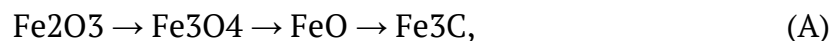
**Анотація.** У роботі представлено математичну модель кінетики процесу ступінчастого відновлення заліза з поодинокого шматка залізної руди твердим вуглецем. Модель дозволяє досліджувати кінетику як окремих етапів відновлення оксидів і карбїду заліза, так і всього процесу відновлення рідкого чавуну з гематиту з використанням як відновників газу СО та твердого вуглецю С. Передбачена можливість моделювання розмірів шматків гематитової руди і температур процесу, що складається з послідовних етапів непрямого відновлення з гематиту нижчих оксидів заліза (магнетиту і вюститу) та прямого відновлення з вюститу заліза, науглецюваного до стану чавуну.

**Ключові слова:** магнетит, вюстит, монооксид вуглецю, науглецювання, карбїд заліза, задача Стефана, метод Дюзінбера.

### Вступ

За останні роки значно зріс інтерес до технологій одержання заліза безпосередньо з різних залізородних матеріалів у агрегатах прямого відновлення.

З урахуванням раніше отриманих результатів [1–5] високотемпературна схема процесу ступінчастого відновлення заліза з гематиту при застосуванні у відновній печі як відновників газу СО і твердого вуглецю С набуває вигляду:



при цьому дві перші стадії даного процесу ( $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4$  і  $\text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow \text{FeO}$ ) відбуваються за рахунок газу СО, а остання стадія ( $\text{FeO} \rightarrow \text{Fe}_3\text{C}$ ) – за рахунок твердого вуглецю С.

### Постановка проблеми

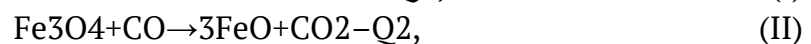
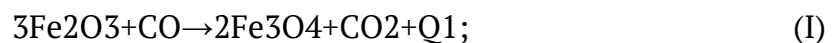
Результати проведених власних термодинамічних досліджень [1–5] свідчать, що всі існуючі математичні моделі, які описують кінетику процесу ізотермічного відновлення заліза (Fe) з гематиту (або магнетиту) газом СО, у тому числі з наступним науглецюванням відновленого заліза, є не зовсім

коректними в силу встановлених наукових фактів [1–5]. Це робить актуальним розробку даної математичної моделі процесу ступінчастого відновлення науглецьованого заліза ( $Fe_3C$ ) з гематиту ( $Fe_2O_3$ ), яка передбачає моделювання двох послідовних етапів відновлення магнетиту ( $Fe_3O_4$ ) з гематиту і вюститу ( $FeO$ ) з магнетиту газом  $CO$  та заключного етапу відновлення з вюститу заліза, науглецьованого до стану чавуну, твердим вуглецем ( $C$ ).

Основний матеріал

Для математичного опису етапів відновлення вюститу газом  $CO$  була вибрана зональна модель відновлення шару  $FeO$  на поверхні шматка гематитової руди [6].

На рис. 1 наведено схему ступінчастого процесу ізотермічного відновлення вюститу на поверхні шматка гематиту відновним газом  $CO$  за хімічними реакціями:



що є першими двома етапами ступінчастого відновлення карбіду заліза за схемою (А).

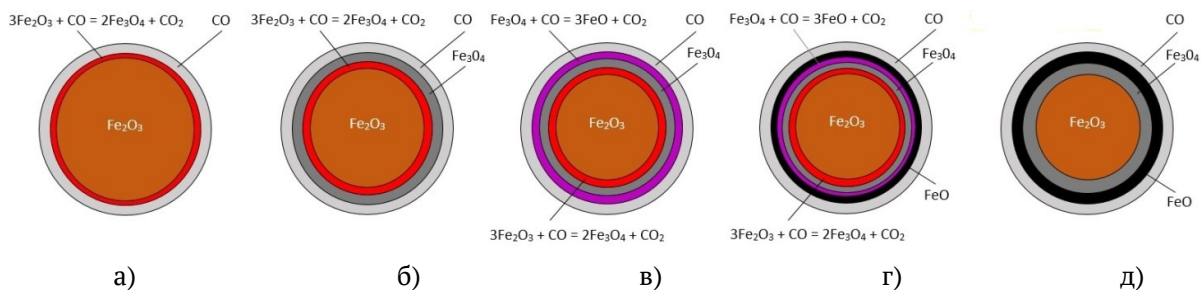


Рисунок 1 – Кінетика ізотермічного відновлення вюститу з гематиту при контакті шматка залізної руди з монооксидом вуглецю

Механізм ступінчастого відновлення вюститу з поодинокого шматка гематиту газом  $CO$  складається з наступних послідовно-поєднаних стадій зовнішнього та внутрішнього масопереносу і хімічної взаємодії при перебігу кожної з реакцій (1) і (2):

1. Дифузії газоподібного реагенту–відновника ( $CO$ ), що надходить з основного газового потоку через газовий дифузійний шар до поверхні шматка руди:

$$J_{газ} = k_{газ} \cdot \Delta C_1. \quad (1)$$

Для стаціонарного газового шару:

$$k_{\text{газ}} = \frac{D_{\text{газ}}}{\delta}. \quad (2)$$

2. Дифузії газу–відновника вглиб реакційного шару руди через пори і тріщини у ньому, при цьому на початку першого етапу – це однорідний шматок гематиту, наприкінці першого етапу – шматок гематиту з шаром відновленого магнетиту, ще пізніше – той самий шматок руди з шаром відновленого вюстити:

$$J_{\text{пор}} = D_{\text{еф}} \cdot \frac{\Delta C_2}{S}. \quad (3)$$

$D_{\text{еф}}$  враховує пористість  $\varepsilon$  і тортуюзність  $\xi$  шматка руди:

$$D_{\text{еф}} = \frac{\varepsilon}{\xi} \cdot D_{\text{чист}}. \quad (4)$$

3. Реакції хімічної взаємодії відновного газу CO з початковим оксидом заліза та адсорбції ним молекул газу–відновника, зародження та зростання твердих фаз оксиду заліза, що відновлюється, утворення оксиду відновника і десорбції його молекул:

$$r = K \cdot (C_{\text{пор}})^n. \quad (5)$$

4. Дифузії газоподібного продукту реакції (CO<sub>2</sub>) у зворотному напрямку через пори та тріщини шматка руди до його поверхні (аналогічно формулам (3) і (4)).

5. Дифузії (винос) газу CO<sub>2</sub> через газовий дифузійний шар назад до основного газового потоку (аналогічно формулам (1) і (2)).

Загальний час процесу відновлення визначається сумою тривалостей перебігу окремих послідовних етапів відновлення (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> → Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> і Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> → FeO), тоді як швидкість кожного з них визначається сумарним опором зовнішньої дифузії, внутрішньопористого масопереносу та реакції хімічної взаємодії. Загальна швидкість процесу відновлення вюстити газом CO лімітується найбільш повільним етапом.

У формулах (1)–(5):  $J_{\text{газ}}$  і  $J_{\text{пор}}$  – потоки молекул CO через газовий шар і у порах шматка руди;  $k_{\text{газ}}$  – коефіцієнт масопереносу CO у газовому шарі;  $\Delta C_1$  і  $\Delta C_2$  – різниці між концентраціями CO: у газовому потоці та на поверхні шматка руди і на поверхні та у порах шматка руди відповідно;  $C_{\text{пор}}$  – концентрація CO у порах шматка руди;  $D_{\text{газ}}$  – коефіцієнт дифузії CO в газовій суміші;  $D_{\text{еф}}$  і  $D_{\text{чист}}$  –

ефективний і «чистий» коефіцієнти дифузії CO відповідно в пористому тілі та у газовій суміші;  $\delta$  і  $S$  – товщини газового шару і реакційного шару шматка руди в момент часу  $\tau$ ;  $r$  – швидкість аналізованої хімічної реакції;  $K$  – константа швидкості при даній температурі;  $n$  – порядок реакції.

Для математичного опису останнього етапу відновлення карбїду заліза з вюститу твердим вуглецем С загального процесу ступінчастого відновлення навуглецьованого заліза обрана зональна модель нагрівання шматка гематитової руди у формі кулі і плавлення на його поверхні шару відновленого вюститу [7].

Механізм відновлення  $Fe_3C$  з  $FeO$  складається з наступних послїдовних стадїй:

1. Нагрівання і плавлення шару  $FeO$  на поверхні шматка залїзної руди (рис. 2).

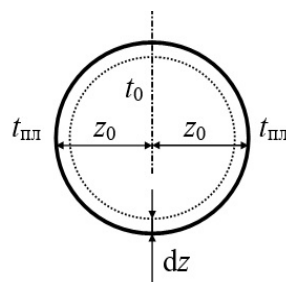
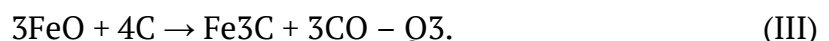


Рисунок 2 – Розрахункова область розподїлу температур за радіусом шматка руди

2. Відновлення і навуглецьовання залїза з отриманням  $Fe_3C$  з розплавленого  $FeO$ :



Математичний опис процесу розплавлення шару  $FeO$  має наступний вигляд.

Розподїл температур у шматку руди описується рївнянням теплопровідності у сферичних координатах:

$$c \cdot \rho \cdot \frac{\partial t(x, \tau)}{\partial \tau} = \lambda \cdot \left( \frac{\partial^2 t(x, \tau)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial t(x, \tau)}{\partial x} \right), \quad 0 < x < z(\tau), \quad \tau > 0. \quad (6)$$

$$\text{Початкові умови: } t(x, 0) = t_0, \quad 0 < x < z(0), \quad z(0) = z_0. \quad (7)$$

Граничні умови:

$$\frac{\partial t(0, \tau)}{\partial x} = 0, \quad \tau > 0; \quad (8)$$

– у період нагрівання зовнішнього шару FeO

$$-\lambda \cdot \frac{\partial t(x, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=z(\tau)} = \alpha \cdot (t_c - t(z(\tau), \tau)), \quad t(z(\tau), \tau) < t_{пл}; \quad (9)$$

– у період розплавлення шару FeO на поверхні (рухома межа фазового переходу)

$$-\rho \cdot L \cdot \frac{dz(\tau)}{d\tau} = \alpha \cdot (t_c - t(x, \tau)) - \lambda \cdot \frac{\partial t(x, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=z(\tau)}, \quad t(z(\tau), \tau) = t_{пл}, \quad (10)$$

де  $c, \rho, \lambda$  – теплоємність, щільність і теплопровідність матеріалів шматка руди;  $t_0, z_0$  – початкові температура і радіус шматка руди;  $t_c, t_{пл}$  – температури навколишнього середовища і плавлення вюститу;  $x$  – координата за радіусом шматка руди;  $\alpha$  – коефіцієнт тепловіддачі конвекцією від навколишнього середовища;  $L$  – теплота фазового переходу вюститу;  $\tau$  – час процесу;  $dz(\tau)$  – рухома межа фазового переходу.

Умова (10) відображає баланс енергії на межі між твердою рудою та розплавленим шаром FeO.

Після повного розплавлення шару вюститу на поверхні шматка руди модель розпочинає новий цикл розрахунків відновлення FeO з Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> газом CO і Fe<sub>3</sub>C з FeO твердим вуглецем C, тобто усі три описані етапи. Цикли повторюються до повного перетворення шматка залізної руди на вюстит з утворенням з нього карбїду заліза.

Математична модель враховує:

– дифузійний, кінетичний та змішаний режими перебігу реакцій (I) і (II), при яких у порах і тріщинах шматка руди швидкості дифузії різні як для CO, так і для CO<sub>2</sub>;

– пористості гематиту, магнетиту і вюститу залежно від температури.

Температура плавлення вюститу приймалася за даними діаграми двокомпонентної системи FeO–SiO<sub>2</sub>. Ступінь відновлення заліза з FeO залежно від температури процесу бралася за літературними даними. Ступінь науглецювання відновленого заліза визначалася за даними діаграми стану системи Fe–C. Задача Стефана розв’язувалася явною різницевою схемою з використанням методу Duzinberre (Дюзінбера).

### Висновки

Розроблена математична модель кінетики процесу ступінчастого відновлення науглецюваного заліза з поодинокого шматка залізної руди

дозволяє досліджувати кінетику як окремих етапів відновлення оксидів і карбїду залїза, так і всього процесу відновлення рїдкого чавуну з гематиту з використанням як відновників газу CO та твердого вуглецю C. Передбачена можливість моделювання розмірів шматків гематиту і температур процесу відновлення, який складається з послїдовних етапів непрямого відновлення з гематиту нижчих оксидів залїза і прямого відновлення з вюстити навуглецьованого до стану чавуну залїза за схемою (А).

### ЛІТЕРАТУРА

1. Пантейков С.П. Розрахунок температур перебігу хїмічних реакцій процесу ступїнчастого відновлення залїза з гематиту газом CO і газифїкації твердого вуглецю за їснуючими формулами і за стандартними значеннями ентальпїї та ентропїї речовин. Збїрник наукових праць ДДТУ: технїчні науки. Кам'янське: ДДТУ. – 2021. Вип. 2(39). С. 16–26. DOI: <https://doi.org/10.31319/2519-2884.39.2021.2>.
2. Пантейков С. П. Розрахунок температур перебігу хїмічних реакцій процесу ступїнчастого відновлення залїза з гематиту газом CO і газифїкації твердого вуглецю за мїрами хїмічної спорїдненостї речовин до кисню. International Science Journal of Engineering & Agriculture. – 2022. Vol. 1, No. 2. P. 1–8. DOI: <https://doi.org/10.46299/j.isjea.20220102.1>.
3. Пантейков С.П. Термодинамїчний аналіз процесів відновлення залїза з вюстити твердим вуглецем. Proc. of VII-th International Scientific and Practical Conference “Science, Technology and Global Challenges” (Tokyo, Japan, March 05–07, 2026). Tokyo: CPN Publishing Group. – 2026. P. 203–212. URL: <https://sci-conf.com.ua/wp-content/uploads/2026/03/SCIENCE-TECHNOLOGY-AND-GLOBAL-CHALLENGES-5-7.03.26.pdf>.
4. Пантейков С. П. Термодинамїчний аналіз умов перебігу хїмічних реакцій навуглецьовання залїза газом CO при відновленнї з вюстити. Вісник Приазовського державного технїчного унїверситету: зб. наук. праць. Серїя: Технїчні науки. Днїпро: ДВНЗ «Приазов. держ. техн. ун-т». – 2024. Вип. 49. Т. 1. С. 175–183. DOI: <https://doi.org/10.31498/2225-6733.49.1.2024.321243>.
5. Пантейков С.П. Термодинамїчний аналіз процесів навуглецьовання залїза при його відновленнї з вюстити твердим вуглецем. Abstracts of the X-th International Scientific and Practical Conference “Current trends in the development of science and society” (Oslo, Norway, March 10–13, 2026). Oslo: International Science Group. – 2026. P. 184-192. DOI: <https://doi.org/10.46299/ISG.2026.1.10>.
6. Пантейков С. П. Математичне моделювання кїнетики ступїнчастого процесу непрямого відновлення вюстити з гематиту газом CO. Матерїали XVII Мїжнародної науково-практичної конференції «Інформаційні технологїї і автоматизація – 2024» (м. Одеса, Україна, 31 жовтня – 1 листопада 2024 р.). Одеса. – 2024. С. 86–88. URL: <https://ontu.edu.ua/itia>.

7. Пантейков С. П. Математичне моделювання кінетики процесів відновлення і науглецювання заліза з вюститу твердим вуглецем. Матеріали міжнародної науково-технічної конференції «Інформаційні технології в металургії та машинобудуванні – ITMM 2025» (м. Дніпро, Україна, 23, 24 квітня 2025 р.). Дніпро: НметАУ. – 2025. С. 347–354. DOI: <https://doi.org/10.34185/1991-7848.itmm.2025.01.061>.

## **MATHEMATICAL MODEL OF PIG IRON FORMATION KINETICS IN REDUCING IRON FROM HEMATITE USING SOLID CARBON**

Sergei Panteikov

**Abstract.** *This work presents a mathematical model for the stepwise reduction kinetics of iron from a single piece of iron ore with solid carbon. The model makes it possible to investigate the kinetics of both individual stages of iron oxides and iron carbide reduction, as well as the overall process of liquid pig iron production from hematite using carbon monoxide gas and solid carbon as reducing agents. The possibility is provided to simulate the size of hematite ore pieces and the process temperatures, which consist of sequential stages of indirect reduction from hematite to lower iron oxides (magnetite and wüstite) and direct reduction from wüstite to iron carburized to the state of pig iron.*

**Keywords:** *magnetite, wüstite, carbon monoxide, carburization, iron carbide, Stefan problem, Duzinberre method.*

### **REFERENCE**

1. Panteikov S. P. Rozrakhunok temperatur perebihu khimichnykh reaktsii protsesu stupinchastoho vidnovlennia zaliza z hematytu hazom CO i hazyfikatsii tverdoho vuhletsiu za isnuiuchymy formulamy i za standartnymy znachenniamy entalpii ta entropii rechovyn. Zbirnyk naukovykh prats DDTU: tekhnichni nauky, Kamianske, Ukraine: DDTU. – 2021. Vyp. 2(39). S. 16–26. DOI: <https://doi.org/10.31319/2519-2884.39.2021.2> (Ukr.).
2. Panteikov S. P. Rozrakhunok temperatur perebihu khimichnykh reaktsii protsesu stupinchastoho vidnovlennia zaliza z hematytu hazom CO i hazyfikatsii tverdoho vuhletsiu za miramy khimichnoi sporidnenosti rechovyn do kysniu. International Science Journal of Engineering & Agriculture. – 2022. Vol. 1. No. 2. P. 1–8. DOI: <https://doi.org/10.46299/j.isjea.20220102.1> (Ukr.).
3. Panteikov S. P. Termodynamichniy analiz protsesiv vidnovlennia zaliza z viustytu tverdym vuhletsem. Proc. of the VII-th International Scientific and Practical Conference “Science, Technology and Global Challenges” (Tokyo, Japan, March 05–07, 2026). Tokyo: CPN Publishing Group. – 2026. P. 203–212. URL: <https://sci-conf.com.ua/wp-content/uploads/2026/03/SCIENCE-TECHNOLOGY-AND-GLOBAL-CHALLENGES-5-7.03.26.pdf> (Ukr.).
4. Panteikov S. P. Termodynamichniy analiz umov perebihu khimichnykh reaktsii navuhletsivuvannia zaliza hazom CO pry vidnovlenni z viustytu. Visnyk Pryazovskoho

derzhavnoho tekhnichnoho universytetu: zb. nauk. prats. Serii: Tekhnichni nauky, Dnipro, Ukraine: DVNZ «Pryazov. derzh. tekhn. un-t». – 2024. Vyp. 49. T. 1. S. 175–183. DOI: <https://doi.org/10.31498/2225-6733.49.1.2024.321243> (Ukr.).

5. Panteikov S. P. Termodynamichniy analiz protsesiv navuhletsuvannya zaliza pry yoho vidnovlenni z viustytu tverdym vuhletsem. Abstracts of the X-th International Scientific and Practical Conference “Current trends in the development of science and society” (Oslo, Norway, March 10–13, 2026). Oslo: International Science Group. – 2026. P. 184–192. DOI: <https://doi.org/10.46299/ISG.2026.1.10> (Ukr.).

6. Panteikov S. P. Matematychni modeliuvannya kinetyky stupinchastoho protsesu nepriamoho vidnovlennia viustytu z hematytu hazom CO. Materialy XVII Mizhnarodnoi naukovo-praktychnoi konferentsii «Informatsiini tekhnolohii i avtomatyzatsiia – 2024» (m. Odesa, Ukraina, 31 zhovtnia – 1 lystopada 2024 r.). Odesa. – 2024. S. 86–88. URL: <https://ontu.edu.ua/itia> (Ukr.).

7. Panteikov S. P. Matematychni modeliuvannya kinetyky protsesiv vidnovlennya i navuhletsuvannya zaliza z vyustytu tverdym vuhletsom. Materialy mizhnarodnoyi naukovo-tekhnichnoyi konferentsiyi “Informatsiyni tekhnolohiyi v metalurhiyi ta mashynobuduvanni – ITMM 2025” (m. Dnipro, Ukraina, 23–24 kvitnya 2025 r.), Dnipro: NmetAU. – 2025. S. 347–354. DOI: <https://doi.org/10.34185/1991-7848.itmm.2025.01.061> (Ukr.).