

УДК 669.046: 519.87

РАЗРАБОТКА ОСНОВ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ МЕТАЛЛИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ*

Нохрина О.И., д.т.н., профессор кафедры металлургии черных металлов (kafamsf@sibsiu.ru)

Рожихина И.Д., д.т.н., профессор кафедры металлургии черных металлов

Рыбенко И.А., к.т.н., доцент кафедры прикладных информационных технологий
и программирования (rybenkoi@rambler.ru)

Ходосов И.Е., заведующий лабораториями кафедры металлургии
черных металлов (Khodosov@mail.ru)

Сибирский государственный индустриальный университет
(654007, Россия, г. Новокузнецк, Кемеровская обл., ул. Кирова, 42)

Аннотация. Приведены результаты исследования твердофазного восстановления железа с использованием программного комплекса «Терра». Исследования проводили в два этапа: на модельной элементарной системе; восстановление железа из руды углями различных марок. В результате термодинамического моделирования на первом этапе исследования окислительно-восстановительных условий в системе Fe–C–O выявлены границы восстановительной, переходной и окислительных областей и соответствующие им значения отношения количества кислорода к количеству углерода в системе. Исследования восстановительных свойств углей путем расчетов равновесных составов в диапазоне температур 373 – 1873 К с использованием программного комплекса «Терра» показали, что состав газовой фазы в заданном диапазоне температур практически одинаков для всех типов углей и отличается по количеству выделившихся летучих. Резкое увеличение объема газа начинается при 673 К и заканчивается при 1073 К. Результаты термодинамического моделирования на втором этапе исследований позволили определить оптимальные расходы углей марок СС (слабоспекающийся), Д (длиннопламенный), 2Б (бурый), необходимые для полного восстановления железа из руды заданного состава.

Ключевые слова: программный комплекс, термодинамические системы, восстановление, железо, железная руда, уголь, фаза, газовая, конденсированная.

DOI: 10.17073/0368-0797-2016-4-237-244

Применение технологий по производству железа прямого восстановления является одним из перспективных направлений эффективного развития металлургии. Оптимизации технологических режимов восстановления железа посвящены исследования многих авторов [1 – 7].

Исследование процесса твердофазного восстановления железа осуществляли с использованием программного комплекса «Терра» [8].

В программе реализован метод расчета равновесия сложной термодинамической системы, основанный на принципе максимума энтропии, который сформулирован следующим образом: $S = S_{\max}$ при условии соблюдения закона сохранения массы ($M_j = \text{const}$) и полной внутренней энергии ($U_{\text{п}} = \text{const}$). Расчет максимума энтропии позволяет оценить состав системы в условиях равновесия на основании только одних фундаментальных законов термодинамики независимо от способов достижения равновесия. Поиск решения системы уравнений связи между величиной энтропии

единицы массы рабочего тела и термодинамическими параметрами, определяющими ее состав, свойства и условия существования, проводили методом множителей Лагранжа.

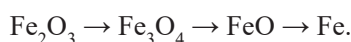
Процесс восстановления железа исследовали в два этапа: на модельной элементарной системе и путем восстановления железа из руды углями различных марок.

На первом этапе проведены расчеты на модельной элементарной системе с поэлементным составом Fe–C–O [9, 10], которая формировалась путем задания исходного состава смеси в виде 1 моля оксида Fe_2O_3 и количества молей углерода и кислорода, которые варьировались соответственно параметрами n и m ($\text{Fe}_2\text{O}_3 + n\text{C} + m\text{O}$). Перечень возможных веществ определили в результате численного моделирования на основе программного комплекса «Терра» для диапазона температур 298 – 1800 К и различных возможных термодинамических состояний, которые в этой программе задаются фиксацией значений переменных. Термодинамически возможное количество веществ, образующихся из указанных элементов для выбранного диапазона температур, составило пример-

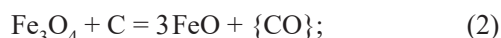
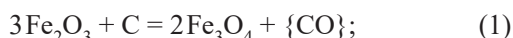
* Работа выполнена в рамках государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки РФ.

но 15 – 25. Все вещества по величине концентрации в конечном состоянии разделили на значимые и незначимые с порогом различимости 10^{-4} моль/кг смеси. В качестве значимых веществ оказались газовая фаза (CO , CO_2 , O_2) и конденсированная фаза (C , Fe , FeO , Fe_3O_4 , Fe_2O_3).

Процесс восстановления железа из оксидов по принципу А.А. Байкова [11] протекает ступенчато путем последовательного перехода от высших оксидов к низшим по следующей схеме (при $t > 873$ К):



В системе $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$ возможно как прямое, так и косвенное восстановление железа. Прямое восстановление железа из оксидов твердым углеродом происходит в соответствии с реакциями



Косвенное восстановление железа из оксидов происходит в результате взаимодействия с оксидом углерода:

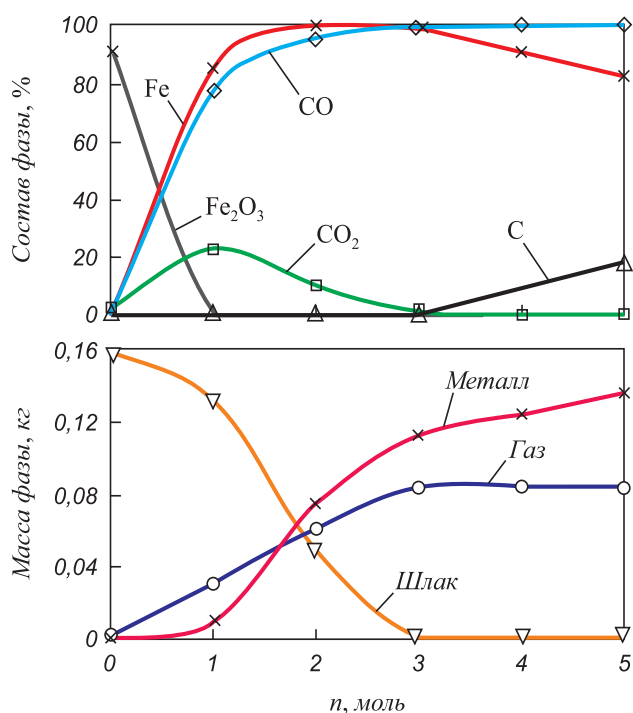
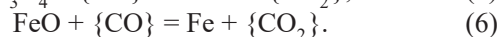
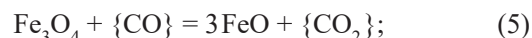


Рис. 1. Зависимость состава и массы конденсированных и газовых фаз от расхода углерода в системе $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$ при температуре 1273 К

Fig. 1. Dependence of the composition and mass of condensed and gas phases on the consumption of carbon in the system of $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$ at the temperature of 1273 K



При исследовании процессов в системе $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$ решали следующие задачи: определение температуры и количества углерода, обеспечивающих полное восстановление железа; определение значений показателя a^* , который характеризует окислительный потенциал системы, соответствующих границам областей протекания окислительных и восстановительных процессов. В расчетах использовали показатель $a^* = m/n$, равный отношению количества кислорода к количеству углерода в системе.

Температуру, необходимую для реализации процесса восстановления, определяли путем расчетов равновесных составов системы $\text{Fe}_2\text{O}_3 + n\text{C}$ в диапазоне температур 573 – 1973 К при $n = 3$ моля. Такое количество углерода необходимо по стехиометрии для полного восстановления одного моля оксида Fe_2O_3 , что также видно из рис. 1, на котором показаны зависимости состава и массы фаз от расхода углерода. При $n > 3$ конденсированная фаза состоит из железа и углерода, оксиды железа отсутствуют.

На рис. 2 приведены зависимости параметров процесса восстановления железа от температуры в присутствии углерода в количестве $n = 3$ моля. Видно, что процессы полного восстановления протекают при $t > 1073$ К, в системе полностью отсутствуют оксиды железа.

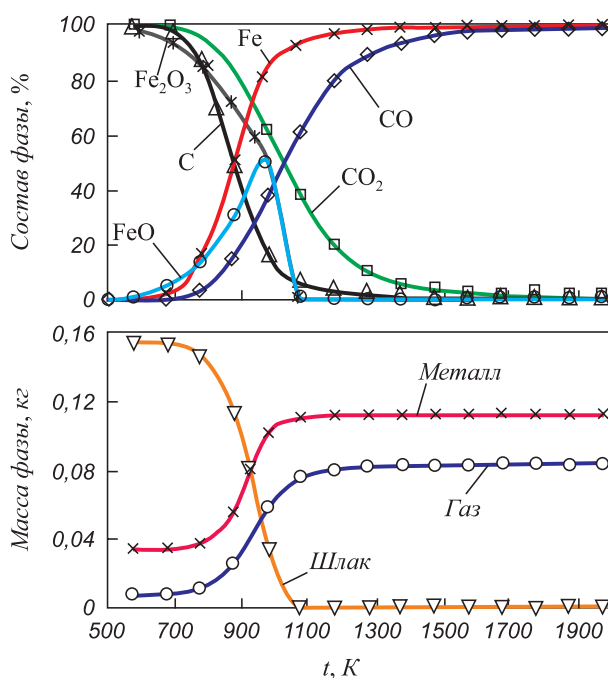


Рис. 2. Зависимость состава и массы конденсированных и газовых фаз от температуры в системе $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$

Fig. 2. Dependence of the composition and mass of condensed and gas phases on temperature in the system of $\text{Fe}-\text{C}-\text{O}$

Значения показателя a^* , соответствующие границам областей протекания окислительных и восстановительных процессов в системе Fe–C–O, определяли путем последовательных расчетов равновесных составов смеси для температуры $t = 1873$ К при варьировании параметра m и количестве углерода в системе $n = 4$ моля. Избыточное количество восстановителя необходимо для выделения восстановительной зоны. Интервал изменения параметра m в пределах от нуля до 8 позволил изучить поведение модельной системы от восстановительных условий при избытке углерода до окислительных, когда в системе присутствует свободный кислород. На рис. 3 приведены зависимости абсолютного содержания компонентов газовой и конденсированной фаз и логарифма мольной доли $\lg(x_{O_2})$ кислорода в газовой фазе от параметра a^* .

Анализ результатов расчета показал наличие трех областей. Первая область – восстановительная, существует при значениях $a^* < 0,2$ и состоит из двух зон. Для первой зоны характерно присутствие железа и свободного углерода в конденсированной фазе, во второй зоне углерод отсутствует, и конденсированная фаза состоит из чистого железа. В первой зоне восстановительной области газовая фаза полностью состоит из CO, затем его содержание снижается до 60 %. Этому значению соответствует граница восстановительной и переходной областей ($a^* = 0,2$). Переходная область характеризуется снижением концентрации восстановленного железа до полного исчезновения и ростом содержания FeO в конденсированной фазе. Из рис. 3 видно, что этой области соответствует постоянное соотношение CO и CO₂ в газовой фазе. Значение показателя a^* изменяется в пределах от 0,2 до 0,5. При $a^* = 0,5$ в конденсированной фазе полностью исчезает железо, и система переходит в окислительную область. Первая зона окислительной области характеризуется дальнейшим снижением концентрации CO в газе до полного исчезновения, конденсированная фаза представлена 100 % FeO. В следующей переходной зоне окислительной области при $0,8 < a^* < 0,95$ происходит снижение содержания FeO в результате появления Fe₃O₄. При $a^* = 0,95$ в газовой фазе полностью исчезает CO, а в конденсированной – FeO. Система переходит в следующую зону, которая характеризуется наличием оксида Fe₂O₃ в конденсированной фазе и свободного кислорода в газовой фазе.

Границы областей наглядно видны на графике $\lg(x_{O_2}) = f(a^*)$, на котором выделены три области. Первая область связана с исчезновением свободного углерода, вторая – с полным превращением CO в CO₂, третья – с появлением свободного кислорода. Следует отметить также своеобразные «остановки» на кривой $\lg(x_{O_2})$, соответствующие двухфазным равновесиям между соединениями железа. Этим равновесиям между Fe и FeO, FeO и Fe₃O₄, Fe₃O₄ и Fe₂O₃ соответствует фиксированное значение x_{O_2} , которое определяется

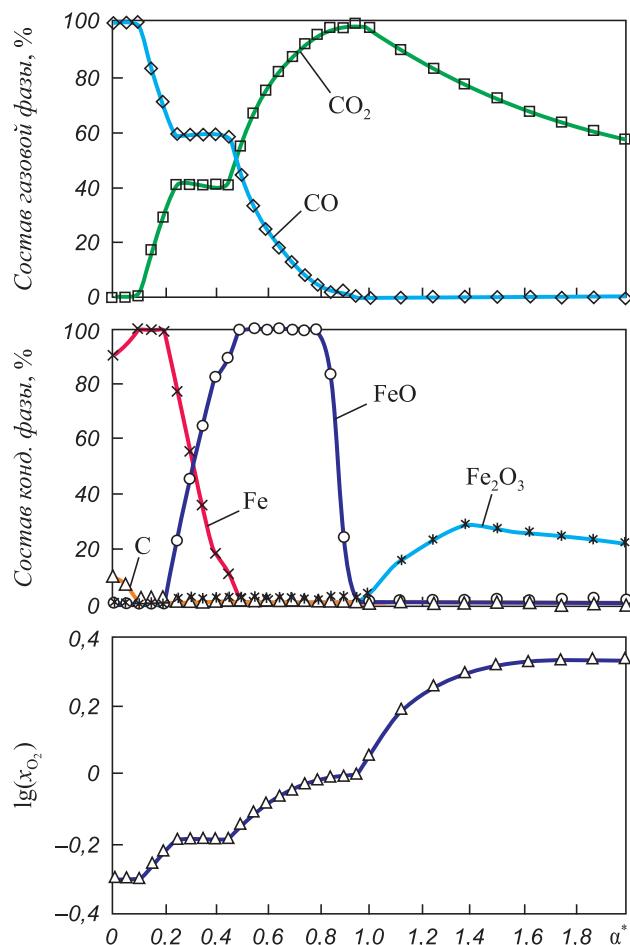


Рис. 3. Зависимость состава конденсированных, газовых фаз и логарифма мольной доли кислорода в газовой фазе от параметра a^* при температуре 1873 К

Fig. 3. Dependence of the composition of condensed, gas phases and the logarithm of the mole oxygen fraction on the parameters a^* at the temperature of 1873 K

температурой. Таким образом, при окислении железа и его низших оксидов увеличение расхода кислорода приводит только к уменьшению количества окисляющейся фазы, а кислородный потенциал атмосферы остается постоянным [2]. Таким образом, в результате исследования окислительно-восстановительных условий в системе Fe–C–O выявлены границы восстановительной, переходной и окислительной областей и соответствующие им значения a^* . Наилучшим условием для восстановления железа соответствует значение $a^* < 0,2$.

На втором этапе были проведены исследования процесса твердофазного восстановления железа из руды с использованием углей марок: Д (длиннопламенный), 2Б (бурый) и СС (слабоспекающийся). Химический состав руды следующий: 52,3 % Fe_{общ}; 19,15 % SiO₂; 3,31 % Al₂O₃; 0,072 % P₂O₅; 0,94 % CaO; 0,76 % MgO; 0,42 % S; 5,78 % влаги.

Технический анализ углей представлен следующими данными:

Таблица 1

Состав золы углей

Table 1. Composition of coal ash

Марка угля	Содержание оксидов в золе, %									
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	P ₂ O ₅	K ₂ O	TiO ₂	Na ₂ O	SO ₃
Д	55,3	20,1	8,5	9,7	3,7	1,8	1,26	0,5	0,57	–
2Б	11,4	5,2	10,3	42,7	4,8	0,02	0,2	0,2	0,15	–
СС	49,6	16,3	7,4	5,2	1,8	0,68	0	1,2	0	3,59

Марка угля	Состав угля, %				
	[C _{тв}]	A ^d	V ^{daf}	W ^r	S ^d
Д	55,60	5,64	43,53	15,40	0,26
2Б	49,10	7,83	46,76	35,30	0,68
СС	70,02	6,00	20,50	6,80	0,30

Состав золы исследуемых углей приведен в табл. 1.

Результаты оценки возможности получения металлизированных продуктов с использованием углей описаны в работах [12 – 16].

Предварительно с использованием программного комплекса «Терра» провели исследование восстановительных свойств углей путем расчетов равновесных составов в диапазоне температур 373 – 1873 К. На рис. 4 приведены зависимости состава и объема газовой фазы, образующейся в результате выделения летучих компонентов угля в процессе нагрева, от температуры для трех марок Д, 2Б и СС. Из рисунка следует, что состав газовой фазы в заданном диапазоне температур практически одинаков для всех типов углей, отличие заключается в количестве выделившихся летучих. В температурном диапазоне 373 – 1273 К происходит снижение объемной концентрации водяного пара с 35 % для углей марок Д и СС и с 46 % для угля марки 2Б. При 1273 К водяной пар в газовой фазе полностью исчезает. Такое же снижение концентрации характерно для метана, содержание которого уменьшается с 60 % до следов для углей марок Д и СС и с 50 % для угля марки 2Б. Одновременно с уменьшением концентрации водяного пара и метана в газовой фазе начинается увеличение концентрации водорода, которая также достигает своего максимального значения (порядка 80 %) при температуре 1273 К для углей марок Д и СС и 73 % для угля марки 2Б и далее при повышении температуры не увеличивается. При температурах 373 – 773 К наблюдается незначительное увеличение концентрации CO₂ до 3 – 5 %, а затем при увеличении температуры до 1273 К содержание CO₂ в газе уменьшается до следов, образование CO начинается также при 773 К и при 1273 К достигает максимального значения 20 – 25 %. В диапазоне 1273 – 1873 К газовая фаза представлена только водородом и монооксидом углерода. Резкое увеличение объема газа начинается

при температуре 673 К и заканчивается при 1073 К. При 1273 К выделение летучих полностью заканчивается, и объем газовой фазы при увеличении температуры не меняется и составляет 1,27; 1,5 и 0,7 м³/кг угля марок Д, 2Б и СС соответственно.

Далее были проведены исследования процесса твердофазного восстановления железа углями различных марок. Расчет проводили на 100 кг руды при

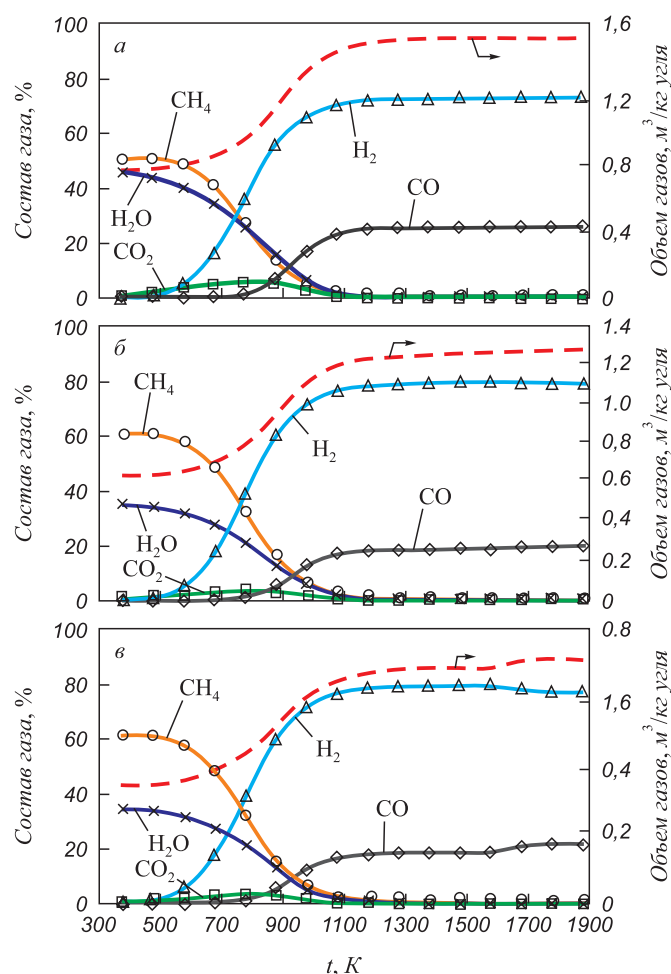


Рис. 4. Зависимость состава и объема газовой фазы углей марок 2Б (а), Д (б), СС (в) от температуры

Fig. 4. Dependence of the composition and the volume of gas phase of coals of 2B (2Б) (a), candle coal (Д) (b), low-caking coal (СС) (v) grades on the temperature

расходах угля каждой марки 10, 15, 20, 25 и 30 кг. Так как результаты термодинамического моделирования в элементной системе показали, что восстановление железа происходит при температурах выше 1073 К, моделирование реальной системы проводили в диапазоне температур 1073 – 1573 К. Термодинамическая система представлена элементами H–O–S–N–C–Si–Al–Fe–Ti–Mg–Ca–Na–K. Из веществ, которые могут быть получены в результате расчетов равновесного состояния, были выбраны значимые, из которых в газовой фазе могут присутствовать H_2 ; H_2O ; H_2S ; CO; CO_2 ; CH_4 ; N_2 ; в конденсированной – C; Fe; FeO; FeS; Fe_3C ; SiO_2 ; Al_2O_3 ; TiO_2 ; $MgSiO_3$; $Ca_3P_2O_8$; $CaCO_3$; $CaSiO_3$; $CaTiO_3$; $Na_2Si_2O_5$; $K_2Si_4O_9$. Пример расчета для 10 кг угля марки Д представлен в табл. 2.

Результаты расчетов, которые обобщены в табл. 3, показали, что в заданном интервале температура не влияет на процесс восстановления, и количество восстановленного железа зависит только от расхода восстановителя, что подтверждается результатами термодинамического моделирования в элементной системе. Зависимости степени восстановления железа (α) и состава газовой фазы от расхода угля при температуре 1373 К представлены на рис. 5, из кото-

рого следует, что необходимое количество угля для полного восстановления железа из 100 кг составляет 20, 15 и 25 кг для марок Д, СС и 2Б соответственно, что также наглядно видно из графиков зависимости содержания CO и CO_2 в газовой фазе от расхода угля. Экстремумы на графике зависимости содержания CO_2 в газовой фазе (рис. 5) соответствуют точкам полного восстановления железа, когда в системе начинает накапливаться углерод, в результате чего происходит более резкое увеличение концентрации CO и уменьшение концентрации CO_2 в газовой фазе. Такие же экстремумы и перегибы можно видеть на графиках зависимости содержания водорода и водяного пара в газовой фазе от расхода угля.

Выводы. В результате термодинамического моделирования с использованием программного комплекса «Терра» определен оптимальный расход угля каждой марки, необходимый для полного восстановления железа из руды заданного состава: 0,20 кг/кг для угля марки Д, 0,25 кг/кг для угля марки 2Б и 0,15 кг/кг для угля марки СС. Превышение этих значений расходов в процессе восстановления является нецелесообразным и приведет только к изменению состава газовой фазы: увеличению концентрации CO и H_2 и уменьшению концентрации CO_2 и H_2O .

Т а б л и ц а 2

Пример расчета равновесного состава смеси из 100 кг руды и 10 кг угля марки Д
в диапазоне температур 1073 – 1573 К

Table 2. Example of the calculation of equilibrium composition of the mixture from 100 kg of ore and 10 kg of candle coal of grade (Д) in the range of the temperature of 1073 – 1573 K

Равновесный состав, %	t, K										
	1073	1123	1173	1223	1273	1323	1373	1423	1473	1523	1573
$H_2(g)$	0,944	0,920	0,898	0,877	0,857	0,840	0,824	0,809	0,797	0,786	0,776
$H_2O(g)$	4,397	4,611	4,806	4,988	5,154	5,300	5,428	5,541	5,639	5,729	5,807
$H_2S(g)$	0,033	0,044	0,059	0,076	0,096	0,119	0,145	0,174	0,202	0,217	0,232
$N_2(g)$	0,237	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238	0,238
CO(g)	9,252	9,578	9,858	10,098	10,310	10,502	10,677	10,836	10,983	11,118	11,242
$CO_2(g)$	8,201	7,705	7,270	6,893	6,559	6,256	5,980	5,728	5,496	5,283	5,086
$CH_4(g)$	0,009	0,003	0,001	0	0	0	0	0	0	0	0
$SiO_2(k)$	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454	13,454
$Al_2O_3(k)$	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416	2,416
Fe(k)	5,965	6,043	6,125	6,242	6,367	6,474	6,567	6,646	6,708	6,742	6,768
FeO(k)	53,911	53,836	53,763	53,649	53,533	53,445	53,384	53,347	53,333	53,327	53,333
FeS(k)	1,038	1,006	0,968	0,922	0,868	0,806	0,735	0,655	0,575	0,529	0,479
$TiO_2(k)$	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002
$Mg_2P_2O_7(k)$	0,027	0,027	0,027	0,027	0,027	0,027	0,026	0,024	0,015	0	0
$Mg_3P_2O_8(k)$	0,013	0,013	0,013	0,013	0,013	0,013	0,014	0,015	0,022	0,034	0,034
$Ca_3P_2O_8(k)$	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077	0,077

П р и м е ч а н и е. (г) – газовая фаза; (к) – конденсированная фаза.

Т а б л и ц а 3

Степень восстановления железа из руды углем различных марок

Table 3. Reduction degree of iron from ore with the coal of different grades

t, K	Степень восстановления, %, при использовании угля марок														
	10 кг			15 кг			20 кг			25 кг			30 кг		
	Д	2Б	СС	Д	2Б	СС	Д	2Б	СС	Д	2Б	СС	Д	2Б	СС
1073	12	0	24	55	24	74	98	57	99	99	89	99	99	99	99
1123	12	0	24	55	24	73	98	57	99	99	89	99	99	99	99
1173	13	0	24	55	25	72	98	57	99	99	90	99	99	99	99
1223	13	0	23	55	25	71	98	58	99	99	90	99	99	99	100
1273	13	0	23	56	26	70	98	58	99	99	91	99	100	99	100
1323	13	0	23	56	26	70	98	59	99	99	91	99	100	99	100
1373	14	0	23	56	27	70	98	59	99	100	92	99	100	100	100
1423	14	0	23	56	27	69	98	59	99	100	92	100	100	100	100
1473	14	0	22	56	27	69	98	60	99	100	92	100	100	100	100
1523	14	0	22	56	27	68	98	60	99	100	92	100	100	100	100
1573	14	0	22	56	27	68	98	60	100	100	92	100	100	100	100

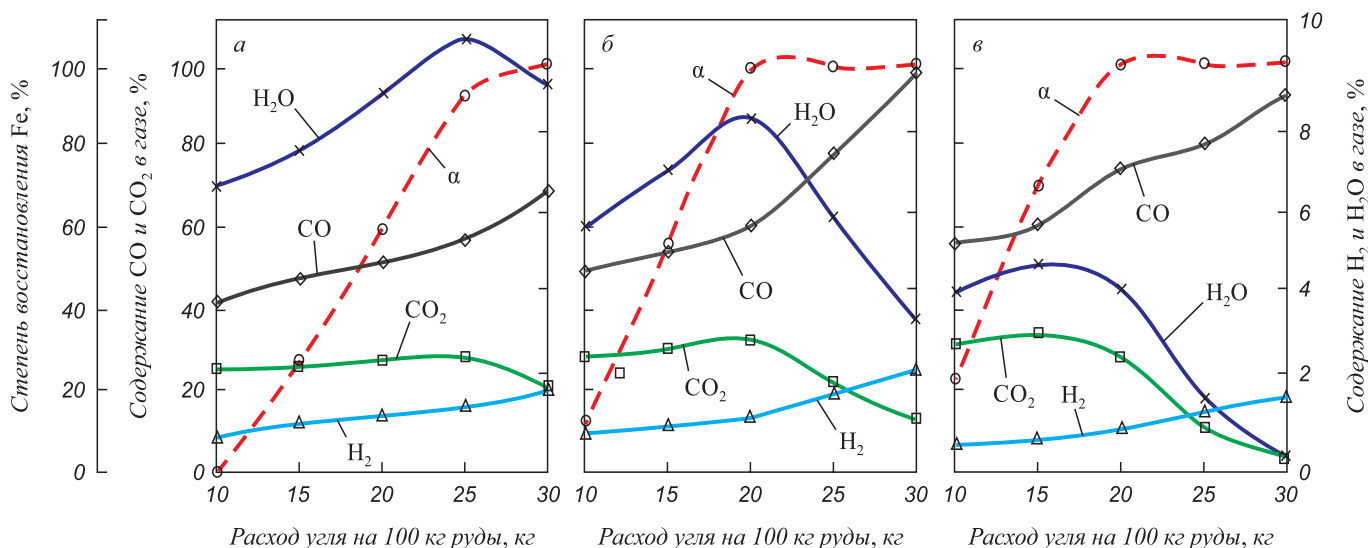


Рис. 5. Зависимость степени восстановления железа и состава газовой фазы от расхода угля марок 2Б (а), Д (б) и СС (в) в системе Fe–C–O–H при температуре 1373 К

Fig. 5. Dependence of the reduction degree of iron and the composition of gas phase on the consumption of coals of 2B (2B) (a), candle coal (Д) (b), low-caking coal (СС) (c) grades in the system of Fe–C–O–H at the temperature of 1373 K

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- Гасик М.И. Теория и технология производства ферросплавов. – М.: Металлургия, 1988. – 784 с.
- Юсфин Ю.С., Пашков Н.Ф. Металлургия железа. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. – 464 с.
- Якушевич Н.Ф., Строкина И.В., Полях О.А. Определение параметров окислительно-восстановительных процессов в системе Fe–C–O₂–H₂ // Изв. вуз. Черная металлургия. 2011. № 8. С. 13–18.
- Платонова О.В., Леонович Б.И., Лыкасов А.А. Термодинамика процессов восстановления оксидов железа углеродсодержащими газовыми смесями // Изв. вуз. Черная металлургия. 2003. № 7. С. 3–6.
- Асанов В.Р., Рошин В.Е., Сенин А.В., Рошин А.В. Термодинамический анализ химических превращений при твердофазной металлзации титаномагнетитовых концентратов // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 4. С. 12–15.
- Бигеев В.А., Пантелеев А.В., Черняев А.А. Математическое моделирование твердофазного восстановления пылей и шламов. – В кн.: Актуальные проблемы современной науки, техники и образования. Материалы 69-й научно-практической конференции. – Магнитогорск: изд. МГТУ, 2011. Т. 1. С. 132–135.
- Nobuhiko T., Hatanaka A., Kaku H., Kurihara K., Saitoh G. Development of iron-making Technology // Nippon Steel Technical Report. 2012. no. 101. P. 79–88.

8. Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. – М.: Наука, 1982. – 32 с.
9. Рыбенко И.А. Разработка методики и системы расчета вариантов технологий непрерывного получения металла в агрегатах струйно-эмульсионного типа: Автореф. дис. канд. техн. наук. – Новокузнецк, 2000. 16 с.
10. Дмитриенко В.И., Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Рыбенко И.А. Термодинамическая оценка возможности легирования стали при обработке ее ванадийсодержащим шлаком // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 10. С. 17 – 20.
11. Байков А.А. Сборник трудов. – М.: Изд. АН СССР, 1948. Т. 2. С. 531 – 546.
12. Ходосов И.Е., Нохрина О.И. Исследование твердофазного восстановления железа углями Кузбасса. – В кн.: Металлургия: технологии, управление, инновации, качество. Труды XVIII Всероссийской научно-практической конференции. – Новокузнецк: изд. СибГИУ, 2014. С. 203 – 207.
13. Динельт В.М., Аникин А.Е., Страхов В.М. Металлизация железорудного сырья с использованием буроугольного полукокса // Кокс и химия. 2011. № 5. С. 30 – 33.
14. Амдур А.М., Потапов А.М., Разницина А.Л., Лхамсурен М. Кинетика восстановления железорудного концентрата углем // Изв. вуз. Черная металлургия. 2012. № 8. С. 17 – 20.
15. Ying Yi Zhang, Yuan Hong Qi, Zong Shu Zou, Yun Gang Li. Development Prospect of Rotary Hearth Furnace Process in China // Advanced Materials Research. 2013. Vol. 746, P. 533–553.
16. Нохрина О.И., Ходосов И.Е. Использование каменных углей при восстановлении железа в твердой фазе. – В кн.: Инновации в материаловедении и металлургии. Материалы IV Международной интерактивной научно-практической конференции. – Екатеринбург: изд. УрФУ, 2015. С. 32 – 37.

Поступила 13 марта 2015 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2016. Vol. 59. No. 4, pp. 237–244.

DEVELOPMENT OF THE PRINCIPLES OF ENERGY EFFICIENT PROCESSES OF METALLIZATION USING THERMODYNAMIC MODELING

O.I. Nokhrina, I.D. Rozhikhina, I.A. Rybenko, I.E. Khodosov

Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

Abstract. The paper presents the results of iron solid-phase reduction study obtained by means of TERRA software package. Investigations were carried out in two stages: the experiment on the model elementary system and the study of iron reduction from iron ore by the coals of various grades. As a result of thermodynamic modeling in the first stage of oxidation-reduction conditions study in Fe–C–O system there were some boundaries of reducing, transition and oxidizing zones and the corresponding values of the ratio of oxygen to the amount of carbon in that system. Studying of coal reduction properties by calculating of equilibrium compositions in a temperature range of 373–1873 K with TERRA software package usage showed that the composition of a gas phase in the given temperature range is almost the same for all types of coals and differs according to the amount of released volatiles. The sharp increase of gas volume begins at 673 K and ends at 1073 K. The results of thermodynamic modeling in the second phase of the experiment enabled to determine the optimal CC coals consumption (low-caking), D (long-flame), 2B (lignite) required for a complete iron reduction from iron ore of the specified composition.

Keywords: software package, thermodynamic systems, reduction, iron, iron ore, coal, phase, gas, condensed.

DOI: 10.17073/0368-0797-2016-4-237-244

REFERENCES

1. Gasik M.I. *Teoriya i tekhnologiya proizvodstva ferrosplavov* [Theory and technology of ferroalloy production]. Moscow: Metallurgiya, 1988, 784 p. (In Russ.).
2. Yusfin Yu.S., Pashkov N.F. *Metallurgiya zheleza* [Iron metallurgy]. Moscow: IKTs “Akademkniga”, 2007, 464 p. (In Russ.).
3. Yakushevich N.F., Strokina I.V., Polyakh O.A. Parameter determination of oxidation and reduction processes in Fe–C–O₂–H₂ system. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2011, no. 8, pp. 13–18. (In Russ.).
4. Platonova O.V., Leonovich B.I., Lykasov A.A. Thermodynamics of reduction processes of ferric oxide with carbon-containing gas mixtures. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2003, no. 7, pp. 3–6. (In Russ.).
5. Asanov V.R., Roshchin V.E., Senin A.V., Roshchin A.V. Chemical transformations thermodynamical analysis at solid-phase metallization of titanium-magnetite concentrates. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2010, no. 4, pp. 12–15. (In Russ.).
6. Bigeev V.A., Panteleev A.V., Chernyaev A.A. Mathematical modeling of solid-phase reduction of ashes and slimes. In: *Aktual'nye problemy sovremennoi nauki, tekhniki i obrazovaniya: Materialy 69-i nauchno-prakticheskoi konferentsii* [Actual issues of modern science, techniques and education: Proceedings of 69th Scientific and Practical Conference]. Magnitogorsk: MGTU, 2011, vol. 1, pp. 132–135. (In Russ.).
7. Nobuhiko T., Hatanaka A., Kaku H., Kurihara K., Saitoh G. Development of iron-making Technology. *Nippon Steel Technical Report*. 2012, no. 101, pp. 79–88.
8. Sinyarev G.B., Vatin N.A., Trusov B.G. *Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov* [Usage of computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes]. Moscow: Nauka, 1982, 32 p. (In Russ.).
9. Rybenko I.A. *Razrabotka metodiki i sistemy rascheta variantov tekhnologii nepreryvnogo polucheniya metalla v agregatakh struino-emul'sionnogo tipa: Avtoref. dis. kand. tekhn. nauk*. [Development of the methods and calculation system of the variants of continuous metal obtaining technology in the units of a jet-emulsion type. Extended Abstract of Cand. Sci. Diss.]. Novokuznetsk, 2000, 16 p. (In Russ.).
10. Dmitrienko V.I., Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Rybenko I.A. Thermodynamical estimation of steel alloying possibilities while vanadium slag treatment. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2010, no. 10, pp. 17–20. (In Russ.).
11. Baikov A.A. *Sbornik trudov* [Collected papers]. Moscow: AN SSSR, 1948, vol. 2, pp. 531–546. (In Russ.).
12. Khodosov I.E., Nokhrina O.I. Research of solid-phase iron reduction with Kuzbass coals. In: *Metallurgiya: tekhnologii, upravlenie, innovatsii, kachestvo. Trudy XVIII Vserossiiskoi nauchno-prakticheskoi konferentsii* [Metallurgy: technology, management, innovation, quality. Proceedings of 18th All-Russian Scientific Conference]. Novokuznetsk: SibGIU, 2014, pp. 203–207. (In Russ.).
13. Dinel't V.M., Anikin A.E., Strakhov V.M. Reduction of iron ore by means of lignite semicoke. *Coke and Chemistry*. 2011, vol. 54, no. 5, pp. 165–168.
14. 14. Amdur A.M., Potapov A.M., Raznitsina A.L., Lkhamsuren M. Reduction kinetics of iron-ore concentrates with coal. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2012, no. 8, pp. 17–20. (In Russ.).

15. Ying Yi Zhang, Yuan Hong Qi, Zong Shu Zou, Yun Gang Li. Development Prospect of Rotary Hearth Furnace Process in China. *Advanced Materials Research*. 2013, vol. 746, pp. 533–553.
16. Nokhrina O.I., Khodosov I.E. Usage of coal at the reduction of iron in a solid phase. In: *Innovatsii v materialovedenii i metallurgii. Materialy IV Mezhdunarodnoi interaktivnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii* [Innovations in material science and metallurgy. Proceedings of 4th International Interactive Scientific Conference]. Ekaterinburg: izd. UrFU, 2015, pp. 32–37. (In Russ.).

Acknowledgements. The work was performed as part of public task in the field of scientific activities of the Ministry of Education of the Russian Federation.

Information about the authors:

Nokhrina O.I., Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair of Ferrous Metallurgy (kafamsf@sibsiu.ru)

Rozhikhina I.D., Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair of Ferrous Metallurgy

Rybenko I.A., Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair of Applied Information Technology and Programming (rybenkoi@rambler.ru)

Khodosov I.E., Head of the Laboratory of the Chair of Ferrous Metallurgy (khodo-sov@mail.ru)

Received March 13, 2015
