

Рис. 5. Эвристическое выделение прямоугольных областей состава для заданных свойств

## Выводы

Представлен графический метод выделения прямоугольных областей состава для получения заданного диапазона свойств. Разработано программное средство, представляющее конечному пользователю сервис для выделения и последовательного уточнения областей состава доменных шлаков, обеспечивающие требуемые свойства.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Белькова А.И., Крупий В.Г., Цымбал Г.Л. Влияние магнезии и основности агломерата на его металлургические свойства и химический состав продуктов доменной плавки. //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб. науч. тр. –Киев. Наукова думка. – 2002. –Вып.5. –С.83-89.

пост. 25.05.11

## Моделирование процессов взаимодействия расплавов в восстановительных условиях доменной плавки

ТОГОБИЦКАЯ Д.Н., БЕЛЬКОВА А.И., ГРИНЬКО А.Ю.

Украина, Институт черной металлургии НАН Украины

Изложены принципы и результаты физико-химического и математического моделирования свойств металлургических расплавов и процессов их взаимодействия для восстановительных условий доменной плавки с использованием параметров межатомного взаимодействия в расплавах.

Викладені принципи та результати фізико-хімічного і математичного моделювання властивостей металургійних розплавів і процесів їх взаємодії для відновлювальних умов доменної плавки з використанням параметрів міжатомної взаємодії в розплавах.

Principles and results of physical and chemical and mathematical modelling of properties metallurgical melts and interaction processes between them for regenerative conditions of domain fusion with use of parameters of inter-nuclear interaction in melts are presented.

**Состояние вопроса.** Эффективность использования задач повышения качества выплавляемого чугуна определяется наличием устойчивых корректных моделей, связывающих показатели конечных продуктов плавки с рядом технологических и термодинамических факт автоматизированных систем управления при решении оров процесса.

Несмотря на огромное количество представленных в литературе разработанных математических моделей, алгоритмов и программных комплексов для решения технологических задач в области доменного производства, сохраняют свою актуальность вопросы совершенствования аналитического описания процессов формирования и взаимодействия металлургических расплавов на основе состоятельных прогнозных моделей, которые можно было бы использовать в промышленных условиях с целью их оперативного анализа и управления.

В частности, к настоящему времени в вопросах прогнозирования свойств шлаковых расплавов накоплен большой объем экспериментальной информации, имеются различные их модели (идеального, регулярно, субрегулярного, ассоциированного и т.д.) разного уровня сложности с той или иной степенью точности обобщающие эти данные. Недостатком большинства прогнозных уравнений является их применимость для узкой область составов. При сопоставлении экспериментальных данных, полученных по различным методикам и в различных условиях, зачастую обнаруживаются значительные расхождения не только в величине конкретного свойства, но и в характере зависимости этого свойства от состава.

В вопросах взаимодействия в системе «чугун-шлак» большинство отечественных и зарубежных исследований связаны с использованием зависимостей

компонентов чугуна и шлака в равновесных условиях (Г.Шенк, В. Венцель, Н.Л. Гольдштейн, А.М. Рамм, В.Г. Воскобойников, И.С. Куликов и др.). Представленные в ряде работ уравнения для определения содержания серы и кремния в чугуне (и их коэффициентов распределения) для реальных процессов разработаны для конкретных условий, что ограничивает их применение в современных условиях плавки.

В работе представлены принципы и результаты физико-химического и математического моделирования свойств металлургических расплавов и процессов их взаимодействия для восстановительных условий доменной плавки с использованием параметров межатомного взаимодействия в расплавах. нетрадиционный подход к решению задач управления качеством

**Изложение основных материалов исследования.** В Институте черной металлургии моделирование процессов взаимодействия в системе «чугун-шлак» осуществляется с использованием методики физико-химического моделирования состава и свойств металлургических расплавов [1] (рис.1) с позиций кооперативного ионообменного процесса, учитывающего роль и влияние параметров межатомного взаимодействия [2].

Определенные наработки в этом направлении реализованы в разработанной и развивающейся в ИЧМ автоматизированной системе «Шлак», [3], в которой использован чугун, основанный на прогнозировании состава и свойств продуктов плавки и стабилизации свойств конечного шлака в пределах, обеспечивающих

получение чугуна требуемого состава с минимальными энергетическими и сырьевыми затратами.

Для контроля и оптимизации шлакового режима в системе используется комплекс физико-химических и математических моделей, включающий:

- модель металлического и шлакового расплавов для расчета интегральных параметров - химических эквивалентов состава чугуна  $Z^Y$  и шлака  $\Delta e$ , а также показателя стехиометрии шлака  $\rho$  (аналог основности);
- прогнозные модели для расчета комплекса свойств первичных и конечных шлаков в виде Свойство =  $f(\Delta e, \rho)$ : вязкости ( $\eta$ , Па·с) и поверхностного натяжения ( $\sigma$ , мН/м) при заданной температуре, теплосодержания (энтальпии) при температуре хорошей текучести, соответствующей вязкости 0,3 Па·с ( $\Delta H$ , кДж/кг), серопоглолительной способности, температур начала и конца кристаллизации (ликвидус, Тл, и солидус, Тс, °С), равновесного коэффициента распределения серы и степени отклонения системы «металл-шлак» от равновесия; прогнозные модели для расчета коэффициентов межфазного распределения элементов (серы, кремния, марганца, железа) между продуктами плавки в виде уравнений:  $L_3 = f(\text{параметры шихты}) + f(\text{параметры технологии})$  с использованием показателей шихты ( $\rho$ ,  $\Delta e$ , содержание  $Fe_2O_3$ ) и показателей технологии (рудная нагрузка, степень использования CO, теоретическая температура горения, длина фурменной зоны).



Рис. 1. Принципы физико-химического моделирования металлургических процессов и расплавов

Прогнозирование свойств расплавов осуществляется с учетом межатомного взаимодействия в системе с помощью интегральных показателей, описывающих химическое и структурное состояние металлического и шлакового расплавов, использование которых позволя-

ет с единых физико-химических позиций обобщать экспериментальные данные различных исследователей.

Основными интегральными параметрами модели шлакового расплава являются: показатель стехиометрии  $\rho$ , определяемый отношением числа катионов  $K (Fe, Cr,$

$Al, Si, Mn, \dots$ ) к числу анионов  $A$  ( $O, S, F, \dots$ ), параметр  $\Delta e$ , характеризующий взаимодействие в связи катион-анион, среднестатистическое межъядерное расстояние  $d$  и показатель индивидуальности катионной подрешетки расплава  $tg\alpha$ , а также средневзвешенные заряды и радиусы катионов в подсистеме  $K$ , анионов в подсистеме  $A$ , а также в направлении связи  $K-A$  и  $A-K$  [1].

Параметр  $\Delta e$  рассчитывается как среднестатистическое количество электронов, локализуемых в направлении связи катион-анион для шлакового расплава, приведенного к виду  $K_pO$ :

$$\Delta e_{uw} = \sum_{i=1}^n m_{a_i} \sum_{j=1}^m m_{k_j} \Delta e_{K_j-A_i},$$

здесь индексы  $K$  и  $A$  указывают на связь катиона  $K$  и аниона  $A$ ,  $m$  - количество катионов,  $n$  - количество анионов,  $m_{k_i}, m_{a_i}$  - соответственно их атомные доли.

Значения средневзвешенных зарядов и радиусов катионов в подсистеме  $K$ , анионов в подсистеме  $A$ , а также в направлении связи  $K-A$  и  $A-K$  рассчитываются по формулам:

$$Z_{K(K-A)} = \sum_{i=1}^m m_{k_i} \sum_{j=1}^n m_{a_j} Z_{K_i-A_j};$$

$$Z_{K(K-K)} = \sum_{i=1}^m m_{k_i} \sum_{j=1}^m m_{k_j} Z_{K_i-K_j};$$

$$Z_{A(K-A)} = \sum_{i=1}^m m_{a_i} \sum_{j=1}^n m_{a_j} Z_{A_i-K_j};$$

$$Z_{A(A-A)} = \sum_{i=1}^m m_{a_i} \sum_{j=1}^n m_{a_j} Z_{A_i-A_j}$$

Основными параметрами физико-химической модели электронной структуры металлических расплавов являются эффективные заряды компонентов ( $Z_i$ ), определяемые для каждой пары реагентов ( $Z_{i,j}$ ) и для всей системы в виде среднестатистического значения ( $Z_{i,sp}$ ), Интегральными характеристиками электронной структуры расплава являются ее химический эквивалент ( $Z^Y$ ), суммирующий данные о зарядах компонентов с учетом вероятностей образования связей разного типа, и структурный параметр ( $d$ ), характеризующий среднестатистическое расстояние между атомами. Интегральный параметр  $Z^Y$  для металлической фазы, по физическому смыслу аналогичен параметру  $\Delta e$  и рассчитывается как средневзвешенное число электронов между ионами  $K_i$  и  $K_j$ :

$$Z^Y = \sum_{i=1}^m \frac{\lg Ru_i^0 - \lg a/2}{tg\alpha_i} n_i + 2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \Delta e_{ij} n_i n_j,$$

где индексы  $i, j$  указывают на парную связь катионов  $i$  и  $j$  при длине связи "а", а  $n_i, n_j$  - их атомные проценты в расплаве,  $Ru_i^0$  - неполяризованный ионный радиус атома для каждого элемента.

Расчет интегральных параметров чугуна и шлака осуществляется по исходному химическому составу системы с помощью систем «Шлак», «Металл».

Использование модельных параметров в качестве "свертки" информации о составе позволяет количественно описать влияние состава шлака на его свойства с привлечением современных математических

методов анализа и обобщения больших массивов экспериментальной информации.

Основу информационного обеспечения для моделирования свойств расплавов и процессов их взаимодействия составляют базы фундаментальных экспериментальных данных о свойствах шлаковых расплавов, железорудных материалов, шлакообразующих смесей, о распределении элементов в ходе реальных металлургических процессов (БД «Шлак», «ШОС», «Железорудные материалы», «Металл-Шлак-Газ»), которые созданы и развиваются в ИЧМ в соответствии с основной концепцией формирования банка данных «Металлургия» (БДМет) [4].

Так, на основе экспериментальных данных о свойствах натуральных доменных шлаков, близких по составу к шлакам заводов Украины, разработан комплекс прогнозных моделей для расчета вязкости, поверхностного натяжения, энтальпии, температур начала и конца кристаллизации в зависимости от состава доменных шлаков в виде Свойство =  $f(\Delta e, \rho)$ . Например, вязкость  $\eta$  при любой температуре  $T$  и энтальпия  $\Delta H$  конечного шлака определяются из уравнений:

$$\lg \eta = 191,6 - 562,4 \cdot \rho + 401,9 \cdot \rho^2 + 6,7 \cdot \frac{1000}{T},$$

$$\Delta H = 4425 + 2096\Delta e + 421,7\Delta e^2$$

Зависимости указанных свойств от физико-химических параметров структуры и состава шлаковых расплавов  $\Delta e$  и  $\rho$  ( $\eta_{1500} = f(\rho)$  и  $\Delta H = f(\Delta e)$ ) (Рис.2) имеют экстремальный характер, что позволяет их использовать в качестве критериев стабилизации шлакового режима при решении практических задач оптимизации состава загрузаемой шихты.

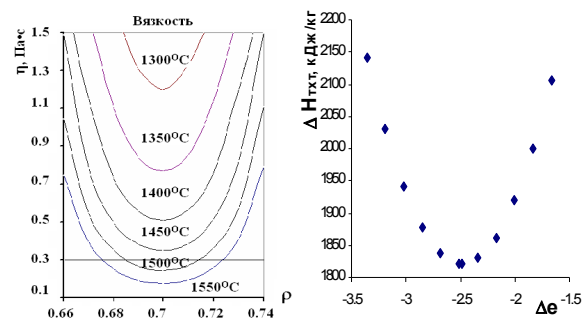


Рис. 2. Прогнозирование свойств доменных шлаков

Состав продуктов доменной плавки формируется в результате фазовых превращений шихтовых материалов в различных зонах печи и зависит от состава и свойств поступающих в горн первичных расплавов. Окончательное же формирование состава чугуна и шлака происходит в нижних зонах доменной печи в результате ионообменного взаимодействия компонент единой жидкостной системы «металл-шлак».

Таким образом, прогнозирование состава конечных продуктов доменной плавки должно осуществляться с учетом сырьевых условий и технологического режима, а также в зависимости от взаимодействия расплавов на конечных стадиях процесса.

Традиционно состав выплавляемого чугуна оценивается с помощью расчетов на заданную основность

шлака при постоянных коэффициентах распределения элементов шихты между продуктами плавки. Такой подход не обеспечивает учет изменения свойств шихты при значительных колебаниях химического состава сырья, а также влияния параметров дутья, что приводит к нарушениям теплового и шлакового режимов.

В системе «Шлак» расчет химического состава чугуна и шлака осуществляется на основе интегральных параметров, характеризующих состав и свойства компонентов загружаемой шихты ( $F_{Ш}$ ) и дутьевого режима ( $F_T$ ), с использованием методики моделирования коэффициентов межфазного распределения элементов  $L_S$  (серы, кремния, марганца и железа) как переменных величин, зависящих от конкретных шихтовых и технологических условий:  $L_S = f(F_{Ш}, F_T)$ . В качестве критериев, характеризующих свойства шихтовых материалов, используются параметры модели шлакового расплава  $\rho$  и  $\Delta e$ , определяющие активность и направленность переходных процессов перераспределения элементов, а в качестве технологических показателей - интегральные показатели дутьевого режима, такие как: теоретическая температура горения  $T_T$  и длина фурменной зоны  $L_{Фз}$ , использование которых позволяет более точно учесть тепловое состояние горна печи, количественно конкретизировать и оценить степень влияния различных факторов плавки на ее качественные показатели.

Оптимальная структура моделей генерируется на основе факторного анализа, позволяющего из представительного выборки данных о составе загружаемой

шихты и показателях технологии выделить группы взаимосвязанных показателей и среди них по факторным нагрузкам определить соответствующие модельные параметры.

Так, например, для условий работы ДП№9 ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог» коэффициенты распределения серы и кремния определяются с учетом показателей шихты  $\rho$  и  $\Delta e$ ,  $Fe_{общ}$  и показателями дутьевого режима  $T_T$  и  $L_{Фз}$ , с точностью прогноза на уровне значения коэффициента корреляции  $R \approx 0,8$ :

$$L_S = 198 + 156\Delta e + 799\rho - 3.15Fe_{общ} - 15.9L_{Фз}$$

$$L_{Si} = 151 - 24.9\Delta e - 265\rho + 0.28Fe_{общ} + 9,2P/K + 78\eta_{CO} + 32L_{Фз}$$

где  $P/K$  – рудная нагрузка,  $\eta_{CO}$  - степень использования  $CO$ .

Полученные модели реализованы в системе «Шлак» (рис.3) и используются для прогнозного расчета химического состава чугуна и шлака. Расчет выполняется на этапе формирования подачи. В случае выхода расчетных показателей – критериев стабилизации шлакового режима  $\rho$  и  $\Delta e$  за пределы «интервалов качества» осуществляется корректировка состава подачи и показателей дутьевого режима для получения оптимальных свойств шлака, обеспечивающих его высокую серопоглотительную способность и требуемое качество чугуна.

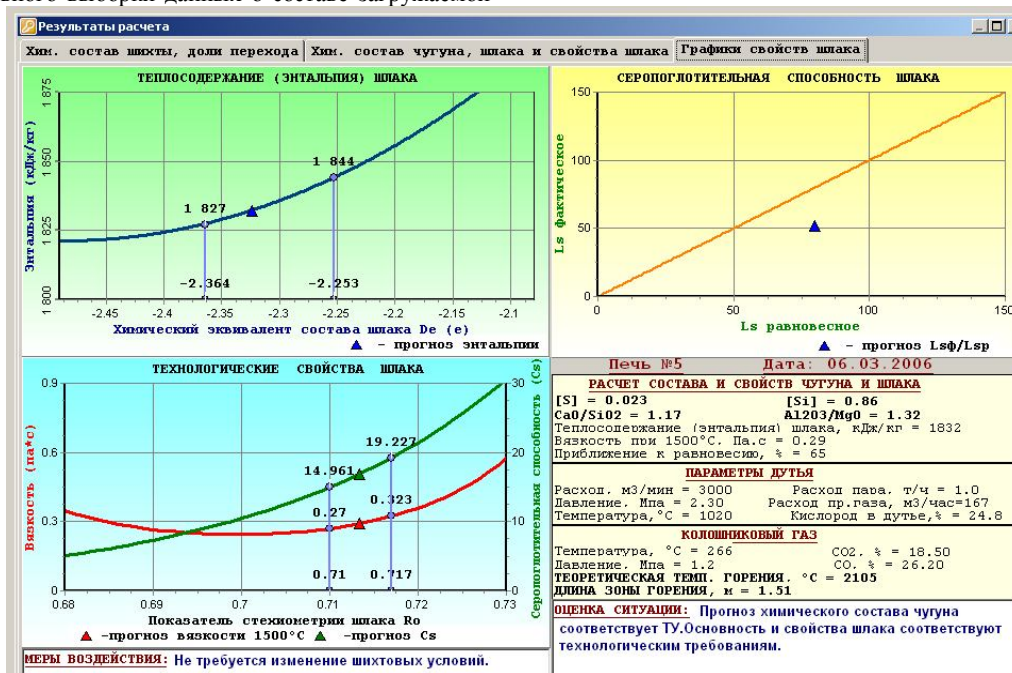


Рис. 3. Видеокادر системы контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки

Поскольку конечный состав чугуна и шлака формируется в процессе взаимодействия расплавов в нижних зонах доменной печи, то при оценке прогнозного расчета следует учитывать термодинамические закономерности, протекающие на границе раздела фаз системы «чугун-шлак».

С этих позиций в системе «Шлак» для проверки адекватности прогноза коэффициентов распределения серы и кремния, рассчитываемых в зависимости от показателей шихты и дутьевого режима, используются аналитические зависимости в виде соотношения  $Z^Y = f(\rho, \Delta e)$ , которое получено в результате расчетно-аналитических исследований представительных масси-

вов показателей продуктов плавки для условий работы различных доменных печей Украины и России. Установленные зависимости свидетельствуют о существенной связи между характеристиками чугуна и шлака (табл.1), которые в интегральном виде учитывают влияние каждого компонента комплексной системы «металл-шлак» на процессы взаимодействия между ними, и характеризуют условия согласования формирующихся в горне доменной печи расплавов.

Таблица 1. Условие согласования расплавов в системе «чугун-шлак» в горне доменной печи

Доменная печь	Уравнение $Z^Y=f(\rho, \Delta e)$
ДП №9 ОАО «Арселор-Миттал Кривой Рог»	$Z^Y=1,17-0,73 \rho/\Delta e$ $R=0,76$
ДП №2 ОАО «Запорожсталь»	$Z^Y=1,31-0,26 \rho/\Delta e$ $R=0,67$
ДП №5 ОАО «Северсталь»	$Z^Y=1,31-0,31 \rho/\Delta e$ $R=0,68$
ДП №1 ОАО «ЗСМК»	$Z^Y=1,36-0,21 \rho/\Delta e$ $R=0,59$

Также для оценки термодинамического состояния системы «чугун-шлак» в системе используется физико-химический критерий в виде соотношения активностей кремния в чугуне и кремнезема в шлаке  $a_{[Si]}/a_{(SiO_2)}$  [5], рассчитываемый с использованием методики определения активностей элементов на основе параметров межатомного взаимодействия в расплавах. В частности, коэффициент активности кремния в чугуне  $f_{[Si]}$  и кремнезема в шлаковом расплаве  $f_{(SiO_2)}$  определяются по следующим прогнозным моделям ( $R=0,98$ ):

$$\lg f_{[Si]} = 1.21 \cdot \left( \rho_{l_{[Si]}} + Z^Y \cdot Z_{0_{[Si]}}^Y \right) - 5.64$$

$$\lg f_{(SiO_2)} = 3,1 \cdot (\rho_{l_{(Si)}} + Z^Y \cdot Z_{0_{(Si)}}^Y) - 18,16$$

$$a_{[Si]} = f_{[Si]} \cdot X_{[Si]},$$

$$a_{(SiO_2)} = f_{(SiO_2)} \cdot X_{(SiO_2)}$$

где  $Z_0^Y$  - зарядовое состояние элемента кремния в расплаве чистого компонента,  $\rho_{l_{Si}}$  - средняя зарядовая плотность кремния в расплаве,  $Z^Y$  - химический эквивалент, суммирующий данные об эффективных зарядах всех компонентов расплава;  $X$  - концентрация кремния или кремнезема в расплаве.

Оптимальные пределы критерия  $a_{[Si]}/a_{(SiO_2)}$ , обеспечивающие требуемый уровень содержания кремния и серы в чугуне, устанавливаются для конкретных условий работы печи. Так, например, для условий работы ДП №9 ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог» изменение указанного соотношения в пределах от 60 до 100 соответствует выпускам чугуна с содержанием серы и кремния:  $0.6 \leq [Si] \leq 0.9$ ,  $[S] \leq 0.03$  (рис. 4)

Использование разработанных физико-химических критериев и моделей в составе системы «Шлак» позволяет контролировать, прогнозировать, а также оптимизировать процесс распределения элементов между продуктами плавки в горне доменной печи, что существенно повышает эффективность системы управления шлаковым режимом доменной плавки.

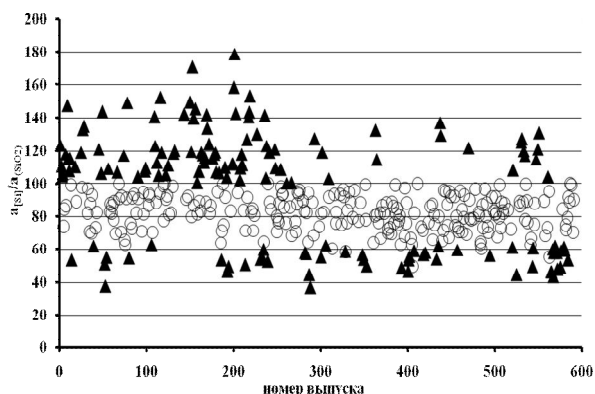


Рис. 4. Значения  $a_{[Si]}/a_{(SiO_2)}$  для выборки выпусков

## Выводы

Исследование процессов формирования и взаимодействия расплавов в восстановительных условиях доменной плавки с использованием развиваемой в ИЧМ НАНУ методологии физико-химического моделирования состава и свойств расплавов позволяет с единых физико-химических позиций обобщать на новом уровне достижения различных подходов к исследованию взаимосвязи между составом, электронной структурой и свойствами соединений, а также описывать результаты ионообменных процессов между реагирующими фазами. Компьютерная реализация и использование в промышленных условиях разработанных физико-химических критериев и моделей, позволяющих оценивать состав и свойства продуктов плавки во взаимосвязи с сырьевыми и технологическими параметрами процесса с учетом межатомного взаимодействия в расплавах, способствует повышению эффективности управления тепловыми процессами и качеством продукции в изменяющихся шихтовых и технологических условиях доменной плавки.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Приходько Э.В. Теоретические основы физико-химических моделей структуры многокомпонентных материалов. / Э.В. Приходько // Изв.АН СССР. Металлы. – 1991. – № 6. – С. 208-214.
2. Тогобицкая Д.Н. Система "металл-шлак" как объект моделирования / Д.Н. Тогобицкая, Э.В. Приходько // Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Киев: Наукова Думка. – 1998. – С. 98-104.
3. Тогобицкая Д.Н. Опыт создания и внедрения системы контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки в шихтовых и технологических условиях заводов Украины / Д.Н.Тогобицкая, А.И.Белькова, А.Ф.Хамхотько, Д.А.Степаненко // Сб.научных трудов ИЧМ «фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». – Днепропетровск – 2009. – Вып. 19. – С. 100-112.
4. Приходько Э.В. Базы теоретических и технологических данных для информационных технологий в металлургии. Черная металлургия России и СНГ в XXI веке / Э.В. Приходько, Д.Н.Тогобицкая // Сб. трудов международной конференции. Изд. Металлургия. 1994. – С. 178-180.

5. Гринько А. Ю. Разработка критерия оценки термодинамического состояния системы «чугун-шлак» / А.Ю. Гринько, Д. Н. Тогобицкая, А. И. Белькова // Системні технології. Міжрегіональний

міжвузівський збірник наукових праць. – Дніпропетровськ. – 2010. – Вип. 3(68). - С. 79-83.

пост. 25.05.11