

Информационное обеспечение исследования процессов взаимодействия в системе «металл-шлак» в горне доменной печи

БЕЛЬКОВА А.И.

Украина, Институт черной металлургии НАН Украины

Изложены принципы создания информационного обеспечения для исследования и описания процессов взаимодействия металлического и шлакового расплавов в горне доменной печи на основе физико-химического моделирования структуры и свойств металлургических расплавов и накопленных в базах фундаментальных физико-химических и технологических данных.

Викладені принципи створення інформаційного забезпечення для дослідження та опису процесів взаємодії металевого і шлакового розплавів у горні доменної печі на основі фізико-хімічного моделювання структури та властивостей металургійних розплавів з використанням баз фундаментальних фізико-хімічних і технологічних даних.

Principles of creation of a supply with information for research and the description of processes of interaction metal and slag melts in blast-furnace well on the basis of physical and chemical modelling of structure and properties metallurgical melts with using of bases of fundamental physical and chemical technological data are presented.

Состояние вопроса. Проблема обобщения накопленных экспериментальных для описания процессов формирования и взаимодействия металлургических расплавов, создание на их основе состоятельных прогнозных моделей с целью их промышленного использования является в настоящее время актуальной и сложной задачей.

Традиционно используемый для этих целей термодинамический аппарат, на использовании которого базируется теория металлургических процессов, имеет ограниченные возможности при описании реальных процессов. В металлургических агрегатах равновесие практически не достигается, а термодинамический подход способен предсказывать только равновесные составы продуктов плавки. Качественное улучшение уровня обобщения опытных данных о свойствах соединений в отсутствии единой теоретической основы для количественных расчетов связано с пересмотром представлений о структуре металлургических расплавов и физико-химической сущности процессов их взаимодействия.

В Институте черной металлургии в качестве методологической основы описания процессов взаимодействия металлической и шлаковой фаз при выплавке чугуна используется методика физико-химического моделирования состава и свойств металлургических расплавов, разработанная д.т.н. Э.В. Приходько [1], а также опыт создания и внедрения информационно-аналитических систем прогнозирования и управления [2].

Принципы физико-химического моделирования металлургических систем. Описание взаимодействия в системе "металл-шлак" с позиций кооперативного ионообменного процесса, а также рассмотрение взаимодействия каждого компонента расплава с системой в целом, а не с отдельными её составляющими, закладывает единую теоретическую основу для обобщения достижений различных подходов к исследованию взаимосвязи между составом, электронной структурой и свойствами соединений. Нарботанный опыт и результаты исследований в этом направлении реализованы в составе информационно-аналитической системы "Расплав" (рис.1), разработанной под руководством

д.т.н. Д.Н. Тогобицкой. Система в качестве основных составляющих включает в себя базы экспериментальных и технологических данных о свойствах расплавов и результатах их взаимодействия, большой фонд математических, термодинамических и физико-химических моделей процессов доменного, сталеплавильного производства, а также программные средства комплексного анализа физико-химической информации, методы оценки достоверности экспериментальных данных и работоспособности моделей разного уровня [3-4].

Особое внимание уделяется доводке фундаментальных теоретических разработок до их программной реализации и внедрения в производство.

Так, для контроля и оптимизации качества чугуна в промышленных условиях разработана автоматизированная система контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки, в которой прогнозирование состава и свойств продуктов плавки осуществляется на основе интегральных параметров, характеризующих состав и свойства компонентов загружаемой шихты и дутьевого режима. Окончательное формирование состава чугуна и шлака происходит в нижних зонах доменной печи в результате ионообменного взаимодействия компонент единой жидкостной системы «металл-шлак». Завершенность процессов взаимодействия принято оценивать с помощью коэффициентов межфазного распределения элементов, в частности серы и кремния, конкретные величины которых оценивают с помощью различного рода зависимостей и соотношений. Поскольку эти зависимости характеризуют определенные условия работы доменной печи, использовать их в иных условиях без определенных доработок не представляется возможным.

Информационной основой исследований процессов взаимодействия в системе «металл-шлак» является база фундаментальных экспериментальных и технологических данных о распределении элементов в ходе реальных металлургических процессов "Металл-Шлак-Газ", а также методология моделирования состава и свойств металлургических расплавов с учетом параметров межатомного взаимодействия в расплавах [5].

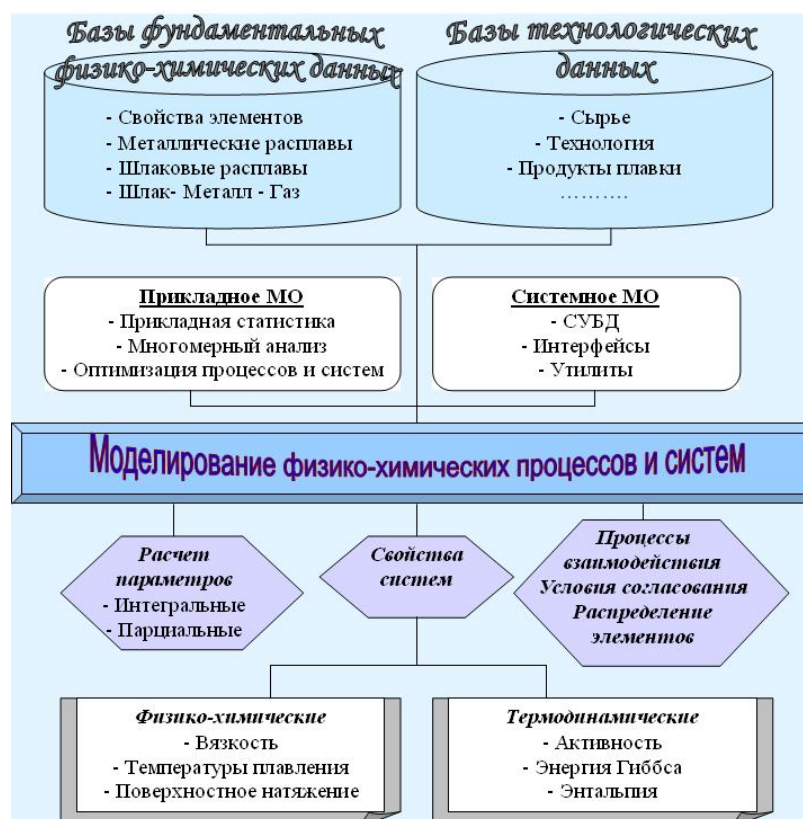


Рис. 1. Структурная схема информационно-аналитической системы «РАСПЛАВ»

В соответствии с методикой физико-химического моделирования металлические, оксидные и солевые расплавы рассматриваются как химически единые системы, изменение состава которых сказывается на всех свойствах через изменение параметров электронной структуры. Прогнозирование свойств расплавов осуществляется с использованием интегральных параметров чугуна и шлака, описывающих их химическое и структурное состояние.

Основными параметрами физико-химической модели электронной структуры металлических расплавов [1] являются эффективные заряды компонентов (Z_i), определяемые для каждой пары реагентов ($Z_{i,j}$), и для всей системы - среднестатистические значения ($Z_{i,ср}$), характеризующие зарядовое состояние каждого из компонентов в расплаве. Интегральными характеристиками электронной структуры расплава как химически единой системы 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.

Интегральными параметрами модели шлакового расплава являются: показатель стехиометрии ρ , определяемый отношением числа катионов K ($Fe, Cr, Al, Si, Mn, \dots$) к числу анионов A (O, S, F, \dots) в 100 г расплава; параметр Δe , 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 Δe рассчитывается как среднестатистическое количество электронов, локализуемых в направлении связи катион-анион для шлакового расплава. Интегральный параметр Z^Y для металлической фазы по физическому смыслу аналогичен параметру Δe и рассчитывается как средневзвешенное число электронов между ионами Me_i и Me_j .

На основании анализа реальных металлургических систем было установлено, что распределение компонентов между металлом и шлаком определяется двумя группами факторов: свойствами среды, выраженными через интегральные параметры (Z^Y для металла, Δe и ρ для шлака), и локальным окружением каждого из компонентов Θ , которое определяется средневзвешенным значением его эффективного заряда (Z^3). Изменение состояния каждого из компонентов при переходе из одной фазы в другую может быть определено как "перезарядка" ионов диффундирующего элемента ΔZ^3 , равного разности зарядов элемента в металле [Z^3_m] и шлаке ($Z^3_{ш}$): $\Delta Z^3 = [Z^3_m] - (Z^3_{ш})$.

Использование модельных параметров в качестве «свертки» информации о составе позволяет количественно описать взаимное влияние компонентов чугуна и шлака с привлечением современных математических методов анализа и обобщения больших массивов экспериментальной информации в форме, удобной для решения задач прогнозирования свойств многокомпонентных систем и результатов их взаимодействия.

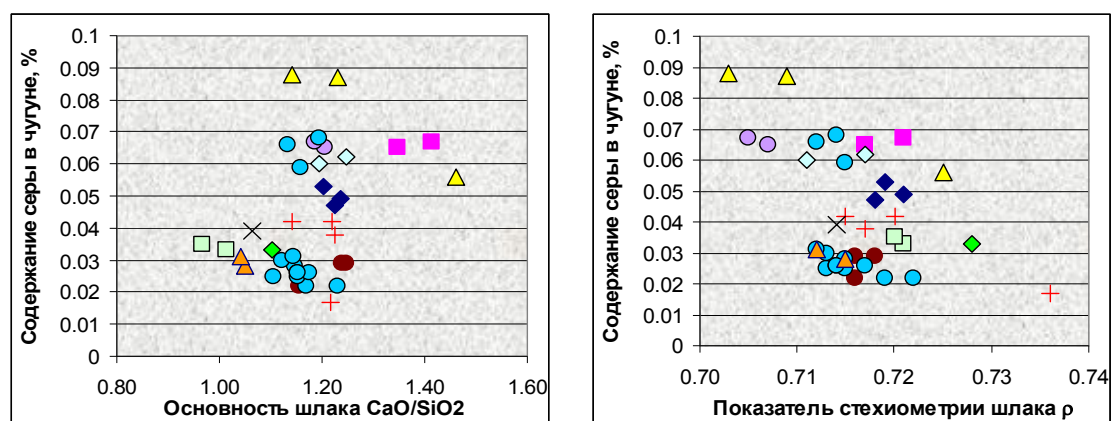
Средства информационного обеспечения. В соответствии с основной концепцией формирования банка данных «Металлургия» (БДМет) [6] была разра-

Таблица 1. Химический состав чугуна и шлака доменных печей мира по данным работы [7]

№	Состав чугуна, вес.%					Состав шлака, вес.%							CaO/	Ls	Lsi
	C	Si	Mn	P	S	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	MnO	FeO	S	SiO ₂		
1	3.83	0.39	1.07	1.92	0.053	34.6	11.5	41.7	6.7	1.69	0.54	1.23	1.20	23.2	88.7
2	3.72	0.38	1.12	1.97	0.047	33.7	12.3	41.3	6.1	1.56	0.57	1.47	1.22	31.2	88.8
3	3.75	0.4	1.13	1.97	0.049	33.1	13.3	40.9	6.5	1.78	0.48	1.69	1.24	34.4	82.7
4	3.3	0.32	0.54	2.07	0.067	32.4	14.8	45.8	3.9	0.45	0.45	1.17	1.41	17.4	101
5	3.18	0.4	0.52	1.97	0.065	32.5	15.5	43.8	3.9	0.57	0.63	1	1.35	15.3	81.3
6	4.5	0.73	0.89	0.15	0.028	38.4	7.9	40.3	10.1	0.99	0.49	0.84	1.05	30.0	52.6
7	4.6	0.75	0.84	0.15	0.031	38.7	8	40.3	9.4	0.90	0.57	0.87	1.04	28.0	51.6
8	4.44	0.65	1.24	0.15	0.039	36.4	11.2	38.7	9.3	1.30	0.51	1.34	1.06	34.3	56.0

Таблица 2. Модельные параметры чугуна и шлака, соответствующие составам таблицы 1

№	Параметры чугуна				Параметры шлака					Параметры перезарядки	
	d, 10 ⁻¹ м	Z ^Y	Z _[Si]	Z _[S]	d, 10 ⁻¹ нм	Δe, e	ρ	Z _(Si)	Z _(S)	ΔZ _{Si}	ΔZ _S
1	2.394	1.429	-1.191	0.072	2.855	-2.386	0.719	-2.456	1.186	-1.265	1.114
2	2.402	1.427	-1.205	0.059	2.841	-2.339	0.718	-2.438	1.200	-1.233	1.141
3	2.400	1.428	-1.201	0.062	2.850	-2.342	0.721	-2.451	1.182	-1.250	1.120
4	2.429	1.403	-1.255	0.014	2.732	-2.008	0.721	-2.284	1.313	-1.029	1.299
5	2.438	1.398	-1.270	0.000	2.743	-2.065	0.717	-2.301	1.304	-1.031	1.304
6	2.348	1.414	-1.103	0.153	2.907	-2.589	0.715	-2.526	1.124	-1.423	0.971
7	2.341	1.416	-1.091	0.164	2.898	-2.578	0.712	-2.514	1.141	-1.423	0.977
8	2.354	1.416	-1.116	0.141	2.899	-2.538	0.714	-2.516	1.127	-1.400	0.986

Рис. 3. Влияние основности CaO/SiO₂ и показателя стехиометрии шлака ρ на содержание серы в чугуне по данным 25 металлургических предприятий мира

Влияние параметра перезарядки ΔZ тем выше, чем больше отклонение системы от равновесия. Так, в случае расчета коэффициента распределения кремния L_{Si} влияние параметра перезарядки ΔZ существеннее, чем при описании коэффициента распреде-

ления серы, что свидетельствует о том, что по кремнию система «металл-шлак» находится дальше от равновесия, чем по сере. Таким образом, можно предположить, что параметр ΔZ является индикатором отклонения системы от равновесия.

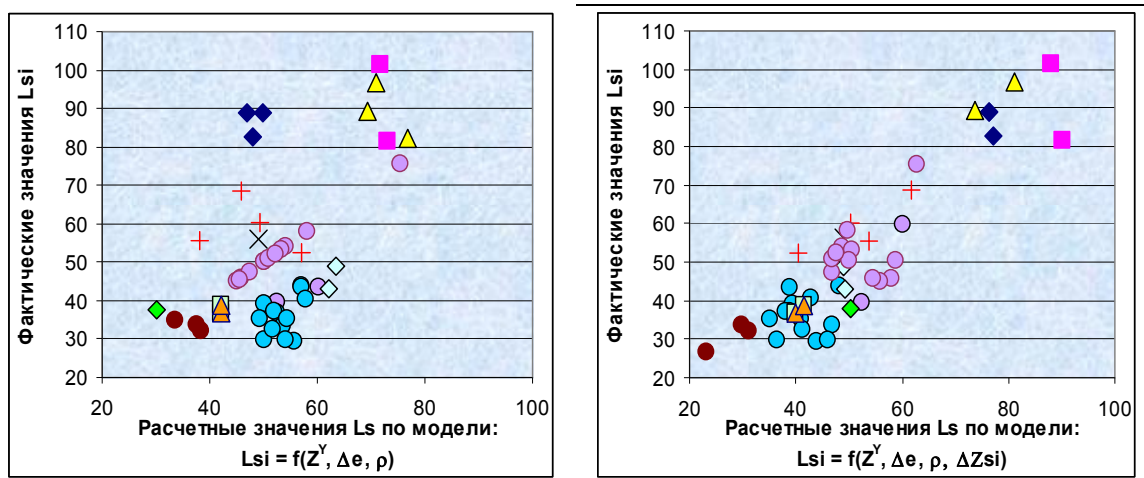


Рис. 4. Соотношение между экспериментальными и рассчитанными значениями коэффициента распределения кремния L_{Si} между чугуном и шлаком по данным 25 металлургических предприятий мира

Выводы

Таким образом, создание баз экспериментальных данных является необходимым условием в научно-информационном обеспечении исследований металлургических процессов. Информационной основой исследований процессов взаимодействия в системе «металл-шлак» является база данных «Металл-шлак-газ», непрерывная актуализация которой наряду с использованием методологии физико-химического моделирования состава и свойств расплавов обеспечивает обобщение на новом уровне существующих подходов и разработки новых критериев и зависимостей для описания согласованного формирования расплавов в горне доменной печи, что позволит эффективнее прогнозировать и оптимизировать процессы распределения в системе «металл-шлак» с целью получения чугуна требуемого состава.

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. 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.
3. 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.
4. Жмойдин Г.И. О паспортизации экспериментальных материалов для банка данных "Металлургия" / Г.И. Жмойдин, Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая [и др.] // Изв. АН СССР. Металлы. – 1988. – № 8. – С. 136-139.
5. 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.
6. Тогобицкая Д.Н., Григянец Р.Б. Системное, прикладное и проблемное математическое обеспечение банка данных "Металлургия" / Д.Н. Тогобицкая, З.Б. Григянец // Изв. АН СССР. Металлургия. – 1991. – № 4. – С. 210-215.
7. фон Клитцинг А. Поведение кремния в доменных печах / фон Клитцинг А. // Черные металлы. – 1966. – № 16. – С.65-75.

пост. 19.05.2010