

## Комп'ютерна система для дослідження впливу мікрогетерогенності на властивості металургійних шлаків

СТЕПАНЕНКО Д.О., ТОГОБИЦЬКА Д.М., ХАМХОТЬКО А.Ф., КАЛАШНИКОВА Т.О.

Україна, Інститут чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України (ІЧМ НАНУ)

На основі бази вискозіметричних даних металургійних шлаків та розробленої комп'ютерної системи «РКЗ-1» проведено оцінку переходу шлакових розплавів з гомогенного стану в гетерогенний, що включає визначення температурного інтервалу затвердіння розплавів, енергії активації в'язкого плинину на різних етапах, кількості твердої фази, що виділяється, у процесі кристалізації, максимальної лінійної швидкості кристалізації й відповідної температури. Розглянуто вплив кристалізаційної здатності металургійних шлаків на їх технологічні властивості.

На основе базы вискозиметрических данных металлургических шлаков и разработанной компьютерной системы «РКС-1» произведена оценка перехода шлаковых расплавов из гомогенного состояния в гетерогенное, включающая определение температурного интервала затвердевания расплавов, энергии активации вязкого течения на различных этапах, количества выделяющейся твердой фазы в процессе кристаллизации, максимальной линейной скорости кристаллизации и соответствующей температуры. Рассмотрено влияние кристаллизационной способности металлургических шлаков на их технологические свойства.

On the basis of a database about viscosity of metallurgical slags and developed computer system "CAC-1" the estimation of transition of the fused slags from a homogeneous condition in heterogeneous, including definition of a temperature interval of hardening, energy of activation of a viscous current at various stages, quantities of an allocated firm phase in the course of crystallisation, the maximum linear speed of crystallisation and the corresponding temperature is made. Influence of ability of metallurgical slags is considered to crystallise on their technological properties.

**Вступ та постановка задачі.** В сучасних умовах розвитку металургійного виробництва найефективнішими є такі наукові розробки, які об'єднують високу економічну ефективність з сучасним рівнем комп'ютеризації управління технологічними процесами на принципах все більш глибокого розуміння їх фізико-хімічної суті.

В існуючих процесах виробництва металу і в тих, що розвиваються, особливо важлива роль відводиться формуванню оптимального складу і фізико-хімічних властивостей шлаку, що утворюється в металургійних агрегатах з відповідних шихтових матеріалів, як у відновлювальних, так і в окислювальних умовах.

В чорній металургії рідкий метал в процесі його виплавки і на всіх стадіях його переділу безперервно знаходиться у контакті зі шлаком і взаємодіє з ним. Склад шлаку, його температура плавлення ( $T_n$ ), в'язкість ( $\eta$ ), сірко поглинаюча здатність ( $C_s$ ) та інші фізико-хімічні властивості шлаку, які визначаються його структурою, значною мірою впливають на якість металу, що виплавляється, стабільність технологічного процесу плавки, а також на енергетичні витрати процесу.

В той же час металургійний шлак, крім своїх першорядних задач, що він виконує в процесі виробництва металу, є багатим сировинним джерелом для отримання будівельних матеріалів де його фізико-хімічні властивості визначають якість виготовленого матеріалу. Так, наприклад, з доменних шлаків можна одержати бутовий камінь, щебінь для бетону і дорожнього будівництва, дорожню брусчатку, напівфабрикат для цементної промисловості і для виготовлення звичайного і активованого шлакобетону, а також інші дешеві і високоякісні будівельні матеріали (шлакоситали) [1].

У зв'язку з цим дуже важливою задачею в теорії і практиці металургії є вивчення фізико-хімічних властивостей шлаків, зокрема кристалізаційної здатності і чинників, які впливають на неї. Знання про кристалізаційну здатність металургійних шлаків дозволять поліп-

шити якість металу і удосконалити технології його виробництва, а також розширити область подальшого застосування шлаку в інших галузях промисловості.

**Викладення основних матеріалів дослідження.** Вирішення поставленої задачі пропонується на основі створеної в Інституті чорної металургії НАН України (ІЧМ НАНУ) в рамках міжгалузевого банку даних «Металургія» бази експериментальних фізико-хімічних даних про властивості шлакових та оксидних розплавів «Шлак» [2, 3], яка слугує інформаційною основою при дослідженні кристалізаційної здатності металургійних шлаків на підставі даних про в'язкість шлаків.

В даний час в базу «Шлак» введено понад 300 документів, що містять відомості про властивості більш 8000 складів оксидних систем. З них більш 5000 складів з даними про в'язкість при різних температурах, більш 3000 складів з даними про температури кристалізації, плавлення і т.д., близько 600 складів з даними про поверхневий натяг при різних температурах, більш 350 складів з даними про електропровідність, більш 350 складів з даними про густину при різних температурах, 35 складів з даними про летючість компонентів шлакових розплавів. По хімічному складу і призначенню представлено шлаки практично всіх систем, що використовуються в чорній металургії, враховані еталонні результати основних шкіл вітчизняних і зарубіжних авторів. Крім перерахованих вище даних база «Шлак» містить інформацію про мінералогічний склад різних оксидних систем, в тому числі металургійних шлаків, а також данні про фізико-хімічні властивості мінералів притаманних металургійним шлакам та діаграми стану різних оксидних систем.

На першому етапі створення бази даних «Шлак» в цілях автоматизованої обробки даних був розроблений паспорт експериментальних даних (ПЕД) [4], який забезпечує зберігання даних на машинних носіях за принципом повного тексту.

Особливий інтерес для фахівців представляють одержані в ІЧМ НАН України і введені в базу неопубліковані дані. Стосовно гарячої обробки металів тиском – це дані про властивості скломашувальних і захисно-змащувальних покриттів, що синтезовані з традиційних сировинних матеріалів і одержані на основі природних мінералів. Стосовно безперервного розливання сталі – це дані досліджень властивостей синтетичних шлаків.

В цілому фахівці-металурги знайдуть в базі даних інформацію про властивості шлаків різного призначення: доменних, мартенівських, конвертерних, рафінувальних для позапічної обробки чавуну і сталі, феросплавного виробництва, для розливання сталі та ін. База даних позбавляє дослідника від необхідності проводити тривалі, трудомісткі і дорогі експерименти, прискорює пошук необхідної інформації, а також дозволяє провести шляхом обчислювального експерименту вибір складів оксидних матеріалів з необхідним рівнем властивостей в необхідному температурному інтервалі.

Включення бази в систему інформаційного забезпечення задач вибору оптимальних по складу шлаків забезпечує їй ряд переваг перед традиційними фактографічними базами даних. База містить паспортизовані чисельні дані, що не піддавалися попереднім математичним обробкам (згладжуванням), щоб виключити спотворення, обумовлені обмеженістю теоретичних уявлень і недоліками концептуального і математичного апарату.

Для ведення бази даних була створена інформаційно-пошукова система (ІПС), що забезпечує автоматизацію підготовки, введення і корегування даних, пошук і логіко-синтаксичний контроль вхідної інформації. Для швидкого доступу до будь-якого документу бази автоматично будується індексний файл, що містить інформацію про місцезположення відповідних характеристик в документах [5].

Для збереження логічної цілісності інформаційного матеріалу, представленого у вигляді статті, довідкових видань і неопублікованих експериментальних даних, забезпечені системні засоби введення і організа-

ції даних, що містять різнотипні по структурі фактографічні частини, цілком в одну базу.

Також в системі передбачена автоіндексація по текстовим полям документу або будь-якої їх складової частини. Діалогові засоби комплексного перегляду інформації в базі забезпечують її перегляд відповідно до структури як в об'ємі всіх полів бази, так і будь-якого його зрізання по ланцюжку: схема → запит → документ.

Спеціальні програмні засоби забезпечують скануючий пошук інформації за будь-якою вказаною ознакою або їх комбінацією. ІПС може підтримувати будь-яку кількість баз, об'єм яких забезпечується можливостями ЕОМ.

Основними параметрами, що характеризують кристалізаційну здатність металургійних шлаків є: температура ліквідус ( $T_L$ , °C); температура солідус ( $T_C$ , °C); енергія активації в'язкого плинину ( $E\eta$ , кДж/моль); кількості мікрогетерогенної твердої фази ( $\varphi_{mv}$ , об.%); максимальна лінійна швидкості кристалізації ( $V_{max}$ , мкм/хв.) і температури при якій вона досягається ( $T_{V_{max}}$ , К). Розрахунок параметрів кристалізаційної здатності здійснюється за допомогою програмно реалізованого алгоритму у вигляді комп'ютерної системи «РКЗ-1» [5, 6] на підставі експериментальних вискозіметричних даних бази даних «Шлак» та модельних параметрів структури шлаку  $\Delta e$  – середньстатистична кількість електронів, що локалізуються на спільних орбіталах у напрямку зв'язку катіон – аніон (виконує функцію хімічного еквіваленту системи) і  $\rho$  – показник стехіометрії системи, що дорівнює відношенню чисел катіонів до числа аніонів [7, 8].

Розглянемо можливість використання вискозіметричних характеристик металургійних шлаків бази експериментальних даних «Шлак» та комп'ютерної системи «РКЗ-1» для розрахунку параметрів кристалізаційної здатності шлаків на прикладі за даними [9] (табл. 1, 2).

Таблиця 1. Хімічний склад металургійних шлаків

№ п/п	Вміст, мас. %							$\frac{CaO}{SiO_2}$	$\Delta e$	$\rho$
	SiO <sub>2</sub>	CaO	MgO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	S			
1	41,74	46,86	3,08	4,83	0,68	1,90	1,10	1,12	-2,4185	0,7028
2	41,57	33,95	9,66	8,08	0,67	2,49	0,62	0,82	-2,8618	0,6941
3	33,06	47,20	6,87	11,8	0,44	0,39	2,55	1,43	-2,1368	0,7345

Таблиця 2. В'язкість металургійних шлаків при заданих значеннях температури

№ п/п	В'язкість	$T, ^\circ C$									
		1600	1550	1500	1450	1400	1350	1300	1280	1250	$T_c, ^\circ C$
1	$\eta_1, Pa \cdot s$	0,16	0,19	0,23	0,27	0,35	0,51	0,73	0,89	1,22	1200
2	$\eta_2, Pa \cdot s$	0,27	0,3	0,34	0,4	0,48	0,62	0,9	1,07	1,52	1156
3	$\eta_3, Pa \cdot s$	0,17	0,2	0,25	0,42	0,69	2,55				1342

На рис. 1 представлено результат розрахунку програми «РКЗ-1» на основі вхідних даних (табл. 1, 2) де зображено графік залежності в'язкості шлаків №№1-

3 (ліворуч) різної основності в координатах  $\eta - T$  у вигляді плавних кривих.

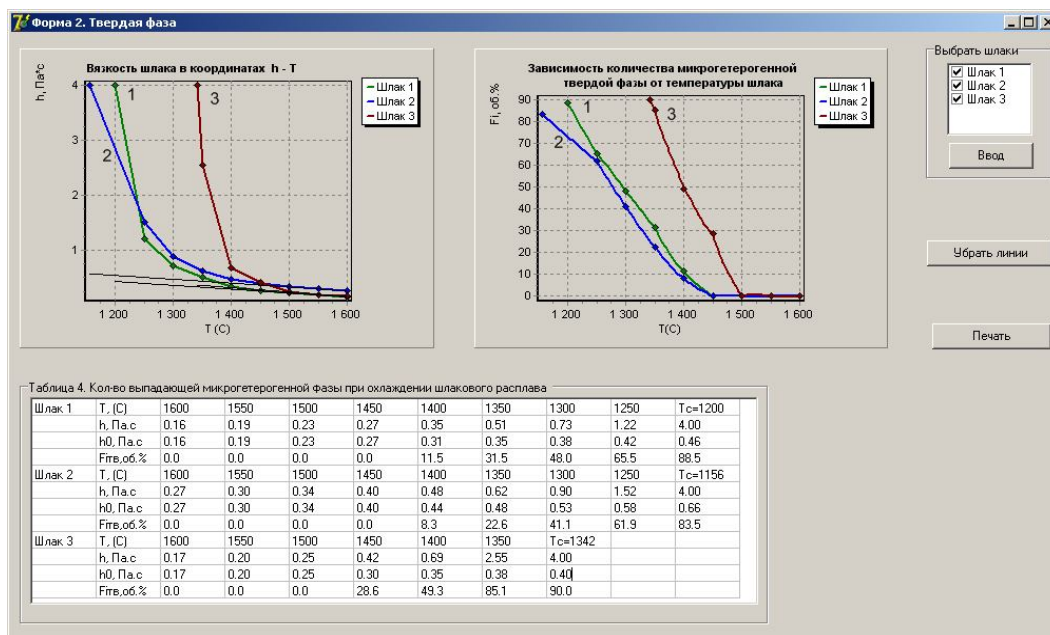


Рис. 1. Залежність в'язкості шлаків від температури та результат розрахунку  $\varphi_{мв.}$  програми «РКЗ-1», де  $h - \eta$ ,  $h_0 - \eta_0$ ,  $F_{тв.}$  –  $\varphi_{мв.}$ .

З графіку залежності  $\eta - T$  слідує, що шлаки №1 і №3 з основністю ( $CaO/SiO_2$ ) більше 1,1, малов'язкі при високих температурах  $1600^\circ C - 1500^\circ C$ , мають температуру твердіння ( $T_c$ ) відповідно  $1200^\circ C$  і  $1342^\circ C$ . Особливо швидко твердне високоосновний шлак №3. Низькоосновний шлак №2 при високих температурах більш в'язкий (в 1,5 – 1,6 рази), однак він більш легкоплавкий ( $T_c = 1156^\circ C$ ).

Температурна залежність в'язкості шлаків №1-3 (рис. 1) складається з лінійної високотемпературної й експоненціальної низькотемпературної ділянок. Температура початку лінійної ділянки є температурою повного розупорядкування (гомогенізації) розплаву ( $T_{роз.}$ ). Вона ж практично є температурою ліквідус ( $T_{роз.} = T_l$ ).

Очевидно, стосовно до шлакових розплавів розупорядковану структуру при їхньому перегріві можна трактувати як гомогенну. Тоді поява при охолодженні розплаву впорядкованих угруповань відповідає випаданню в гомогенному розплаві твердих часток, і розплав стає мікрогетерогенним.

На підставі даних про в'язкість металургійних шлаків при заданих значеннях температури (табл. 2) та їх графічної залежності комп'ютерна система «РКЗ-1» автоматично проводить розрахунок кількості мікрогетерогенної твердої фази ( $\varphi_{мв.}$ , об.%) що виділяється при охолодженні шлакового розплаву (табл. 4, рис. 1).

Результат розрахунку  $\varphi_{мв.}$  програми «РКЗ-1» свідчить про найменшу кристалізаційну здатність шлаку №2, у якого при охолодженні до  $1400^\circ C$  виділяється найменша кількість мікрогетерогенної твердої фази ( $\varphi_{мв.} = 8,3$  об.%), в той час як при охолодженні шлаку №3 вже при  $1450^\circ C$  виділяється 28,6 об.% мікрогетерогенної твердої фази, що говорить про високу його кристаліза-

ційну здатність. Ці дані кореспондуються з графіком залежності в'язкості шлаків від температури (рис. 1).

Перетворення координат графіка залежності  $\eta - T$  в  $\lg \eta - \frac{10^4}{T}$ , як показано на рис. 2 більш інформативно, що дозволяє розрахувати активаційні характеристики в'язкого плинину шлаків і більш докладно проаналізувати їхню поведінку в діапазоні охолодження й кристалізації.

З результатів розрахунку програми «РКЗ-1» видно (табл. 5, рис. 2), що найменше значення енергії активації в'язкого плинину ( $E\eta$ ), яка характеризує додаткову енергію необхідну для подолання міжмолекулярних взаємодій при переміщенні молекули рідини з одного стану тимчасової рівноваги в інший, має шлак №2 з основністю  $CaO/SiO_2 = 0,82$ . Інтервал кристалізації цього шлаку  $\Delta T = T_l - T_c = 269 K$  найбільший, що характеризує його як стабільний («довгий») в процесі плавки.

З збільшенням основності шлаків їх  $E\eta$  збільшується. Так, у шлаку №3 з основністю  $CaO/SiO_2 = 1,43$  порівняно із шлаком №2 енергія активації в'язкого плинину у високотемпературній області гомогенного стану розплаву збільшується на 40%, в середньотемпературній області – в 2,3 рази і в низькотемпературній – в 3,7 рази.

Інтервал кристалізації цього шлаку зменшився до 165 K. Ці активаційні характеристики свідчать про підвищену здатність високоосновного шлаку №3 до кристалізації і низькій стабільності цього «короткого» шлаку при понижених температурах в процесі плавки.

Натомість шлак №1 з основністю  $CaO/SiO_2 = 1,12$  по активаційним характеристикам та інтервалу кристалізації займає проміжне положення між шлаками №2 і №3. Якщо врахувати збільшення сіркопоглинаючої здатності шлаків із збільшенням їх основності, то активаційні характеристики шлаку №1 являються оптимальними (табл. 5 рис. 2).

