

УДК: 669.168: 669.26.0018

**Д.Н.Тогобицкая, В.П.Пиптюк, А.Ф.Петров, С.В.Греков,
И.Р.Снигура, Ю.М.Лихачев, Л.А.Головко**

**БАЗЫ ДАННЫХ И МОДЕЛИ ДЛЯ ЭКСПЕРТНОЙ ОЦЕНКИ
ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ФЕРРОСПЛАВОВ ПРИ
ПРОИЗВОДСТВЕ СТАЛИ**

Институт черной металлургии им. З.И.Некрасова НАН Украины

Создана информационная база ферросплавов широкого сортамента «Ферросплавы», включающая данные о производстве, химическом составе, важнейших теплофизических, физико-химических и физико-механических свойствах, а также и требованиях потребителей. Систематизированная информация используется при разработке прогнозных моделей свойств ферросплавов, при математическом, физико-химическом и физическом моделировании процессов, протекающих при взаимодействии ферросплавов с жидкой сталью.

Ключевые слова: ферросплавы, базы данных, свойства, прогнозные модели

Современное состояние вопроса. Металлургические расплавы сопровождают все основные переделы производства металла и их свойства предопределяют результаты взаимодействия и направленного формирования качества готовой продукции. Не случайно в 90-х годах минувшего столетия на Всесоюзных форумах проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии фундаментальными физико-химическими данными о свойствах металлургических расплавов была поднята на системный уровень [1]. В 1987 г. при Госкомитете науки и техники был создан Координационный Совет «Банк данных «Металлургия» (БДМет). Ежегодные совещания проводились по двум основным направлениям, которые доминировали в компьютеризации научных исследований. Первое связано с производством продуктов информационного профиля в виде банков и баз данных разнотипной предметной ориентации, второе - с созданием фонда моделей, предназначенных для описания и прогнозирования поведения физико-химических систем, металлургических агрегатов и технологических процессов с авторизованным программным обеспечением, создаваемым профессионалами-исследователями. Разработки первого направления чаще всего фигурируют как информационно-поисковые системы (ИПС), вторые чаще называют экспертными системами (ЭС).

Процесс интеграции разработок этих направлений, объединенных единой идеологией их создания, в сочетании с нетрадиционными средствами анализа и обработки разнотипных данных, обеспечивает создание элементов интегрированной базы знаний (БЗ) [2].

Институт черной металлургии (г. Днепр), как головной отраслевой институт, совместно с институтом им. А.А.Байкова (г. Москва) занимал лидирующее положение в выработке концептуальных основ создания «Банка данных «Металлургия», бифункционального по своему назначению и мультибазовой структуре [3]. Информация о деятельности БДМет подробно освещалась на страницах академического журнала «Известия АН Металлургия. Металлы». Особенностью успешной плодотворной работы физхимиков и математиков явились разработки, направленные на создание авторизованного программного продукта, представленного информационно-аналитическими системами и комплексами, способными перерабатывать предметно-ориентированные данные в проблемно-ориентированном направлении. Каталог этих разработок опубликован в работе [4].

Фундаментальная и прикладная наука о металлургических расплавах накопила огромное количество экспериментальных данных, которые характеризуют физико-химические свойства расплавов, а также их поведение в различных металлургических процессах. Современные информационные технологии - это эффективное средство решения многоплановых задач по улучшению качества металлопродукции. На сегодняшний день вычислительная техника предоставляет Пользователю широкий сервис, позволяющий не только рационально хранить такие данные, но и удобно оперировать ими – это базы данных (БД) [2].

Базы данных, которые содержат результаты экспериментальных исследований свойств металлургических расплавов, служат информационной основой для теоретической и прикладной металлургии при разработке путей совершенствования существующих и принципиально новых технологий получения металлопродукции необходимого качества при снижении затрат на ее производство и улучшении экологических показателей.

Организации и вводу информации в базы должны предшествовать строгие правила ее формализации (паспортизации) без потери смысла информации, вырванной из контекста исходных сообщений. Структурированный документ состоит из отдельных частей (фрагментов), каждой из которых присваивается имя. Машинный паспорт экспериментальных данных (ПЭД) должен включать всю полноту информации без каких-либо предварительных обработок и «сглаживаний» [4].

Для решения задач моделирования закономерностей, связывающих состав, структуру и свойства расплавов используется оригинальная концепция физико-химического моделирования процессов межатомного взаимодействия в расплавах и растворах, разработанная проф. Э.В. Приходько [5, 6]. В соответствии с ней, металлические расплавы рассматриваются как химически единые системы, изменение состава которых сказывается на комплексе физико-химических свойств через

параметры их электронной структуры.

При исследовании взаимосвязи между составом, строением и свойствами металлических расплавов, включая многокомпонентные, показана целесообразность использования модели ОЦК - подобной упаковки атомов. В этом случае соотношение между эффективными зарядами (Z) для первой (Z_1^x) и второй (Z_2^y) координационных сфер подавляющего большинства металлических расплавов описывается уравнением:

$$4Z_1^x = -Z_2^y \quad (1)$$

По физическому смыслу уравнение (1) выражает в терминах зарядов интегральное условие равновесия сил притяжения и отталкивания, действующих на любой атом в многокомпонентной системе со стороны партнеров его связей с соседями в первых двух координационных сферах.

Использование структурной модели открыло новые возможности для полуэмпирического обобщения опытных данных о свойствах расплавов и продуктов их кристаллизации. Эти возможности связаны с разработкой единой формы кодирования информации о составе расплавов, соединений и растворов в виде сочетания интегральных и парциальных модельных параметров межатомного взаимодействия. Основными из них являются химический эквивалент состава (Z^y), суммирующий информацию о зарядах компонентов с учетом вероятности образования связей разного типа и структурный параметр (d), характеризующий среднестатистическое расстояние между атомами в расплаве. Дополнительно к химическому эквиваленту и структурному параметру в ряде случаев используется электрохимический - $tg\alpha$, характеризующий изменение радиусов ионов при изменении их зарядов. По физическому смыслу каждый из этих параметров является аналогом электронного (Z^y), размерного (d) и электрохимического ($tg\alpha$) факторов.

Следует заметить, что используемые критерии Z^y и d характеризуют расплавы как гомогенные системы. Это допущение в известной мере идеализирует состояние их структуры. Для системного учета влияния микронеоднородности расплавов на их свойства предложено рассчитывать избыточные значения Z^y и d [7-9]. Соответствующие значения (ΔZ^y) и (Δd) определяются как разница между Z^y и d для разупорядоченных систем и механической смеси из исходных компонентов этой системы, т.е. $\Delta Z^y = Z_{спл}^y - \sum Z_i^y \cdot n_i$ и $\Delta d = d_{спл} - \sum d_i \cdot n_i$, где n_i - атомная доля компонента расплава.

Ввод этих критериев оказался весьма полезным для теоретического обобщения опытных данных. Методология их определения и использования, существенно расширяют научную базу для решения задачи

аналитического обобщения имеющейся экспериментальной информации о влиянии состава на структуру и свойства многокомпонентных металлических расплавов.

На основе положений концепции направленной химической связи была разработана модель структуры шлаковых расплавов [10]. Использование интегральных и парциальных параметров межатома взаимодействия оказалось весьма эффективным средством «свертки» информации о составе многокомпонентных оксидных расплавов при изучении закономерностей формирования их свойств. Программная реализация физико-химических моделей шлакового и металлического расплавов в подсистемах «Шлак» и «Металл» с дружелюбным интерфейсом пользователя максимально приблизила авторизованный программный продукт к широкому использованию при решении прикладных задач по схеме состав-структура-свойства.

Наличие инструментальных средств «свертки» информации о составе многокомпонентных систем, перспективы обобщения и абстрагирования от конкретного химического состава инициализировали развитие работ по созданию информационной среды для решения задач прогнозирования свойств железорудного сырья [3], моделирования процессов межфазного распределения элементов в системе «шлак-металл» в восстановительных и окислительных условиях [11] на основе баз данных о свойствах железорудных материалов «Шихта», шлаковый расплав «Шлак», термодинамических данных о процессах взаимодействия в расплавах «Шлак-металл-газ».

На основе перечисленных баз данных и физико-химических моделей металлургических расплавов сформировался информационно-аналитический комплекс «Расплав», обеспечивающий работу базы моделей и баз данных в режиме взаимной дополнителности. Используемая технология распределенных баз данных в комплексе с прикладными средствами их многоаспектной обработки моделей металлургических расплавов являются базовым программным обеспечением АСНИ в ИЧМ НАНУ, ряда металлургических предприятий отрасли.

Изложение основных материалов исследования. В настоящей работе описаны особенности формирования базы «Ферросплавы», включающие информацию о производстве, химическом составе и требованиях, предъявляемым к ферросплавам различных групп.

Источником информации являются литературные данные отечественных и зарубежных авторов. На данном этапе систематизированы данные о 256 составах ферросплавов. В базу включены сведения о комплексе физико-химических, физических и теплофизических свойств ферросплавов широкого сортамента (феррохрома, ферросилиция, ферромарганца, феррованадия, ферротитана, феррониобия, ферроникеля, ферроциркония, ферромолибдена, силикокальция, силикомарганца,

ферросиликоциркония и ряда других).

Пример машинного паспорта базы «Ферросплавы» приведен ниже.

!Документ №1;

кс = феррохром, ферромарганец, ферросилиций, феррованадий, ферросиликомарганец, ферросиликохром, ферросплавы, кристаллизация, внепечное рафинирование, температура ликвидуса, модельные уравнения;

авторы= Макуров С.Л., Милянук А.Н.;

название= Экспериментальное и расчетное определение теплофизических свойств промышленных ферросплавов;

издание= Металлургическая и горнорудная промышленность. 2002. №10;

реферат= Выполнено термографическое исследование образцов промышленных ферросплавов, ферромарганца, ферросилиция, феррованадия, ферросиликомарганца и ферросиликохрома. Обработкой экспериментальных данных определены интервалы температур кристаллизации, энтальпия кристаллизации и удельная теплоемкость ферросплавов. Предложены расчетные формулы для определения температуры ликвидус ферросплавов в зависимости от их химического состава. Для различных ферросплавов расхождение расчетных и экспериментальных значений температуры ликвидус составляет 5-25°C. Информация о теплофизических свойствах ферросплавов необходима для оптимизации технологии внепечного рафинирования и легирования стали;

количество образцов= 6;

референт= Головки Л.А.;

эксперт= Мороз В.Ф.;

методика= Экспериментальное определение теплофизических свойств ферросплавов производили методом термического анализа. По кривым охлаждения определяются температурные интервалы кристаллизации, а затем рассчитываются их теплофизические свойства;

#\$1 результаты расчета теплофизических свойств ферросплавов;

№=;Образец=;1=;2=;3=;4=;5=;энтальпия кристалл.=;

1;Ni;1.46;2.54;1.79;1.32;;300;

2;FeSi;553.23;555.76;558.98;556.31;;281.1;

3;FeV;462.51;472.3;480.78;470.53;472.08;197.85;

4;SiMn;601.08;591.79;589.4;588.85;;162.14;

5;SiCr;668.55;659.89;665.02;664.2;;209.73;

6;FeMn;605.55;599.75;612.69;610.91;604.94;109.11;

примечание= 1,2,3,4,5 – участки кривой $T=f(\tau)$ по которой определялось 1- темп выделения теплоты, Вт, 2-6 – удельная теплоемкость, Дж/(кг.К), химсостав – масс.%, тпл – температура ликвидус;

резюме= Предложены расчетные формулы для определения температуры ликвидус ферросплавов в зависимости от их химического состава;

Информация о важнейших теплофизических, физико-химических и физико-механических свойствах систематизирована и привязана к конкретному химическому составу данной марки ферросплавов. Эти данные (таблицы) могут быть использованы в качестве исходных

параметров при математическом, физико-химическом и физическом методах моделирования процессов, протекающих при взаимодействии ферросплавов с жидкой сталью.

Поиск документов в базе осуществляется по лексическим единицам (словам, числам, датам) или фразам, содержащимся в текстах документов. Для фактографической информации предусмотрен просмотр данных в виде таблиц.

Систематизация разнотипной информации в базах обеспечивает:

- нахождение информации в документально-фактографических базах данных с сохранением оригинальности их исходного вида;
- использование теоретических и эмпирических моделей для прогнозирования свойств по выборкам из баз;
- использование разнопланового графического представления информации для интерактивной экспертной оценки зашумленных областей данных.

Предусмотрено дальнейшее пополнение новыми материалами базы данных «Ферросплавы». Создание базы данных «Ферросплавы» позволило расширить информационный ресурс БДМет (рис.1).



Рисунок 1 – Структура информационного ресурса о свойствах шлаковых и металлических расплавов «Расплав»

По рассмотренной выше схеме моделирования с использованием предлагаемых физико-химических критериев и экспериментальных данных, взятых из соответствующих паспортов базы «Ферросплавы», которые выступали в качестве реперных точек, проведено системное исследование важнейших потребительских свойств ферросплавов широкого сортамента и лигатур промышленного производства для

раскисления и легирования стали. Предложены уравнения для оценки физических, физико-химических и теплофизических свойств (энтальпия, плотность, температура плавления, теплоёмкость, теплота плавления, коэффициент теплопроводности, коэффициент температуропроводности, удельное электросопротивление) ферросплавов промышленных марок, имеющиеся экспериментальные данные по которым ограничены или носят противоречивый характер.

Разработаны полуэмпирические модели, позволяющие прогнозировать влияние изменения состава, выраженного через интегральные параметры межатомного взаимодействия, на свойства стандартных марок ферросплавов различных групп:

а) хромистые ферросплавы (высоко-, средне- и низкоуглеродистый феррохром);

б) марганцевые ферросплавы (высоко-, средне- и низкоуглеродистый ферромарганец), ферросиликомарганец, марганец металлический;

в) сплавы кремния (ферросилиций всех марок);

г) феррованадий, феррониобий, ферробор, ферротитан, ферроникель.

В качестве одного из примеров ниже приведены уравнения для расчета свойств марганцевых ферросплавов (кажущейся плотности (D , г/см³), теплоты плавления (Q , кДж/кг), теплоемкости (C , Дж/кг·К), теплопроводности (λ , Вт/(м·К)), удельного электросопротивления (ρ , мОм·м), коэффициента температуропроводности ($\alpha \cdot 10^{-3}$, м²/с), временного сопротивления (σ_B) по модельным параметрам [12].

Для ферромарганца, ферросиликомарганца и марганца металлического:

$$D = 21,6 - 21,3Z^y + 3,98d + 19,4\Delta Z^y - 9,7\Delta d \quad r=0,99 \quad (2)$$

$$T_{\text{пл}} = 9114,6Z^y - 2645d - 10044\Delta Z^y + 1051,9\Delta d - 1792 \quad r=0,99 \quad (3)$$

$$C = -1974 + 5562Z^y - 1376d - 6075\Delta Z^y - 406\Delta d \quad r=0,95 \quad (4)$$

$$Q = 3927,7Z^y - 193,5d - 3178\Delta Z^y + 1049\Delta d - 3987 \quad r=0,99 \quad (5)$$

$$\rho = 5,66 + 23,9Z^y - 10,9d - 29,8\Delta Z^y + 9,29\Delta d \quad r=0,99 \quad (6)$$

$$\alpha = 93,9 - 177Z^y + 43,9d + 184,6\Delta Z^y - 11,9\Delta d \quad r=0,95 \quad (7)$$

$$\lambda = 549,4 - 951,6Z^y + 223d + 966\Delta Z^y - 70,3\Delta d \quad r=0,97 \quad (8)$$

$$\sigma_B = 576Z^y + 259,6d - 405,9\Delta Z^y - 912,3\Delta d - 1387,6 \quad r=0,98 \quad (9)$$

В таблице 1 в качестве примера приведены расчетные по вышеприведенным уравнениям значения физических и теплофизических свойства для некоторых марок стандартных марганцевых ферросплавов в сопоставлении с имеющимися в литературе экспериментальными значениями свойств.

Результаты, полученные по приведенным уравнениям (2) – (9),

удовлетворительно согласуются с соответствующими экспериментальными данными. Предпочтительность используемых уравнений определяется наличием достоверного химического состава соответствующих ферросплавов.

Таким образом, интеллектуальный ресурс БДМет (рис.2) пополнился подсистемой моделирования металлических расплавов в части учета параметров микронеоднородности и соответственно на этой основе прогнозирования их физико-химических свойств, в том числе ферросплавов.

Таблица 1 – Сопоставление значений физико-химических и теплофизических свойств отдельных марок марганецсодержащих сплавов, приведенных в литературе, и рассчитанных по уравнениям (2) – (9)

Марка	$D_{\text{каж}}, \text{г/см}^3$	Тпл, К	Ср, Дж/кг·К	$Q_{\text{пл}}, \text{кДж/кг}$	$\rho_{\text{уд}}, \text{Мом}^* \cdot \text{м}$	$\lambda, \text{Вт/м} \cdot \text{К}$	$\alpha \cdot 10^{-3}, \text{м}^2/\text{с}$	$\sigma, \text{МПа}$
Мн965	7,35*	1499*	755*	266*	2,30*	42,3*	7,1*	99,3*
	7,24[13]	1493[13]	754[13]	267[13]	2,26[13]	43,2[13]	7,1[13]	100,3[13]
	7,20[15]	1513[15]	750[15]	270[15]		43,0[15]		
ФМн90	7,22*	1538*	797*	291*	1,89*	31,5*	5,6*	137,5*
	7,26[13]	1523[13]	800[13]	293[13]	1,87[13]	31,4[13]	5,4[13]	137,0[13]
	7,4[15]	1533[15]	750[15]	268[15]		28,0[15]		
МнС17	6,31*	1428*	583*	478*	1,59*	21,6*	4,86*	106,7*
	6,21[13]	1533[13]	717[13]	477[13]	1,49[13]	21,6[13]	4,7[13]	107,2[13]
	6,15[14]	1463[14]	502[14]	732[14]		56,3[14]		
	6,20[15]	1533[15]	720[15]	480[15]		22,0[15]		

*) расчетные значения по уравнениям (2)-(9)

Ниже, в качестве примера использования спрогнозированных свойств ферросплавов для оценки эффективности их применения при ковшовой обработке стали, представлены результаты математического моделирования процессов плавления таких материалов на У КП.

Производство качественной стали предусматривает ее обработку на У КП, в том числе ее доводку по составу за счет использования кусковых ферросплавов. К числу основных процессов обработки стали на У КП относят рафинирование и доводку металла по составу и температуре. Эти процессы происходят при постоянном перемешивании жидкой ковшовой ванны за счет продувки инертным газом, ее дугового подогрева. Сложность физического моделирования этих процессов, высокая температура и агрессивность расплава и других участвующих сред определяют условия для использования в изучении указанных процессов метода математического моделирования.



Рисунок 2 – Структурная схема модельной подсистемы «Расплав» БДМет

Математическая модель гидродинамики и теплообмена в газожидкостной среде типа расплав – газ, построенная в рамках концепции взаимодействующих континуумов по методике, описанной в [16] является модификацией представленных в [17-20] моделей, которые учитывают сжимаемость моделируемой среды, а также дуговой подогрев, осуществляемый на УКП.

Динамика газожидкостной среды описывается системой уравнений Навье-Стокса для сжимаемой среды:

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = R(\bar{v}, \alpha) - \bar{\nabla} \bar{p} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\bar{\nabla} \cdot (\alpha \bar{v}) + \bar{\nabla} \cdot [De \bar{\nabla} \alpha] + \phi(\bar{v}, \alpha) \quad (11)$$

уравнением переноса газовой фазы:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\bar{\nabla} \cdot (\alpha \bar{v}) + \bar{\nabla} \cdot [De \bar{\nabla} \alpha] + \phi(\bar{\nabla}, \alpha) \quad (12)$$

и уравнением переноса тепла:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\bar{v} \bar{\nabla} T + \bar{\nabla} \cdot \left[\frac{a_e \left(1 - \frac{3}{2} \alpha \right) \bar{\nabla} T}{1 - \alpha} \right] + \psi_T \quad (13)$$

где \bar{v} – барицентрическая скорость газожидкостной среды, α – коэффициент объемного содержания газа, \bar{p} – динамическая составляющая давления, относится к плотности металла ρ_0 , T – температура среды, t – время, a_e – коэффициент эффективности теплопроводности, D_e –

коэффициент эффективной турбулентной диффузии газовой фазы, Ψ_T – тепло, поступающее от источника в единицу времени, $R(\bar{v}, \alpha)$ и $\Phi(\bar{v}, \alpha)$ – введенные для удобства функции, зависящие от эффективного коэффициента кинетической вязкости, ускорения свободного падения, объемного источника газовой фазы, диффузионной скорости газовой фазы, давления.

Для решения уравнений (10) – (13) используется модифицированный метод расщепления по физическим факторам для сжимаемых сред [16].

Подача газа через фурму проводилась введением в место ее расположения источника газовой фазы объемной плотности:

$$\Psi_\alpha = \frac{q}{V_K}, \quad (14)$$

где q – расход инертного газа через фурму в единицу времени, V_K – объем зоны формирования режима барботажа (в расчетах считался равным объему расчетной ячейки).

Дуговой подогрев на УКП осуществлялся при помощи расположенных над расплавом трех симметрично установленных электродов переменного тока. В модели учет нагрева реализован, благодаря введению в местах расположения электродов, источников тепла объемной плотности:

$$\Psi_\alpha = \frac{P}{3C_0 P_0 V_K}, \quad (15)$$

где P – суммарная мощность источника, C_0 – теплоемкость металла.

На практике зачастую используют ковш с усилением футеровки в бойной части. Принцип ее учета в ковше описан в [21].

Разработанная модель реализована в пакете программ на языке C++ [22]. Программный комплекс моделирования процессов при ковшовой обработке стали разработан под руководством проф. Самохвалова С.Е. В пакет входят программы для проведения расчетов, визуализации и анализа полученных результатов.

В исследованиях настоящей работы использована информация подробно представленная в [23, 24] о геометрических параметрах ковша, параметрах бойной части, тепловых параметрах процессов и теплофизических характеристиках материалов.

Кроме выше рассмотренных процессов в ванне ковша при доводке металла по химическому составу на УКП осуществляется плавление кускового ферросплава.

В разработанных моделях этих процессов [25] решаются задачи витания (движения), плавления и диффузионного растворения ферросплавов.

При плавлении (растворении) ферросплава используется подход, предложенный в задаче плавления порошковой проволоки [26, 27], со следующими приближениями:

- 1) кусок ферросплава не вращается относительно центра масс;
- 2) пренебрегается разрывом намерзшей корочки под внутренним

давлением, а также возможное отсоединение кусков корочки;

3) пренебрегается движением материала в пределах куска;

4) однородный слой шлака везде имеет одинаковую толщину, не движется и не взаимодействует с расплавом стали.

Кусок, всплывая на поверхность расплава, продолжает плавиться в несимметричных граничных условиях – теплофизические свойства шлака или воздуха и стали существенно отличаются. Задача плавления, с целью учета несимметричности, решается методом конечных объемов в двухмерной постановке в сферических координатах r и θ (по углу φ – допускается симметрия, плавится ось симметрично). На гранях ячеек определяются тепловые потоки, а в середине – температура, используя теплофизические свойства материала в ячейке: теплопроводность, теплоемкость, плотность.

Тепловые потоки на гранях конечных объемов ферросплава имеют вид:

$$q = \lambda \frac{T_{i-1} - T_i}{L} A; \quad q_2 = 0; \quad q_3 = \alpha(T_p - T)A \quad (16)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, L – расстояние между центрами объемов, T_i и T_{i+1} – температуры в соответствующих ячейках, α – коэффициент теплоотдачи, A – площадь грани, T_p – температура расплава вблизи куска ферросплава, T – температура в приповерхностной ячейке.

Задача движения куска ферросплава решается с учетом сопротивления со стороны расплава.

Для определения уравнений движения куска ферросплава используются следующие приближения: форма куска – сфера, можно пренебречь вращением куска.

Пусть \vec{r} – радиус-вектор центра масс куска. Динамика куска определяется уравнениями Лагранжа второго рода:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial K}{\partial \dot{q}^b} - \frac{\partial K}{\partial q^b} = \frac{\partial P}{\partial q^b} + F^b, \quad b = 1, 2, 3 \quad (17)$$

где q^b – b -та обобщенная координата центра масс куска.

$$K = \frac{m}{2} (\dot{r} \cdot \dot{r}) \quad P = m \left(\frac{p_e}{p} - 1 \right) g \cdot r \quad F^b = \left(-C_x \frac{p_e (r - v) |r - v|}{2} S \right) \cdot \frac{\partial r}{\partial q^b}, \quad (18)$$

где C_x – коэффициент гидродинамического сопротивления, p_e – плотность окружающей среды (шлак, сталь, воздух), p – плотность куска, v – локальная скорость расплава, S – площадь сечения куска, m – масса куска.

С целью определения радиус-вектора центра масс куска \vec{r} , обобщающими координатами q_i выбраны координаты цилиндрической системы – r, φ, z . Кусок идеально упруго отталкивается от стенки или дна ковша. С учетом конусности новая скорость центра масс имеет вид:

$$r^* = r - 2(r \cdot n_w) n_w, \text{ при } |r - r \cdot n_b| > R + (r \cdot n_b) \sin \gamma, z < 0 \rightarrow z^* = -z, \quad (19)$$

где R – радиус внутренней поверхности дна ковша, r и z – соответственно

первая и третья обобщенные координаты центра масс куска, γ – угол наклона стенки ковша, r^* – скорость центра масс куска после удара о стенку.

С использованием последней версии программного продукта реализации математической модели плавления (растворения) ферросплавов в ковшовой ванне емкостью 60 т, учитывающей гидродинамическое и тепловое состояния расплава, применительно к условиям обработки металла на УКП фирмы Даниэли в СПЦ-3 ПАО «Днепроспецсталь», исследовали продолжительность плавления кусковых ферросплавов ФМн78 и СМн17 разной фракции. В численных расчетах учитывали свойства вышеуказанных ферросплавов и конструкционной стали.

Место ввода ферросплавов, их фракционный состав, расположение продувочной фурмы, геометрические особенности ванны ковша, интенсивность продувки аргоном и температурные условия принимали в соответствии с практически реализуемыми конструктивно-технологическими данными.

Результаты расчета продолжительности плавления ферросплавов с разным содержанием ведущих элементов сопоставляли с продолжительностью плавления их среднего марочного состава в зависимости от интенсивности продувки и фракции кусков (рис.3).

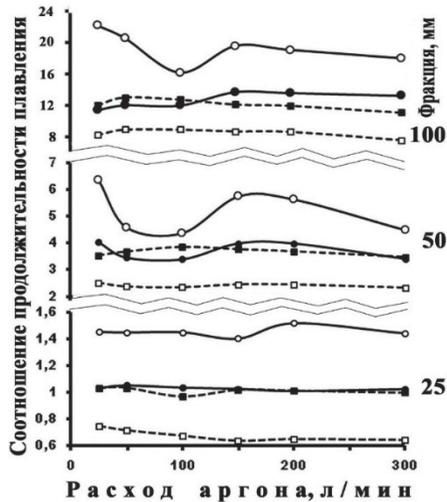


Рисунок 3 – Влияние интенсивности продувки ковшовой металлической ванны и фракционного состава кусковых ферросплавов на соотношение продолжительности их плавления, которое определяется отношением продолжительности плавления ферросплавов, содержащих крайние значения ведущего элемента (марганца 75% (—●—) и 82% (—○—) в ФМн78 и кремния 16% (---□---) и 20% (---■---) в СМн17) к продолжительности плавления этих ферросплавов со средним содержанием в соответствующих стандартных марках. Плавление ферросплавов осуществлялось на УКП «Даниэли» ПАО «ДСС». Начальная температура металла – 1600°C

Из рисунка 3 следует, что независимо от фракции кусков ферросплавов наименьшая продолжительность плавления во всем диапазоне исследованных расходов аргона отмечена для ФМн78 с содержанием марганца 78%, а для МнС17 – с содержанием кремния – 16%. Сокращению продолжительности плавления способствует уменьшение фракции кусков и повышение интенсивности продувки ванны независимо от марки рассмотренных ферросплавов. Более короткая продолжительность плавления МнС17 по сравнению с ФМн78 вероятно объясняется комплексом свойств при аналогичных условиях их использования. Как следует из характера кривых продолжительности плавления ФМн78 (рис.3) наиболее рациональным режимом продувки ванны аргоном является его расход в пределах 50-150 л/мин.

Выводы.

1. Сформирована база «Ферросплавы», включающая информацию о производстве, химическом составе и предъявляемых требованиях к ферросплавам различных групп. Информация о важнейших теплофизических, физико-химических свойствах ферросплавов систематизирована в соответствии с конкретным химическим составом каждой марки ферросплава. Данные базы «Ферросплавы» используются в качестве исходных параметров при математическом, физико-химическом и физическом моделировании процессов, протекающих при взаимодействии ферросплавов с жидкой сталью.

2. Разработанные полужемпирические модели на основе интегральных параметров межзатомного взаимодействия позволяют прогнозировать влияние изменения состава на свойства стандартных марок ферросплавов различных групп, производимых в Украине. Они могут быть использованы для оценки свойств, как внутри отдельной марки, так и всего сортаментного ряда ферросплавов при оценке эффективности их применения на основных этапах сталеплавильного передела.

3. В качестве примера экспертной оценки эффективности использования ферросплавов, представлены результаты численного моделирования продолжительности плавления кусковых ферросплавов ФМн78 и МнС17 при различной интенсивности продувки и фракционном составе добавок.

1. *Тогобицкая Д.Н.* Проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии / Д.Н.Тогобицкая, Г.И.Жмойдин // Известия АН СССР. Металлы. – 1991. - №4. – С. 217-220.
2. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Степаненко Д.А.* Прогнозирование физико-химических свойств оксидных систем. Днепропетровск. «Пороги», 2013. – 344 с.
3. *Тогобицкая Д.Н.* Авторизированный компьютерный продукт в отечественной металлургии / Д.Н.Тогобицкая, Г.И.Жмойдин // Известия АН России. Металлургия. Металлы. – 1996. - №1. – С. 29-45.

4. *Тогобицкая Д.Н.* О паспортизации экспериментальных материалов для банка данных «Металлургия» / Д.Н.Тогобицкая, Г.И.Жмойдин, Э.В.Приходько и др. // Известия вузов. Черная металлургия. – 1988. - №8. – С. 136-139.
5. *Приходько Э.В.* О физико-химической модели структуры металлических расплавов / Э.В.Приходько // Изв. АН СССР. Металлы. – 1986. – № 4. – С. 20–26.
6. *Приходько Э.В.* О роли направленности химической связи в формировании структуры и свойств жидких полупроводников / Э.В.Приходько, К.Ю.Сидоренко, В.К.Кольцов // Журнал физ.химии. – 1987. – Т.61, № 12. – С. 3260–3267.
7. *Приходько Э.В.* Влияние параметров направленного межатомного взаимодействия на термодинамические свойства металлических расплавов / Э.В.Приходько, А.Ф.Петров // Процессы литья. – 1995. – № 1. – С.26–38.
8. *Приходько Э.В.* Роль направленного межатомного взаимодействия в формировании микронеоднородного строения металлических расплавов / Э.В.Приходько, А.Ф.Петров // Изв. вузов. Черная металлургия. – 1995. – № 12. – С.5–12.
9. *Приходько Э.В.* Физико-химические критерии для оценки степени микронеоднородности металлических расплавов / Э.В.Приходько, А.Ф.Петров // Металлофизика и новейшие технологии. – 1998. – Т.20, № 7. – С. 64–74.
10. *Приходько Э.В.* Физико-химическая модель структуры шлаковых расплавов / Э.В.Приходько // Сталь. – 1990. – № 10. – С. 14–22.
11. *Приходько Э.В.* Физико-химическая критерии для компьютерного моделирования фазовых равновесий в системе «оксидный расплав – продукты кристаллизации» / Э.В.Приходько, А.И.Белькова // Неорганические материалы. – 1999. – т. 35.– № 9. – С. 1084–1089.
12. *Приходько Э. В.* Методика прогнозирования физических и теплофизических свойств марганцевых ферросплавов в зависимости от состава / Э.В.Приходько, А.Ф.Петров // «Металлургическая и горнорудная промышленность». – Днепропетровск. – 2008. – №6. – С. 27–30.
13. *Изучение свойств ферросплавов и лигатур для микролегирования и раскисления стали* /В.С.Игнатъев, В.А.Вихлевщук, В.М.Черногрицкий, В.П.Пиптюк и др.// Известия ВУЗов. Черная металлургия. -1988. -№6. –С. 37-42.
14. *Физико-химические характеристики марганцевых ферросплавов* /В.И.Жучков, А.Л.Завьялов, А.С.Носков, А.В.Некрасов// Известия ВУЗов. Черная металлургия. -1994. -№10. –С. 9-10.
15. *Охотский В.Б.* Модели металлургических систем. Системные технологии. – Днепропетровск. -2006. -284 с.
16. *Самохвалов С.Є.* Теплофізичні процеси в багатофазних середовищах: теоретичні основи комп'ютерного моделювання. –Дніпродзержинськ. ДДТУ. 1994. 174 с.
17. *Влияние постоянного тока на характер массопереноса в металлическом расплаве установки ковш-печь. Часть 2. Модель массопереноса* /В.П.Пиптюк, С.Е.Самохвалов, И.А.Павлюченко и др. // Теория и практика металлургии. - 2007. -№4-5. –С. 14-17.
18. *Исследование тепло- и массообменных процессов в ванне установки ковш-печь. Часть 1. Математическая модель* /В.П.Пиптюк, С.Е.Самохвалов, И.А.Павлюченко и др. // Теория и практика металлургии. -2008. -№ 3. –С. 3-5.
19. *Математичне моделювання спряжених процесів гідродинаміки та тепло*

- переносу у ковші при різних режимах продування /Д.Ю.Кабаков //Вісник СевНТУ. Серія Механіка, енергетика, екологія. -№ 133. –Севастополь. -2012. – С. 118-121.
20. *Математична* модель спряжених процесів гідродинаміки та теплообміну у сталерозливному ковші з посиленою бійною частиною / Д.Ю.Кабаков, В.П.Піптюк, І.М.Логозинський, О.Г.Чичерін// Вісник ХНТУ. –Херсон. -№2 (15). -2012. –С. 160-165.
 21. *Спряжені* процеси гідродинаміки та тепло переносу у ковші під час наповнення / Д.Ю.Кабаков, С.Є.Самохвалов // Системні технології.–Дніпропетровськ. -№2 (79). -2012. –С. 146-151.
 22. *Математичне* моделювання переносних процесів в установці ківш-піч / Д.Ю.Кабаков, С.Є.Самохвалов, В.П.Піптюк// -Днапродзержинськ, ДДТУ. - 2015. -124 с.
 23. *Основные данные* для численных исследований гидродинамики ванны на установках ковш-печь переменного тока разной мощности/ В.П.Піптюк, В.Ф.Поляков, И.Н.Логозинский и др. //Сб. научн. трудов ИЧМ НАНУ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». -2007. – Выпуск 14. –С.145-153.
 24. *Параметры* моделирования тепловых процессов в ванне установки ковшопечь / В.П.Піптюк, В.Ф.Поляков, С.Е.Самохвалов и др.// Процессы литья. -2009. - №5. –С. 34-41.
 25. *Математична* модель несимметричного плавления легкоплавкої домішки / К.С.Красніков, С.Є.Самохвалов, В.П.Піптюк та ін.// Математичне моделювання. -2014. -№ 31. –С. 47-50.
 26. *Розробка* комп'ютерної програми, що реалізує математичну модель тривимірного руху сталевого дроту при введенні під рівень розплаву на установці ківш-піч / К.С.Красніков, С.Є.Самохвалов, В.П.Піптюк // Математичне моделювання. -2013. -№ 29. –С. 95-98.
 27. *The mathematical model* of the coted wire injection in the molten steel during blowing on the ladle-furnace /К.С.Красніков, С.Е.Самохвалов, В.Р.Ріптюк // Системные технологии. -2015. -№5 (100). –С. 4-14.

*Статья поступила в редакцию сборника 10.05.2017
и прошла внутреннее и внешнее рецензирование*

***Д.М.Тогобицька, В.П.Піптюк, О.Ф.Петров, С.В.Греков, І.Р.Снігура,
Ю.М.Лихачов, Л.А.Головко***

Бази даних та моделі для експертної оцінки ефективності використання феросплавів при виробництві сталі

Створено інформаційну базу феросплавів широкого асортименту «Феросплави», що включає дані про виробництво, хімічний склад, найважливіші теплофізичні, фізико-хімічні та фізико-механічні властивості, вимоги споживачів. Систематизована інформація використовується при розробці прогнозних моделей властивостей феросплавів, математичного, фізико-хімічного та фізичного моделювання процесів, що протікають при взаємодії феросплавів з рідкої сталлю.

Ключові слова: феросплави, бази даних, властивості, прогнозні моделі

*D.M.Togobitskaia, V.P.Piptiuk, A.F.Petrov, S.V.Grekov, I.R.Snigura,
Yu.M.Likhachev, L.A.Golovko*

Databases and models for efficiency expert evaluation of steel production with ferro-alloys

The article reports on the developed Ferroalloy database, which embraces the information on ferroalloys of wide assortment, including the data on productions, the chemical compositions, the most crucial thermophysical properties, physical and chemical properties, physical and mechanical ones, and the consumers' requirements. These systematized data are used in the development of predictive models of the ferroalloys properties in the mathematical modeling, physical and chemical simulation, pure physical simulation of processes occurring during the interaction of ferroalloys with liquid steel.

Keywords: ferroalloys, databases, properties, forecast models