

Э.В.Приходько, Д.Н.Тогобицкая

КОМПЛЕКСНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОЛОГИИ ФИЗИКО–ХИМИЧЕСКОГО И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Целью работы являлось решение задач оптимизации металлургических технологий с использованием методологии физико–химического и математического моделирования и критериев, связанных между собой сложными нелинейными зависимостями. Приведены примеры использования многолетнего опыта создания информационного и интеллектуального ресурса. Показано, что использование комплекса разработанных моделей, созданных на базе использования данной методологии, позволяет успешно решать задачи оптимизации сквозных металлургических технологий производства металлопродукции.

металлургические технологии, физико–химическое и математическое моделирование, критерии, зависимости, оптимизация

Введение. Практически все металлургические процессы относятся к классу сложных многосвязных объектов, имеющих большое число входных и выходных параметров со сложными внутренними связями. Большинство управляющих воздействий влияет на отдельные показатели по разному, а иногда даже диаметрально противоположно направлены, что существенно усложняет, а иногда делает даже теоретически недостижимой практическую реализацию цели управления такими сложными химико–технологическими процессами – обеспечение максимума всех технико–экономических показателей.

Для решения этих задач наиболее важным является не поиск единственной точки оптимума, а определение области допустимой колеблемости ресурсов оптимизации, при которой обеспечивается требуемый уровень критериев, связанных, зачастую, между собой сложными нелинейными зависимостями. При этом даже граничные условия часто диктуются различными многомерными соотношениями. Специфика решения этих задач выдвигает на передний план проблему минимизации числа переменных при разработке описательных моделей (задачи сокращения размерности); с другой – становится все более очевидным, что такая минимизация необходима в разумной мере и должна сопровождаться разработкой новых нетрадиционных подходов к методологии исследований. Анализ накопленного уровня знаний, методов формального описания процессов, а также возможностей технического и программного обеспечения современных ЭВМ выдвигает на передний план направления исследований, связанных с созданием информационного и интеллектуального ресурса на уровне баз знаний, синтезирующих накопленный экспериментальный фонд данных с теоретическими знаниями на макро и микро уровнях.

Целью настоящей работы являлось обобщение опыта решения задач оптимизации металлургических технологий с использованием методологии физико–химического и математического моделирования и критериев, связанных между собой сложными нелинейными зависимостями.

Необходимость комплексного сочетания фундаментальных и прикладных разработок, систематизации фонда фундаментальных экспериментальных исследований и создания соответствующего математического обеспечения неоднократно подчеркивалась в ряде работ специалистов подразделений физико–химического и математического моделирования Института [1,2,3]

Изложение основных материалов исследования. Теоретические основы физико–химического моделирования металлургических расплавов и создание системы анализа и выбора рациональных режимов работы металлургических агрегатов были изложены в сборнике тематических трудов Института приуроченному к 50–летию юбилею [4].

Характерной особенностью этого периода явился вывод проблемы информативного обеспечения теоретической и прикладной металлургии на системный уровень. Институт занял лидирующее положение в выработке концептуальных основ информатизации отрасли и инициировал проведение трех Всесоюзных совещаний по тематике «Базы физико–химических и технологических данных для оптимизации металлургических технологий» – /Днепропетровск, ИЧМ, 1988; Курган, КМИ, 1990; Новокузнецк, СМИ, 1991. Следующее десятилетие отмечалось наложением на динамику научного поиска последствий развала Союза и перехода к рыночным условиям (1990–1999 г.г.). В тоже время вывод проблемы информатизации теоретической и прикладной металлургии на отраслевой уровень требовал дальнейшей интеграции усилий специалистов этого направления. Было бы неоправданным расточительством остановить использование и развитие инновационных разработок в области теоретической и прикладной металлургии, сделанных за десятилетие высококвалифицированными творческими коллективами региональных научных центров.

Организационно этот вопрос решился в Институте путем слияния в марте 1992 года структурно самостоятельной лаборатории физико–химического моделирования металлургических процессов (зав. лаб. ЛФХМ д.т.н. Приходько Э.В.) и группы математического обеспечения НИР лаборатории электронного моделирования под руководством к.т.н. Тогобицкой Д.Н. Наряду с решением вопросов, связанных с созданием и актуализацией баз и банков экспериментальной информации [5–7], основным объектом исследований были технологии физико–химического и математического моделирования металлургических расплавов [8–9], кристаллических и молекулярных соединений многокомпонентных (включая гетерофазные) твердых растворов [10,11], смесей жидких и твердых фаз.

Особенностью успешной плодотворной работы физико–химиков и математиков явились разработки, направленные на создание авторизованного программного продукта [12–14], представленного информационно–аналитическими системами и комплексами, способными перерабатывать

предметно–ориентированные данные в проблемно–ориентированном направлении (рис.1). Эти разработки вывели информационные технологии на новый уровень, который диктовался необходимостью их максимально–го приближения к практике.

Самым эффективным инструментарием стали автоматизированные рабочие места технологов, концептуальная проработка которых осуществлялась в рамках академической тематики по созданию автоматизированных рабочих мест ученых–технологов на базе ЕС ПЭВМ. Активная пропаганда «сплошной компьютеризации» Запада привела к существенному перекосу при ее практической реализации на отечественных предприятиях, которая, в лучшем случае, сводилась к реализации «линейной» стратегии, связанной с насыщением рабочих мест специалистов персональными компьютерами и объединения их в локальные вычислительные сети (ЛВС) АСУП и АСУТП. Построенные по принципу сверху вниз, как вертикаль, для директивного управления службами и цехами они были мало эффективными для решения технологических задач научно–производственного объединения (НПО) комбината. Имеющиеся к тому времени в Институте наработки по программному оформлению активных знаний о прогнозировании поведения физико–химических систем и технологических процессов, реализующие технологию перехода от баз данных к базам знаний [15, 16] были положены в основу предложенной новой концепции компьютеризации научно–технических служб металлургических комбинатов.

Десятилетний период (1990–1999 г.г.) практической реализации поэтапной программы работ, в основу которых была положена предложенная нами стратегия создания интегрированной разветвленной компьютерной сети, включающей базы данных фундаментальной, физико–химической, технологической и нормативно–справочной направленности, интеллектуально–логические элементы анализа, прогнозирования и оптимизации технологических процессов на основе комплексного использования методов физико–химического и математического моделирования завершился созданием и внедрением на Днепровском металлургическом комбинате «Интегрированной системы анализа и оптимизации производства металлопродукции». Уже к 60–летнему юбилею Института были завершены работы сплошной компьютеризации научно–технических служб научно–производственного объединения НПО комбината им. Дзержинского (рис.2), опыт которых изложен в работах [17, 18].

Накопление производственных данных основных переделов производства жидкой стали, наличие фундаментальной физико–химической информации, физико–химических моделей расплавов и процессов их взаимодействия позволили выйти на решение задач оптимизации получения металла с требуемыми свойствами в изменяющихся шихтовых и технологических условиях как в пределах конкретного передела, так и сквозной технологии в комплексе ДЦ–УДЦ–КЦ–УДС [19].



Рис.1. Информационный и интеллектуальный ресурс задач прогнозирования свойств материалов и управления процессами



Рис.2. Система сквозного анализа производства металлопродукции в условиях ДМК.

Интенсивно развиваемые в последнем десятилетии сложные методы многокритериальной и многопараметрической оптимизации со сложными вариантами формирования целевых функций и систем ограничений, обусловленными их алгоритмическим заданием, многомерностью задач, наложением нелинейных условий на входные и результирующие параметры, различным порядком величин и взаимозависимостью переменных позволили выйти на решение задач оптимизации технологий получения чугуна и стали в конкретных шихтовых и технологических условиях. Широкое внедрение в системах АСНИ и АСУТП ряда комбинатов получила система оптимизации шлакового режима доменных печей «Шлак». Комплексное сочетание физико–химического моделирования процессов фазовых превращений железорудных материалов и получаемых из них расплавов, процессов их взаимодействия в зоне первичного шлакообразования и в горне доменной печи, а также разрабатываемого и постоянно развиваемого прикладного и системного математического обеспечения позволили выйти на решение задач прогнозирования состава и свойств продуктов плавки по составу загружаемой шихты и показателям дутьевого режима с реализацией в системе «Шлак» оптимизационного варианта по комплексу критериев (многокритериальная оптимизация) – качеству по сере и кремнию чугуна, производительности и расходу кокса.

Комплексное сочетание методов физико–химического моделирования железорудных материалов на уровне межатомного взаимодействия, прикладного многомерного анализа целенаправленного проецирования функций отклика в заданных координатных сечениях с последующим сглаживанием экспериментальных поверхностей полиномиальными поверхностями стало особо эффективным инструментарием практической реализации решения задач многокритериальной оптимизации комплекса свойств сталей различного назначения – одной из наиболее сложных теоретических и прикладных проблем физического материаловедения.

Для решения этой задачи в отделе развивается новый подход к выбору оптимального состава сплавов, включающий в качестве составных частей [20]:

1) структуризацию общего состава стали на подсистемы с разделением его на части: общую, матричную, легирующую, микролегирующую и примесную подсистемы. Основанием для отнесения элементов к той или иной подсистеме являются предварительные результаты анализа физико–химического и факторного;

2) расчет по содержанию компонентов в каждой подсистеме их химических эквивалентов (Z_i^Y) и структурного параметра (d_i);

3) построение карт поверхностей отклика каждого из свойств в отдельности (σ_B , σ_T , δ , ψ и т.д.) в координатах модельных параметров или концентраций отдельных компонентов;

4) определение соотношения между сопоставляемыми модельными параметрами при котором обеспечивается оптимальное соотношение прочностных и пластических свойств (формирование граничных условий);

5) определение диапазонов изменения концентраций элементов, обеспечивающих регламентируемые соотношения модельных параметров для лимитирующих подсистем в соответствии с граничными условиями п.4.

Ниже представлены примеры реализации методологии анализа. На рис. 3-4 построены поверхности предела текучести стали 20Г2 в зависимости от структурного параметра d матрицы (d_m) (который определяется по содержанию C, Si и Mn в стали) и структурного параметра легирующей подсистемы (определяется комплексом из Cr, Ni, Cu и Ti), а также химического эквивалента легирующей подсистемы и азота в стали. Как следует из этих данных, влияние состава стали на свойства носит сложный нелинейный характер, который выявить и описать другими методами не представляется возможным. Сочетание аналогичных зависимостей для показателей σ_B с σ_T и δ позволяет для каждого конкретного плавочного состава определить наиболее вероятное соотношение их при заданной исходными данными технологии производства проката.

В данном случае четко выявляется существенное зависящее от состава легирующей подсистемы монотонное влияние содержания азота в стали на комплекс ее свойств. Метод построения таких картограмм планируется использовать для уточнения роли каждого из основных легирующих и примесных компонентов. Предлагаемая форма обобщения текущей информации позволит расчетным путем оценивать целесообразность и последствие корректировки содержания любого компонента в стали с целью оценки возможности снижения концентраций дефицитных легирующих элементов без снижения качества продукции.

В настоящее время в рамках комплексного целевого проекта, ведутся работы по созданию информационного и интеллектуального ресурса для многоаспектного решения задач оптимизации технологий, обеспечивающих оптимальное сочетание прочностных и пластических свойств сталей целевого назначения.

Заключение. Эффективность решения задач оптимизации современных металлургических технологий предопределяется уровнем соответствия описательных моделей физико-химическим процессам и современного информационно-математического обеспечения. Создание информационно-аналитических систем многоаспектного анализа работы металлургических агрегатов по основным металлургическим переделам, базирующихся на комплексном сочетании методов физико-химического и математического моделирования, обеспечит реальные перспективы успешного решения задач оптимизации сквозных металлургических технологий производства металлопродукции.

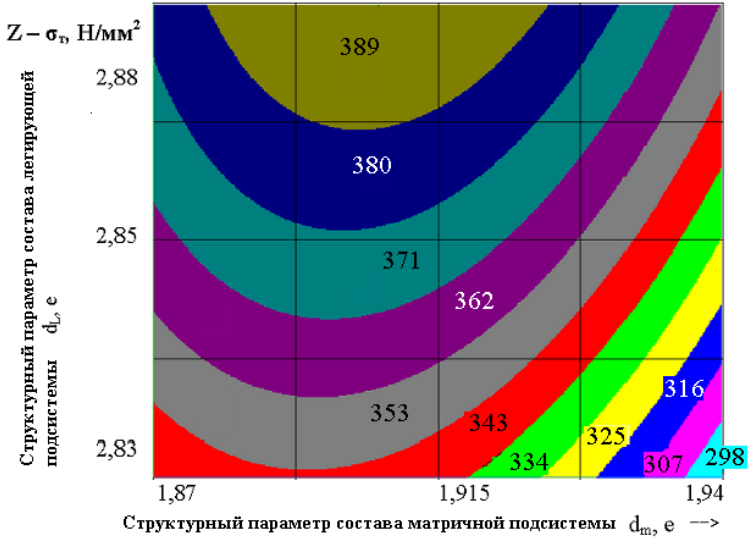


Рис. 3. Карта поверхности отклика $Z=f(x,y)$ для предела текучести σ_r , H/mm^2 .

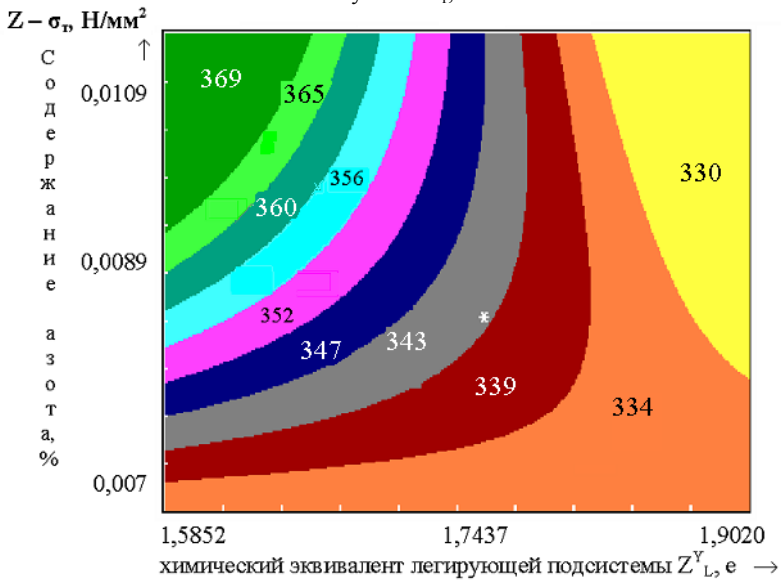


Рис. 4. Карта поверхности отклика $Z=f(x,y)$ для предела текучести σ_r , H/mm^2 .

1. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф.* Оптимизация шихтовых и технологических условий на основе физико–химического и математического моделирования. // В сб. «Совершенствование технологии доменного производства. – М.: Metallurgy, 1988. – С.52–56.
2. *Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф.* Оптимизация состава доменной шихты с использованием физико–химического моделирования с целью экономии кокса. // Экономия кокса в доменных печах. – М.: Metallurgy, 1986. – С.66–70.
3. *Оптимизация шихтовых и технологических условий на основе физико–химического и математического моделирования.* / Э.В.Приходько, А.Ф.Хамхотько, Д.Н.Тогобицкая, М.Н.Байрака // Совершенствование технологии доменного производства. – М.: Metallurgy, 1988. – С.52–56.
4. *Приходько Э.В.* Теоретические основы и практическое применение физико–химических моделей для прогнозирования свойств и результатов взаимодействия многокомпонентных металлургических расплавов. // В кн. : Черная металлургия. Наука–технология–производство. – МЧМ СССР. – М.: Metallurgy, 1989. – С.86–100.
5. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И.* Проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии. //Известия АН СССР. Металлургия. Металлы. – 1991. – №4. – С.217–220.
6. *Тогобицкая Д.Н., Приходько Э.В.* Базы теоретических и технологических данных для информационных технологий в металлургии. // Черная металлургия России и СНГ в XXI веке. Сб. трудов международной конференции. – Изд. Metallurgy. – 1994. –С.178–180.
7. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Базы физико–химических и технологических данных для создания информационных технологий в металлургии. //Металлургическая и горнорудная промышленность. – 1999. – №5. – С.17–21.
8. *Приходько Э.В.* Металлохимия многокомпонентных систем. – М.: Metallurgy, 1995. –320с.
9. *Приходько Э.В.* Методика определения параметров направленного межатомного взаимодействия в молекулярных и кристаллических соединениях.// Металлофизика и новейшие технологии. –1995. –Т.17. –№11. –С.54–62.
10. *Приходько Э.В.* Эффективность комплексного легирования сталей и сплавов. –Киев: Наукова думка, 1995. –295с.
11. *Приходько Э.В.* Теоретические основы физико–химических моделей структуры многокомпонентных материалов. // Изв АН СССР.Металлы. – №6. – 1991. –С.208–214.
12. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И.* Авторизированный компьютерный продукт в отечественной металлургии. / Известия АН России. Металлургия. Металлы. – 1996. – №1.
13. *Тогобицкая Д.Н.* Инструментальные средства для выбора базовых режимов работы металлургических агрегатов и экспертной оценки новых технологических решений. // Прогрессивные процессы и оборудование металлургического производства. Материалы первой международной научно–технической конференции. – Череповец. ЧГУ. – 1998.
14. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Физико–химическое моделирование процессов межатомного взаимодействия в металлургических расплавах. //

- Вестник Приазовского государственного технического университета. Сб. науч. тр. – Вып. 7. – Мариуполь. – 1999. – С. 72–82.
15. *Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Лихачев Ю.М.* Оптимизация металлургических технологий и концепция создания информационно-интеллектуальных систем. // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. Сб. науч. тр. ИЧМ. – Киев. Наукова думка, 1995. – С. 242–249.
 16. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Методология создания базы знаний о свойствах сталей и сплавов // *Металлознавство та обробка металів*. – Киев. – 1996. – №3. – С. 50–55.
 17. *Бродский С.С., Тогобицкая Д.Н., Несвет В.В.* Опыт компьютеризации научно-технических служб Днепровского меткомбината // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. – 1998. – №2. – С. 125–128.
 18. *Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Белькова А.И.* Научные и технологические основы компьютеризации научно-технических служб металлургического комбината. // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. Сб. науч. тр. ИЧМ – Вып. 3. – Киев: Наукова думка, 1999. – С. 325–326.
 19. Сквозная модель производства жидкого металла, включающая технологию доменной и конвертерной плавки, выпечной обработки чугуна и стали / Р.В. Старов, Д.Н. Тогобицкая, В.С. Харахулах, и др. // *Металл и литье Украины*. – Киев. – 1995. – №1. – С. 10–15.
 20. *Козачек А.С., Приходько Э.В.* Исследование влияния различных сочетаний концентраций основных легирующих элементов на механические характеристики высокопрочных сталей. // «*Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*». Сб. научн. тр. ИЧМ. – 2008. – Вып. 18. – С. 216–221.

Статья рекомендована к печати:

Ответственный редактор

раздела «Организация научных исследований и производства»:

академик НАН Украины В.И. Большаков

докт. техн. наук, проф. И.Г. Товаровский

Е.В. Приходько, Д.М. Тогобицька

Комплексне використання методології фізико-хімічного та математичного моделювання для оптимізації металургійних технологій

Метою роботи є вирішення задач оптимізації металургійних технологій з використанням методології фізико-хімічного і математичного моделювання та критеріїв, пов'язаних між собою складними нелінійними залежностями. Наведено приклади використання багаторічного досвіду створення інформаційного і інтелектуального ресурсу. Показано, що використання комплексу розроблених моделей, що створені на основі використання даної методології, дозволяє успішно вирішувати задачі щодо оптимізації наскрізних металургійних технологій та виробництва металопродукції.