

УДК 669.1.046.58:548.517:681.3.001.5

Д.М. Тогобицька, Д.О. Степаненко, А.Ф. Хамхотько, Ю.М. Ліхачов

ІНФОРМАЦІЙНО-АНАЛІТИЧНА СИСТЕМА ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІЗАЦІЙНОЇ ЗДАТНОСТІ МЕТАЛУРГІЙНИХ ШЛАКІВ

Анотація. Описано структуру та показано можливість використання створеної в Інституті чорної металургії НАН України бази експериментальних фізико-хімічних даних про властивості шлакових та оксидних розплавів «Шлак» для дослідження кристалізаційної здатності металургійних шлаків. Представлено алгоритм розрахунку параметрів, що характеризують кристалізаційну здатність шлаків.

Ключові слова: база даних, кристалізація, шлак, комп'ютерна система.

Сучасний стан питання

Фундаментальна і прикладна наука про металургійні розплави накопичила величезну кількість експериментальних та описових даних, що характеризують їх фізико-хімічні властивості, а також їх поведінку в різних металургійних процесах. Накопичені дані містяться на різноманітних засобах зберігання (від паперу до сучасних електронних засобів збереження інформації) і продовжують збільшуватися з кожним днем. Обчислювальна техніка має засоби, що дозволяють їй не тільки раціонально зберігати такі дані, але й зручно оперувати ними – це бази даних (БД).

На сьогоднішній день бази даних, що містять експериментальні дані про властивості металургійних розплавів, в тому числі шлаків і різних оксидних систем, слугують інформаційною основою для теоретичної та прикладної металургії при розробці шляхів вдосконалення існуючих і принципово нових технологій отримання металопродукції необхідної якості при зниженні економічних витрат і поліпшення екологічних показників.

Тому у сучасних умовах розвитку металургійного виробництва найефективнішими є такі наукові розробки, які об'єднують високу економічну ефективність з сучасним рівнем комп'ютеризації

© Тогобицька Д.М., Степаненко Д.О., Хамхотько А.Ф.,
Лихачов Ю.М., 2010

управління технологічними процесами на принципах все більш глибокого розуміння їх фізико-хімічної суті.

Мета дослідження

Метою дослідження є оцінка кристалізаційної здатності металургійних шлаків на підставі експериментальних віскозіметричних даних БД «Шлак» через параметри кристалізації: енергію активації в'язкого плину ($E\eta, \text{кДж/моль}$); кількості мікрогетерогенної твердої фази ($\varphi_{\text{тв}}, \text{об.}\%$); максимальної лінійної швидкості кристалізації ($V_{\text{max}}, \text{мкм/хв}$) і температури при якій вона досягається ($T_{V_{\text{max}}}, \text{K}$).

Постановка задачі

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. Хімічний склад і в'язкість шлаку впливають на його кристалізаційну здатність, як одну із фізико-хімічних властивостей, яка в значній мірі визначає якість металу, що виплавляється, стабільність технологічного процесу плавки і енергетичні витрати процесу. Тому знання про кристалізаційну здатність металургійних шлаків дозволять поліпшити якість металу і удосконалити технології його виробництва, а також розширити область подальшого застосування шлаку в інших галузях промисловості.

Розв'язок цієї 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» [1, 2], яка слугує інформаційною основою при дослідженні кристалізаційної здатності металургійних шлаків на підставі даних про в'язкість шлаків.

Викладення основних матеріалів дослідження

В даний час в базу даних «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. По хімічному складу і призначенню в БД представлені

шлаки практично всіх систем, що використовуються в чорній металургії, враховані еталонні результати основних шкіл вітчизняних і зарубіжних авторів. Крім зазначених 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.

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 перегляд інформації в базі, підготовку, 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 місцезнаходження відповідних характеристик в документах.

На першому етапі створення бази даних «Шлак» в цілях автоматизованої обробки даних був розроблений паспорт експериментальних даних (ПЕД) [3], який забезпечує зберігання даних на машинних носіях за принципом повного тексту.

ПЕД складається з трьох блоків, які повністю характеризують умови експерименту (текстовий опис і числові характеристики) (рис. 1).

Base_Reader

Открыть базу Поиск Просмотр Сервис Выход

Документ 4(1) 20(239)

термометр = вольфрам-молибденовая термопара ЦНИИЧМ-1

химсостав = %CaO 34.8-40.4, Al₂O₃ 18-20.2, SiO₂ 39.8-32.7, MgO 3.7-4.7

шихтовка = пробы натуральных шлаков

гомогенизация = измельчение, отмагничивание

политермичность = охлаждение от 5-6 до 1-2 град/мин при затвердевании

метод = электровискосиметр ротационный

датчик = молибденовый шпindel с головкой диаметром 7 и высотой 11 мм

калибровка = по касторовому маслу, буре и борному ангидриду

погрешность = +/- 2%

шлак(10,7)

CaO	MgO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	MnO	FeO	NiO	Cr ₂ O ₃	TiO ₂	S
34.8	4.2	39.8	18	0.5	0.32	0.03	0.12	0.92	0.66
37	3.7	38.2	18.9	0.51	0.52	0.02	0.3	1.22	0.66
39.8	4.4	36.7	21.6	0.34	0.29	0.03	0.13	0.97	0.96
39.7	4.3	35.3	20.5	0.31	0.22	0.02	0.15	0.78	0.63
38.7	4.6	33.7	20.7	0.24	0.28	0.04	0.11	0.66	1.07

Рис. 1 – Фрагмент бази даних «Шлак» в ІПС

Перший блок описує "Основні відомості" (хімічний склад, основи і добавки, повна бібліографічна довідка, короткий реферат, прізвище і ініціали референта, ступінь опублікованого матеріалу). Блок 2 дає "Характеристику печі" (нагрівач, робочий простір, атмосфера, тигель, термометр), "Характеристику зразку" (склад зміряних зразків, метод підготовки, спосіб гомогенізації, порядок зміни температури) і "Характеристику методики" (метод вимірювання, датчик, калібрування, похибка). Блок 3 складається з фактографічного матеріалу у формі таблиць з вказівкою повного хімічного складу оксидної системи і чисельними експериментальними значеннями його фізичних властивостей, в даному випадку – в'язкість.

Розрахунок параметрів кристалізаційної здатності металургійних шлаків ($E\eta$, φ_{mv} , $V_{\max}$, $T_{V_{\max}}$) здійснюється на підставі даних БД «Шлак» про їх хімічний склад (табл. 1) та розрахованих на його підставі модельних параметрів структури шлаку (Δe , ρ) [4, 5], а також відповідних йому експериментальних віскозіметричних даних при заданих значеннях температури (табл. 2)

Таблиця 1

Хімічний склад (мас.%) та модельні параметри структури шлаку

SiO ₂	CaO	MgO	Al ₂ O ₃	FeO	MnO	S	Δe	ρ
41,74	46,86	3,08	4,83	0,68	1,9	1,1	-2,419	0,703

Таблиця 2

В'язкість шлаку при заданих температурах

$T, ^\circ C$	1600	1550	1500	1450	1400	1350	1300	1280	1250	1200
$\eta, Pa \cdot s$	0,16	0,19	0,23	0,27	0,35	0,51	0,73	0,89	1,22	4,0

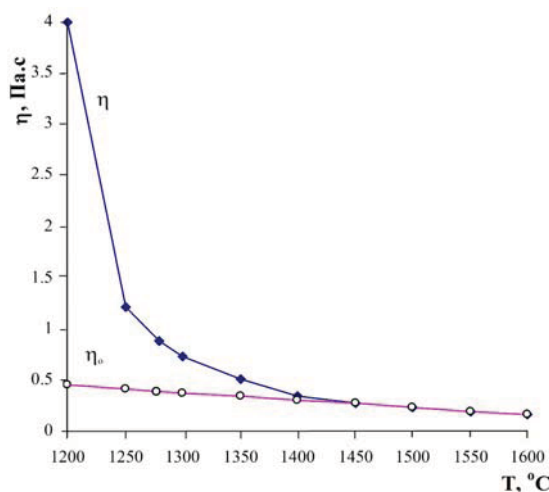


Рис. 2 – Залежність в'язкості шлаку від температури

Кількість мікрогетерогенної твердої фази ($\varphi_{мс.}, об. \%$), що виділяється при охолодженні шлаку розраховується за формулою

$$\varphi_{мс.} = \frac{(\eta - \eta_0)}{\eta} \cdot 100, \quad (1)$$

на підставі даних графіку залежності в'язкості шлаку від температури $\eta = f(T)$ (рис. 2). Величини η відповідають експериментальним даним (табл. 2), а η_0 - відповідає таким значенням в'язкості, які знаходяться на прямолінійному відрізку графіка залежності $\eta = f(T)$.

Перетворення координат залежності $\eta = f(T)$ в $\lg \eta - \frac{10^4}{T}$, як показано на рис. 3 більш інформативно, що дозволяє розрахувати енергію активації в'язкого плину шлаків ($E\eta$), яка характеризує структурні зміни в шлаку при його охолодженні і температуру ліквідус (T_l) для заданого металургійного шлаку (табл. 1, 2).

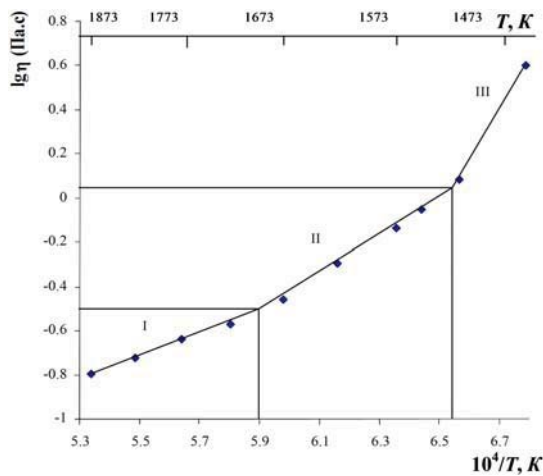


Рис. 3 – Графік залежності $\lg \eta = f\left(\frac{10^4}{T}\right)$
(температура за шкалою Кельвіна)

Як видно з рис. 3 плавна крива залежності $\eta = f(T)$ (рис. 2) трансформується в ламану пряму з трьома прямолінійними відрізками і двома зламами. Перший злам, слідуючи з високотемпературної області, відповідає T_l (1695 К).

$E\eta$ розраховується окремо для кожного відрізка ламаної прямої графіка залежності $\lg \eta = f\left(\frac{10^4}{T}\right)$ за формулою

$$E\eta = T_1 \cdot T_2 \frac{19,155 \cdot (\lg \eta_1 - \lg \eta_2)}{1000 \cdot (T_2 - T_1)}. \quad (2)$$

Температура максимальної швидкості кристалізації ($T_{V_{\max}}$) розраховується на підставі $E\eta$ і T_L по формулі

$$T_{V_{\max}} = T_L \left(1 - \frac{RT_L}{E\eta + RT_L} \right), \quad (3)$$

де R – універсальна газова постійна ($8,31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$).

Використання методик [4] дозволило отримати рівняння для прогнозування максимальної швидкості кристалізації металургійних шлаків за їх хімічним складом «згорнутому» у вигляді модельних параметрів структури Δe – середньостатистична кількість електронів, що локалізуються на спільних орбіталях у напрямку зв'язку катіон – аніон (виконує функцію хімічного еквіваленту системи) і ρ – показник стехіометрії системи, що дорівнює відношенню чисел катіонів до числа аніонів.

$$\lg V_{\max} = -28,424 - 0,618\Delta e + 42,388\rho, \quad (4)$$

$$R = 0,865; \quad \mu = 26,4; \quad S_{\text{кв.}} = 12,9\%$$

де R – коефіцієнт кореляції, μ – критерій надійності, $S_{\text{кв.}}$ – залишкове середньоквадратичне відхилення, %

Викладений алгоритм розрахунку параметрів кристалізаційної здатності металургійних шлаків [6] програмно реалізований у вигляді комп'ютерної системи «РКЗ-1».

Результат розрахунку параметрів кристалізаційної здатності для заданого шлаку (табл. 1, 2), з використанням програми «РКЗ-1» представлено на рис. 4, 5.

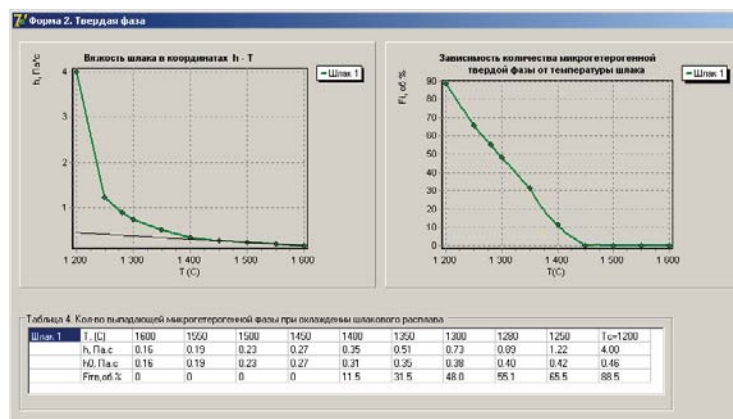


Рис. 4 – Результат розрахунку $\varphi_{\text{те.}}$ програми «РКЗ-1»

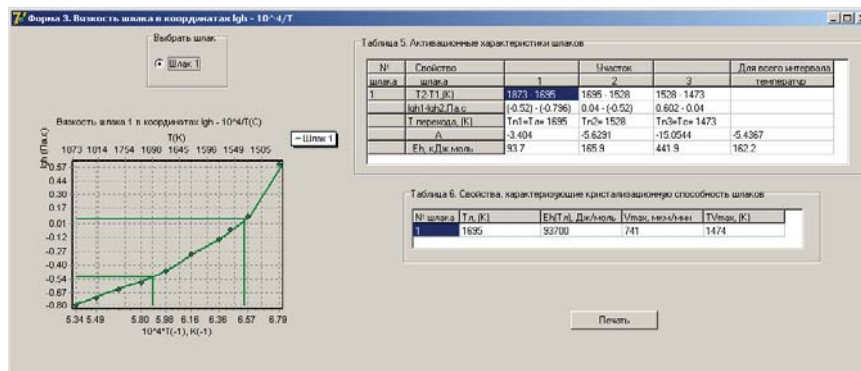


Рис. 5 – Результат розрахунку $E\eta$, T_l , $T_{V_{max}}$ і V_{max} програми «РКЗ-1»

Висновки

1. Описано структуру та принципи роботи з базою даних «Шлак».
2. Показана можливість використання бази вискозіметричних даних «Шлак» для дослідження кристалізаційної здатності металургійних шлаків.
3. Для прогнозування максимальної швидкості кристалізації шлаків на підставі їх хімічного складу запропоновано рівняння.
4. Представлено алгоритм розрахунку параметрів кристалізаційної здатності, який реалізовано у вигляді комп'ютерної системи «РКЗ-1».

ЛІТЕРАТУРА

1. Хамхотью А.Ф. Фактографические базы физико-химических данных в рамках банка данных «Металлургия» / А.Ф. Хамхотью, Т.Б. Рудненко, В.Л. Столярова и др. // Изв. АН СССР. Металлы. -1991. -№4. -С. 221-223.
2. Приходько Э.В. Базы физико-химических и технологических данных для создания информационных технологий в металлургии / Э.В. Приходько,
3. Д.Н. Тогобицкая // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 1999. - №3. - С. 17-21.
4. Жмойдин Г.И. О паспортизации экспериментальных материалов банка данных «Металлургия» / Г.И. Жмойдин, Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая // Изв. ВУЗов. ЧМ. - 1988. - №8. - С. 136-139.
5. Приходько Э В. Моделирование структуры при исследовании связи между составом и свойствами оксидных расплавов / Э.В.Приходько. // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. - 1980. -Т.16, №5. -С.900-906.
6. Приходько Э.В. Строение и физико-химические свойства металлургических шлаковых расплавов / Э.В. Приходько, А.Ф. Хамхотью, Д.Н. Тогобицкая // Экспресс-информация. Ин-т «Черметинформация». - М.: 1983. - 21 с.
7. Тогобицкая Д.Н. Использование базы вискозиметрических данных для расчета кристаллизационной способности металлургических шлаков / Д.Н. Тогобицкая, А.Ф. Хамхотью, Ю.М. Лихачев, Д.А. Степаненко // Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сборник научных трудов. - Выпуск 18. - 2008. - С. 200-209.