

УДК 669:536

Е.П. Морозенко, К.Д. Ильченко

**ГРАФИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ
ИССЛЕДОВАНИЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ
МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ**

Аннотация. Выполнены исследования теплофизических свойств трехкомпонентных смесей металлургических материалов, результаты представлены в виде математических моделей, выполнена их графическая визуализация. Ключевые слова: теплофизические свойства, шихты, графическая визуализация.

Введение. Одной из задач теплофизики является изучение зависимостей теплофизических свойств от состава и температуры. Эти зависимости необходимы для создания новых составов шихт и улучшения существующих, как важнейшей части физико-химического анализа, и в других случаях, например, с целью энергосбережения (поиска состава шихт с минимальной теплоемкостью) или улучшения технологических характеристик шихт (поиска состава шихт с максимальным коэффициентом теплопроводности).

Математическое планирование эксперимента является одним из мощных факторов повышения эффективности исследований. Планирование эксперимента при изучении теплофизических свойств шихтовых материалов в зависимости от состава и температуры применяется авторами достаточно давно. Поскольку любая шихта является системой, состоящей из более чем одного компонента, методы планирования в этом случае по сути всегда приводят к построению математических моделей диаграмм состав-свойство.

Состояние вопроса. Разработка и создание новых шихтовых материалов требуют определения их теплофизических характеристик. Последние зависят от большого числа факторов и не поддаются аналитическому расчету. Теплофизический эксперимент является единственным источником получения знаний о теплофизических свойствах. Опыт, накопленный авторами, говорит об эффективности

использования планирования эксперимента при исследовании теплофизических свойств многокомпонентных смесей материалов металлургии и коксохимии. Однако в области металлургических исследований планирование эксперимента применяется мало, тогда как в других областях знаний его применение гораздо шире. Особой многочисленностью выделяются работы в области металловедения (43), органической химии (30), технологии строительных материалов (29). В области металлургии количество работ с использованием симплекс-решетчатого планирования весьма ограничено: в металлургии их всего пять, в литейном производстве – десять [1].

Расширение круга исследователей, применяющих методы симплекс-решетчатого планирования, приведет к получению новых данных, к постановке новых задач и прогрессу в данном важном направлении исследований.

Постановка задачи. Основополагающими работами в планировании эксперимента на симплексе являются работы Анри Шеффе, в частности [2], в которой предложены решетчатые планы и соответствующие полиномы Шеффе, которые до настоящего времени являются достаточно распространенными в практике исследований.

Симплекс-решетчатый метод позволяет получить аналитическое выражение (математическую модель) зависимости свойств от состава в виде отрезков степенного ряда. Дальнейшие теоретические разработки [3] позволили включить в симплекс-решетчатое планирование несмесевые, количественные факторы. Для теплофизических исследований характерно включение в модели в качестве несмесевого фактора температуры.

При использовании данного метода предполагается, что исследуемое свойство не зависит от общего количества смеси и является непрерывной функцией состава и температуры. Так как построенная на основе экспериментальных данных математическая модель зависимости свойств от состава и температуры есть лишь оценка функции отклика в области эксперимента, необходимо провести статистический анализ полученной модели на адекватность. Последняя для каждой модели устанавливается по дополнительным контрольным опытам.

Таким образом, задачей данной работы являлось исследование теплофизических свойств трехкомпонентных шихт передельного и

товарного силикомарганца в зависимости от состава и температуры, нахождение состава шихт с минимальной теплоемкостью и максимальным коэффициентом теплопроводности, получение математических моделей зависимостей свойств от состава и температуры и их графическая визуализация.

Методика исследования. Исследованию подвергались шихты передельного и товарного силикомарганца. Передельный силикомарганец получают совместным восстановлением марганца и кремния из трехкомпонентной шихты, в состав которой входят малофосфористый шлак (МФШ), кварцит и кокс. Шихта товарного силикомарганца состоит из кокса, агломерата II сорта и кварцита. Расход электроэнергии на нагрев и плавление шихты тем меньше, чем ниже ее теплоемкость, а электрическая дуга тем устойчивее, чем ниже коэффициент теплопроводности шихтового материала.

Методику исследования покажем на примере шихты передельного силикомарганца. При постановке эксперимента использована матрица планирования, представленная в табл.1.

Таблица 1

Матрица планирования и индексация откликов

Опыт	Кокс (x_1)	Кварцит (x_2)	МФШ (x_3)	Индексация откликов		
				i	c	λ
1	1	0	0	i_1	c_1	λ_1
2	0	1	0	i_2	c_2	λ_2
3	0	0	1	i_3	c_3	λ_3
4	0,5	0,5	0	i_{12}	c_{12}	λ_{12}
5	0,5	0	0,5	i_{13}	c_{13}	λ_{13}
6	0	0,5	0,5	i_{23}	c_{23}	λ_{23}
7	0,333	0,333	0,333	i_{123}	c_{123}	λ_{123}

Для включения в зависимость температуры в качестве количественного несмесевого фактора применена обобщенная математическая модель, полученная по методу прямых произведений [3]. Квадратная модель для трех смесевых факторов имеет вид (1)

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1t + b_{21}x_2t + b_{31}x_3t + b_{121}x_1x_2t + b_{131}x_1x_3t + b_{231}x_2x_3t \quad (1)$$

Определение теплофизических свойств производилось по методу баланса теплоты в образце [4]. При этом применялось равномерное дублирование, в каждой точке плана опыт повторялся дважды.

Результаты исследования. Теплофизические свойства определялись в соответствии с матрицей планирования (табл. 1). В

табл. 2 представлены результаты определения теплофизических свойств кокса, кварцита, малофосфористого шлака.

Таблица 2

Теплофизические свойства компонентов i – энтальпия [кДж/кг];

c – теплоемкость [кДж/кг·К];

λ – коэффициент теплопроводности [Вт/м·К]

t	Кокс (-19,39) ^ж			Кварцит (-3,91)			Малофосфористый шлак (-11,33)		
	i	c	λ	i	c	λ	i	c	λ
100	29	0,290	0,365	30	0,303	0,514	120	1,201	1,990
200	118	0,590	0,448	78	0,389	0,558	208	1,041	1,538
300	202	0,675	0,496	131	0,437	0,609	316	1,053	1,315
400	330	0,725	0,586	200	0,500	0,679	426	1,066	1,145
500	433	0,865	0,759	267	0,535	0,729	529	1,085	1,006
600	397	0,662	0,921	337	0,562	0,741	634	1,057	0,904
700	470	0,672	1,093	398	0,569	0,734	721	1,031	0,831
800	573	0,716	1,127	456	0,570	0,708	798	0,995	0,775
900	739	0,814	0,140	506	0,562	0,683	855	0,949	0,724
1000	1084	1,084	1,087	553	0,553	0,658	903	0,903	0,697
1100	1588	1,444	1,084	609	0,554	0,679	957	0,870	0,700

^ж Значения в скобках – убыль массы, %.

В результате обработки экспериментальных данных были получены математические модели зависимости теплофизических свойств трехкомпонентных шихт для выплавки силикомарганца от компонентного состава и температуры нагрева.

$$\begin{aligned}
 i = & 0,303x_1t + 0,369x_2t + 1,167x_3t - 0,344x_1x_2t - \\
 & - 2,224x_1x_3t - 2,048x_2x_3t + 0,473 \cdot 10^{-3} x_1t^2 + \\
 & + 0,224 \cdot 10^{-3} x_2t^2 - 0,244 \cdot 10^{-3} x_3t^2 + 0,770 \cdot 10^{-3} x_1x_2t^2 + \\
 & + 1,594 \cdot 10^{-3} x_1x_3t^2 + 1,852 \cdot 10^{-3} x_2x_3t^2, \text{кДж / кг}; \quad (2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 c = & 0,303x_1 + 0,369x_2 + 1,167x_3 - 0,344x_1x_2 - \\
 & - 2,224x_1x_3 - 2,048x_2x_3 + 0,473 \cdot 10^{-3} x_1t + \\
 & + 0,224 \cdot 10^{-3} x_2t - 0,244 \cdot 10^{-3} x_3t + 0,770 \cdot 10^{-3} x_1x_2t + \\
 & + 1,594 \cdot 10^{-3} x_1x_3t + 1,852 \cdot 10^{-3} x_2x_3t, \text{кДж / кг} \cdot \text{град}; \quad (3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda = & 0,302x_1 + 0,581x_2 + 1,739x_3 + 0,158x_1x_2 - \\ & - 0,726x_1x_3 - 3,516x_2x_3 + 0,743 \cdot 10^{-3} x_1t + \\ & + 0,137 \cdot 10^{-3} x_2t - 0,114 \cdot 10^{-3} x_3t + 0,064 \cdot 10^{-3} x_1x_2t + \\ & + 2,370 \cdot 10^{-3} x_1x_3t + 5,606 \cdot 10^{-3} x_2x_3t, \text{ Вт/м} \cdot \text{град}. \end{aligned} \quad (4)$$

Статистический анализ полученных моделей показал, что все модели являются адекватными, а все коэффициенты моделей – значимыми. Для аналитической и геометрической интерпретации функции отклика теплофизических свойств в области оптимума выполнено каноническое преобразование моделей (2-4). Канонические уравнения (5-7) записаны для температуры 700 °С.

$$i - 583,90 = 779,22x_1^2 - 139,98x_2^2 \quad (5)$$

$$c - 0,319 = 1,110x_1^2 - 0,199x_2^2 \quad (6)$$

$$\lambda - 5,040 = -0,020x_1^2 - 1,370x_2^2 \quad (7)$$

В соответствии с классификацией [5] тип поверхности отклика энтальпии и теплоемкости шихты в процессе нагрева – гиперболический параболоид или «седло», контурные кривые равных значений – гиперболы, в центре поверхности – минимакс.

Тип поверхности отклика коэффициента теплопроводности шихты – эллипсоид. Контурные кривые в этом случае являются эллипсами, в центре которых находится максимум. Графически поверхность отклика теплофизических свойств представлена сериями контурных кривых равных значений функции отклика на симплексах $y_i(x)$ при $T_i = const$. В каждом сечении свойства зависят только от компонентного состава шихты, а при переходе от одного сечения к другому – и от температуры. Результаты расчета представлены в виде диаграмм «состав- свойство» для температур 100 - 1100 °С через каждые 100 °С.

Контурные кривые равных значений теплофизических свойств шихты передельного силикомарганца для температуры 1100 °С представлены на рис. 1-3.

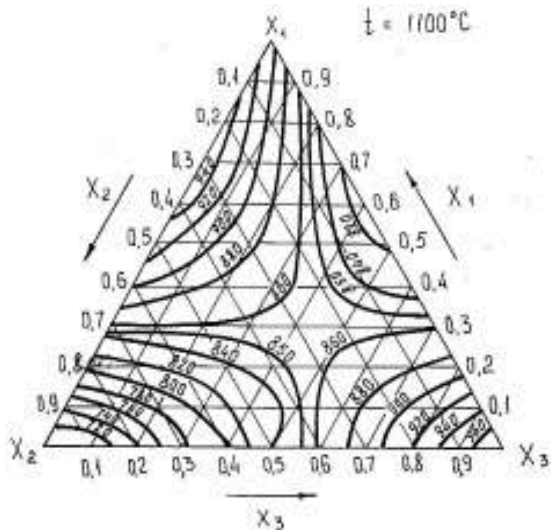


Рис. 1- Изолинии энтальпии шихты передельного силикомарганца при $t = 1100\text{ }^{\circ}\text{C}$

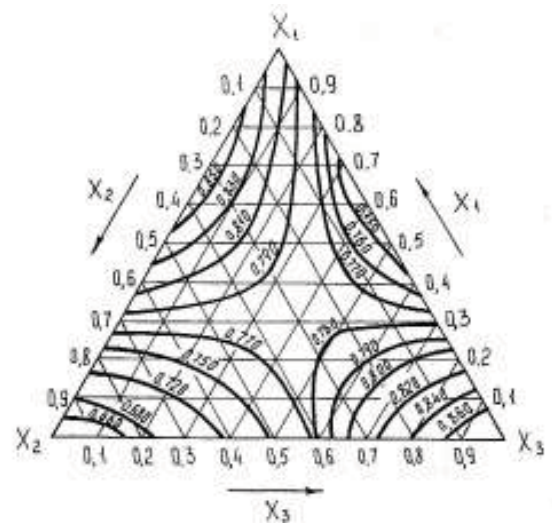


Рис. 2- Изолинии теплоемкости шихты передельного силикомарганца при $t = 1100\text{ }^{\circ}\text{C}$

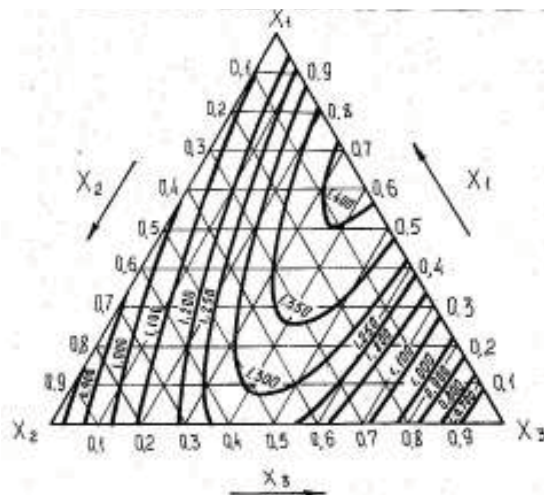


Рис. 3- Изолинии коэффициента теплопроводности шихты передельного силикомарганца при $t = 1100\text{ }^{\circ}\text{C}$

В результате графического исследования найден состав шихты для выплавки передельного силикомарганца с минимальной энтальпией и максимальным коэффициентом теплопроводности. Содержание кокса в шихте рекомендуется в пределах 15-30 %, кварцита – 45-15 %, малофосфористого шлака – 40-55 %.

Аналогичным образом была исследована шихта товарного силикомарганца, в результате чего были получены следующие модели зависимости теплоемкости и коэффициента теплопроводности от состава и температуры

$$\begin{aligned}
c = & 0,796x_1 + 0,111x_2 + 1,127x_3 - 0,490x_1x_2 - 2,922x_1x_3 - \\
& - 1,552x_2x_3 - 0,104 \cdot 10^{-2} x_1t + 0,180 \cdot 10^{-2} x_2t - 0,142 \cdot 10^{-4} x_3t - \\
& - 0,452 \cdot 10^{-2} x_1x_2t + 0,445 \cdot 10^{-2} x_1x_3t - 0,168 \cdot 10^{-2} x_2x_3t + \\
& + 0,102 \cdot 10^{-5} x_1t^2 - 0,262 \cdot 10^{-6} x_2t^2 + 0,300 \cdot 10^{-5} x_1x_2t^2 - \\
& - 0,204 \cdot 10^{-5} x_1x_3t^2 + 0,524 \cdot 10^{-6} x_2x_3t^2, \text{кДж/кг} \cdot \text{град} \quad (8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda = & 0,918x_1 - 0,100x_2 + 1,474x_3 - 0,616x_1x_2 - 2,860x_1x_3 - \\
& - 1,220x_2x_3 - 0,746 \cdot 10^{-3} x_1t + 0,400 \cdot 10^{-2} x_2t - 0,876 \cdot 10^{-4} x_3t - \\
& - 0,048 \cdot 10^{-2} x_1x_2t + 0,370 \cdot 10^{-2} x_1x_3t - 0,434 \cdot 10^{-2} x_2x_3t + \\
& + 0,696 \cdot 10^{-6} x_1t - 0,142 \cdot 10^{-5} x_2t + 0,375 \cdot 10^{-5} x_1x_2t^2 - \\
& - 0,140 \cdot 10^{-5} x_1x_3t^2 + 0,290 \cdot 10^{-5} x_2x_3t^2, \text{Вт/м} \cdot \text{град} \quad (9)
\end{aligned}$$

На рис. 4,5 представлены изолинии теплоемкости и коэффициента теплопроводности шихты товарного силикомарганца при температуре 1000 °С.

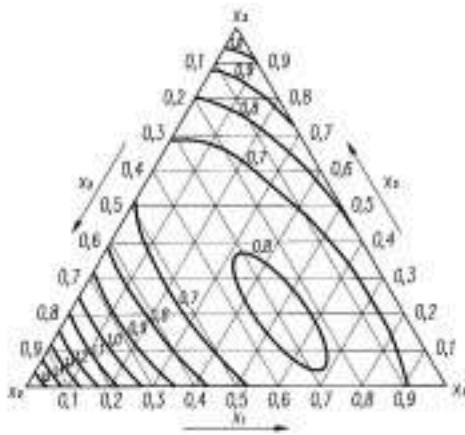


Рис. 4- Изолинии теплоемкости шихты товарного силикомарганца при $t = 1000$ °С

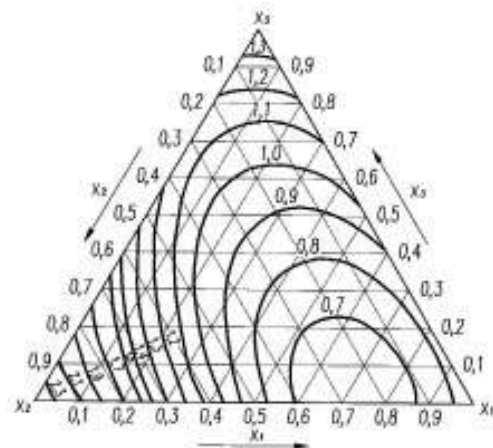


Рис. 5- Изолинии коэффициента теплопроводности шихты товарного силикомарганца при $t = 1000$ °С

Поверхности теплоемкости и коэффициента теплопроводности шихты товарного силикомарганца представляют собой эллиптический параболоид с одной экстремальной областью. Минимальное значение теплоемкости $c = 0,12$ кДж/кг·град наблюдается при температуре 100 °С с концентрацией материалов кокс, агломерат, кварцит соответственно 0,25; 0,5; 0,25.

Минимальное значение коэффициента теплопроводности $\lambda=0,18$ Вт/м·град наблюдается при температуре 100 °С и концентрации компонентов кокс, агломерат, кварцит – 0,25; 0,85; 0,10. С повышением температуры происходит увеличение теплофизических свойств.

Выводы. Применение планирования эксперимента к исследованию теплофизических свойств позволяет получить гораздо большее количество достоверной и ценной информации, чем традиционные методы теплофизического эксперимента.

Полученные для каждой 100 °С диаграммы «состав-свойство» позволяют прогнозировать теплофизические свойства трехкомпонентных шихт передельного и товарного силикомарганца любого состава в исследованных пределах температур и выбирать компонентный состав шихты для заданных значений теплофизических свойств.

Необходимо отметить, что содержание моделей богаче содержания диаграмм. На диаграммах по изотермическим разрезам изображена лишь часть полученных данных. Разница в возможностях модели и графики возрастает с увеличением числа компонентов шихты. Однако, графическая визуализация моделей теплофизических свойств (энтальпии, теплоемкости и коэффициента теплопроводности) позволяет избежать сложного канонического преобразования моделей зависимости теплофизических свойств от состава и температуры с последующим анализом типа поверхности отклика.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чмелева Т. А. Планирование эксперимента при построении диаграмм состав-свойство (обзор) / Т. А. Чмелева, Ю. П. Адлер // Применение математических методов для исследования многокомпонентных систем. - М.: Металлургия, 1974.-С. 11-42.
2. Scheffe H. Experiments with Mixtures / H. Scheffe // Journal of Royal Statistical Society, Series B. - 1958. - Vol. 20. -P. 344-360.
3. Гогоберидзе Н. В. О методе прямых произведений в планировании эксперимента для изучения сложных систем / Н. В. Гогоберидзе, И. Г. Зедгинидзе // Применение математических методов для исследования многокомпонентных систем. - М.: Металлургия, 1974.-С. 128-133.
4. Ильченко К. Д. Планирование эксперимента при исследовании теплофизических свойств шихтовых материалов металлургии / К. Д. Ильченко, Е. П. Морозенко.-Днепропетровськ: Січ, 2004.-176 с.
5. Бондарь А. Г. Планирование эксперимента в химической технологии / А. Г. Бондарь, Г. А. Статюха. - Киев: Выща шк., 1976.- 184 с.