ISSN 2077-1304. Met. lit'e Ukr., vol.27, 2019, №7-9 (314-316), 33-42 https://doi.org/10.15407/steelcast2019.07.033

УДК 669.02/09.001.57:669.16:669.18

Д.Н. Тогобицкая, д-р техн. наук, проф., зав. отделом, e-mail: dntog@ukr.net, https://orcid.org/0000-0001-6413-4823

А.И. Белькова, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., e-mail: alla2904b8@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8519-9351

Д.А. Степаненко, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., e-mail: d.gorodenskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0184-8295

А.Ф. Петров, науч. сотр., https://orcid.org/0000-0001-7855-9267

Институт черной металлургии им. З.И. Некрасова НАН Украины (Днепр, Украина)

Методологические основы физико-химического моделирования и оптимизации процессов производства чугуна и стали

Посвящается памяти
Эдуарда Васильевича Приходько

В работе обобщен накопленный в Институте черной металлургии им. З.И. Некрасова НАН Украины (ИЧМ) опыт решения задач оптимизации металлургических технологий с использованием методологии физико-химического и математического моделирования, базовым ядром которого является разработанная Э.В. Приходько оригинальная методика моделирования шлаковых и металлических расплавов на основе концепции направленной химической связи. Рассмотрены особенности создания системы информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии на основе ретроспективного фонда экспериментальных фундаментальных физико-химических данных и фонда моделей металлургических систем и процессов их взаимодействия на макро- и микроуровнях. Описаны возможности разработанного в ИЧМ оригинального системного математического обеспечения создания документально-фактографических баз данных и прикладных программ оценки достоверности «зашумленных» многомерных массивов физико-химических и технологических данных на основе современных методов статистики и визуализации данных в различных сечениях путем целенаправленного проецирования.

Изложены принципы взаимодействия баз данных и базы моделей в режиме взаимной дополнительности. Обоснован выбор физико-химических критериев путем «свертки» информации о химическом составе многокомпонентных железорудных материалов, шлаковых и металлических расплавов и описаны подходы к прогнозированию их физико-химических свойств по схеме состав-структура-свойства. Рассмотрены вопросы учета влияния микронеоднородности строения металлических расплавов на формирование термодинамических и теплофизических свойств ферросплавов и специальных сплавов. Предложена методология создания систем управления качеством металлопродукции и методов многоцелевой оптимизации металлургических процессов, путем построения комплексных критериев показателей их эффективности. На примере задачи оптимизации доменной шихты предложен обобщенный критерий многоцелевой эффективности, обеспечивающий требуемое качество продуктов плавки и ее технико-экономические показатели.

Ключевые слова: *базы данных, база моделей, металлургические расплавы, физико-химические свойства, критерии, многоцелевая многопараметрическая оптимизация.*

Проблема повышения качества металла при низкой его себестоимости и требуемых экологических показателях является стратегической задачей металлургической промышленности. Фундаментальная наука в настоящее время накопила огромный арсенал знаний для глубокого понимания и объяснения механизма происходящих процессов при выплавке чугуна и стали, формирования физико-химических свойств готовой продукции. Определяющую роль в ликвидации разрыва между фундаментальными и прикладными исследованиями призваны сыграть современные информационные технологии.

Раскрывая понятие «структура вещества», материаловедение оперирует значительным числом факторов макро- и микромасштаба, взаимосвязанных между собой столь сложным образом, что дифференциация влияния каждого из них на свойства практически на всех стадиях производства металлопродукции во многих случаях невозможна.

Поэтому многокомпонентные металлургические расплавы и получаемая из них металлопродукция на заключительных этапах на языке кибернетики можно охарактеризовать как плохо организованные, диффузные системы.

В этой связи особую актуальность приобретают вопросы познания физико-химической природы металлургических расплавов, что является основой для математического моделирования металлургических процессов на макро- и микроуровнях по схеме «состав-структура-свойства».

Изложение основных материалов исследования. Необходимость комплексного сочетания фундаментальных и прикладных разработок, систематизации фонда фундаментальных экспериментальных исследований и создания соответствующего математического обеспечения производства чугуна и стали неоднократно подчеркивалась в ряде работ специалистов подразделений физико-химического и математического моделирования Института. Теоретические основы физико-химического моделирования металлургических расплавов и создание системы анализа и выбора рациональных режимов работы металлургических агрегатов были изложены в сборниках тематических трудов Института, приуроченных к юбилейным датам Института [1–3].

Характерной особенностью этого периода явился вывод проблемы информационного 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.

На первый план выдвигался комплекс вопросов, связанных с созданием и актуализацией баз и банков экспериментальной информации. Уже к 1985 г. ИЧМ располагал мощным математическим обеспечением решения прикладных задач в части создания информационно-аналитических систем, включающих базы фундаментальных данных о свойствах металлургических расплавов, фонд математических и физико-химических моделей доменного, сталеплавильного производств и их фрагментов, современное системное обеспечение. Особую роль в обеспечении системы научных исследований ИЧМ играли оригинальные средства обработки «зашумленной» информации, реализующие средства многомерного сравнительного анализа – факторного анализа и таксономии, базирующихся на теории «размытых» множеств. Наличие этих разработок предопределило ведущую роль Института в решении отраслевой проблемы – создании системы информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии в рамках межотраслевого Банка данных «Металлургия» (БДМет).

На базе разработок Института 1988 г. было проведено Всесоюзное межотраслевое совещание «базы физико-химических и технологических данных для оптимизации металлургических технологий» с заказными докладами ведущих специалистов ИЧМ в области информационных технологий (Э.В. Приходько – принципы физико-химического моделирования металлургических расплавов, И.Г. Товаровский – особенности создания баз технологических данных, Д.Н. Тогобицкая – создание системного и прикладного обеспечения (БДМет)), которые курировали впоследствии эти направления в составе Совета БДМет при Госкомитете по науке и технике.

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. 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].

Следующее десятилетие отмечалось наложением на динамику научного поиска последствий развала Союза и перехода к рыночным условиям (1990–1999 гг.). 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 десятилетия 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-р техн. наук Э.В. Приходько) и группы математического обеспечения НИР лаборатории электронного моделирования под руководством канд. техн. наук Д.Н. Тогобицкой. Движущим мотивом этого слияния была общность идейных позиций руководителей двух коллективов (фото) при решении вопросов, связанных с поисками эффективных путей работы с экспериментальной информацией и ее теоретическим осмысливанием.

Первое направление разработок было связано с созданием и актуализацией баз и банков экспериментальной информации. На протяжении всей деятельности отдела физико-химических проблем базы фундаментальных данных постоянно актуализировались как в части собственно информационного

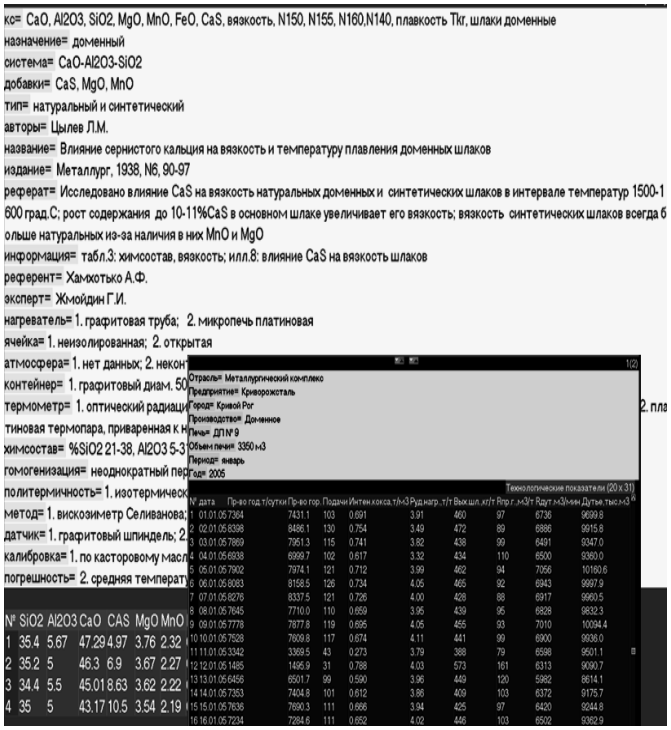

Рис. 1. Машинные паспорта базы «Шлак» и технологической информации

Рис. 2. Видеокадр базы «Шлак» по запросу «авторы» – «система»

Рис. 3. Структура информационного ресурса о свойствах железорудных материалов, шлаковых и металлических расплавов «Расплав»

фонда, так и математического обеспечения гибкой работы с информацией – разработка программ оперативного поиска (оригинальная информационно-поисковая система (ИПС) ведения документально-фактографических баз разработана Ю.М. Лихачевым) в соответствии со строгими правилами паспортизации [5], так и методов обработки данных – соответствующего прикладного математического обеспечения, многопланового проецирования данных, выделения трендовой составляющей, локализации отдельных областей и сечений, матричных методов многомерного сравнительного анализа (факторный анализ, таксономия, операции с размытыми множествами), оригинальных алгоритмов оптимизации.

В последнее время авторами [6] создана новая база данных «Ферросплавы», содержащая информацию о теплофизических свойствах отечественных и зарубежных марок, ферросплавов.

На рис. 1–3 представлены отдельные фрагменты информационного обеспечения Банка данных «Металлургия». На рис. 4 – фрагменты прикладного обеспечения.

К настоящему времени база данных «Шлак» пополнена новой информацией о фазовом составе систем: $CaO-Al_2O-SiO_2$, $CaO-SiO_2-Al_2O_3-MgO$, $SiO_2-MgO-Al_2O_3$, $MgO-CaO-Al_2O_3$, $SiO_2-CaO-MgO$, – в процессе их кристаллизации и о свойствах образующихся при этом минералов, по данным авторов В.Г. Воскобойникова, В.Е. Васильева, А.Г. Русаковой (рис. 5). Также были введены в базу данные о вискозиметрических свойствах шлаковых расплавов, содержащих различные углеродистые добавки, в частности по данным, что особенно важно в связи с сокращением природного газа и его замены углеродсодержащими добавками, в частности пылеугольным топливом (ПУТ).

Данные о фазовом составе оксидных систем и физико-химических свойствах отдельных фаз представляют особый интерес при изучении минералогического состава конечных доменных шлаков, что дает определенные представления о природе шлаковых расплавов. Знание минералогического состава необходимо также и для дальнейшего использования шлаков в качестве строительного сырья.

Второе направление разработок по созданию основ оптимизации металлургических процессов связано с созданием интеллектуального ресурса – базы моделей структуры свойств железорудных материалов, получаемых расплавов на различных стадиях получения полупродукта и готовой металлопродукции (рис. 3).

Успешное решение этих задач, на наш взгляд, связано с прогнозированием физико-химических, механических, эксплуатационных свойств металла путем математического моделирования неразрывной

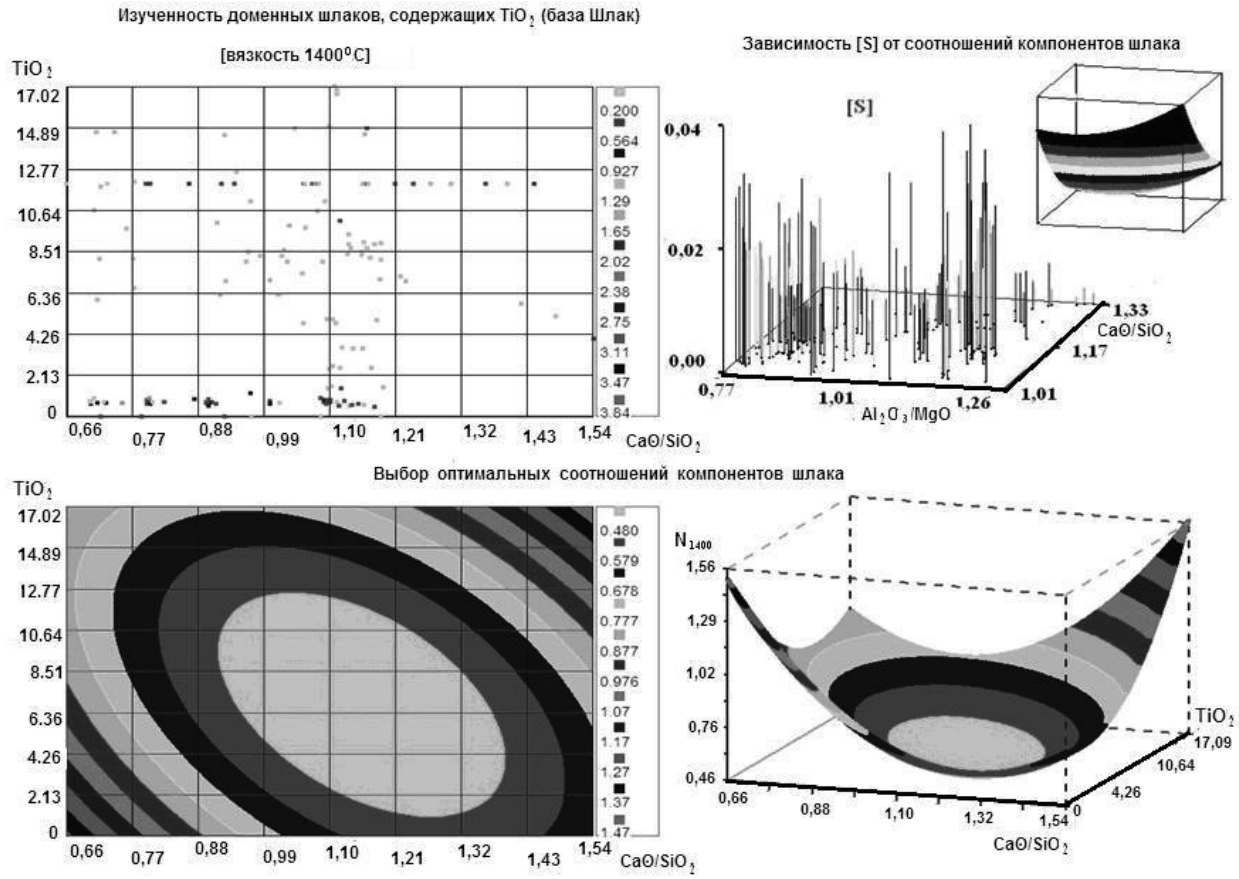

Рис. 4. Фрагменты подсистемы обработки данных

цепи «состав–структура–свойства» [7]. Наиболее активно в настоящее время развиваются и используются для объяснения физико-химических и структурных особенностей жидких металлических систем представления об их микрогетерогенном строении (кластерном), которые частично отображены в работах [8, 9]. По мнению авторов Wilson J.R., Hansen J.P., дальнейшие перспективы использования кластерной модели строения металлических расплавов заключаются в возможности описания процессов образования неметаллических включений, наследственности шихты, установления взаимосвязи между структурой и свойствами расплавов.

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 Э.В. Приходько [1, 7]. В соответствии с ней, металлические расплавы рассматриваются как химически единые системы, изменение состава которых сказывается на комплексе физико-химических свойств через изменение параметров их электронной структуры.

Методика их определения базируется на следующих допущениях:

1. Электронное облако взаимодействующих атомов не сферическое, а деформированное. Свойство деформации – анизотропия, способность вытягиваться одних и сокращаться в других направлениях взаимодействия.

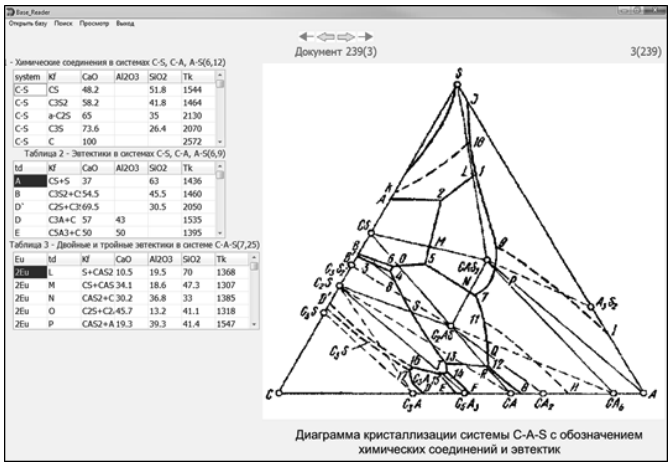

Рис. 5. Фрагмент документа базы данных «Шлак» в ИПС, содержащий информацию о фазовом составе системы $CaO-Al_2O_3-SiO_2$

2. Заряды катионов и анионов не целочисленные, могут иметь широкий спектр дробных значений. Эти значения должны не постулироваться, а вычисляться с учетом конкретного кристаллографического окружения, в первую очередь в зависимости от межъядерного расстояния (*d*).

3. Ионное условие электронейтральности в виде равенства суммы зарядов нулю должно быть переформулировано с учетом условия 5.

4. Размеры ионов, подобно всем свойствам атомов в соединениях – переменная величина. Нет размеров ионов вообще, есть их размеры относительно того или иного иона. Это понятие, как и многие другие (кислотность, основность, химический потенциал

и т. п.) определяется всегда для пары атомов, то есть являются относительными. Существующие кристалло-химические системы ионных радиусов позволяют, как показано во многих литературных источниках, оценивать межатомные расстояния, но не дают действительных размеров ионов.

5. Выравнивание «сшивание» электронной плотности в зоне сочленения ионных остовов взаимодействующих атомов в зависимости от *d* между ними для каждого конкретного направления взаимодействия связано с перераспределением электронов между направлениями взаимодействия. Для численной характеристики этих процессов по кратчайшим направлениям взаимодействия рассчитывается параметр Δ*e*, численно равен сумме *Z* партнеров *A* и *B* конкретной связи. При этом обеспечивается выполнения условия выравнивания зарядов плотности ($\rho l_A = \rho l_B$), являющегося прообразом условия выравнивания химических потенциалов реагентов.

При исследовании взаимосвязи между составом, строением и свойствами металлических расплавов, включая многокомпонентные, Э.В. Приходько обоснована 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 $4Z_1^x = -Z_2^y$.

Как отмечает автор, по физическому смыслу оно 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. В настоящее время ведутся работы по развитию модели в части учета межатомных взаимодействий расплавов группы железа с атомами (C, B, H, O, N).

Использование этой модели открыло новые возможности для полуэмпирического обобщения опытных данных о свойствах расплавов и продуктов их кристаллизации. Эти возможности связаны с разработкой единой формы кодировки информации о составе расплавов, соединений и растворов в виде сочетания интегральных и парциальных модельных параметров межатомного взаимодействия. Основные принципы и методика оценки влияния межатомного взаимодействия в процессах легирования и микролегирования предложены авторами в работе [10, 11]. 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 – tgα, характеризующий изменение радиусов ионов при изменении их зарядов. По физическому смыслу каждый из этих параметров является аналогом электронного (Z^y), размерного (*d*) и электрохимического (tgα) 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* [12]. Соответствующие значения (ΔZ^y) и (Δd) определяются как разница между Z^y и *d* для разупорядоченных систем и механической смеси из исход-

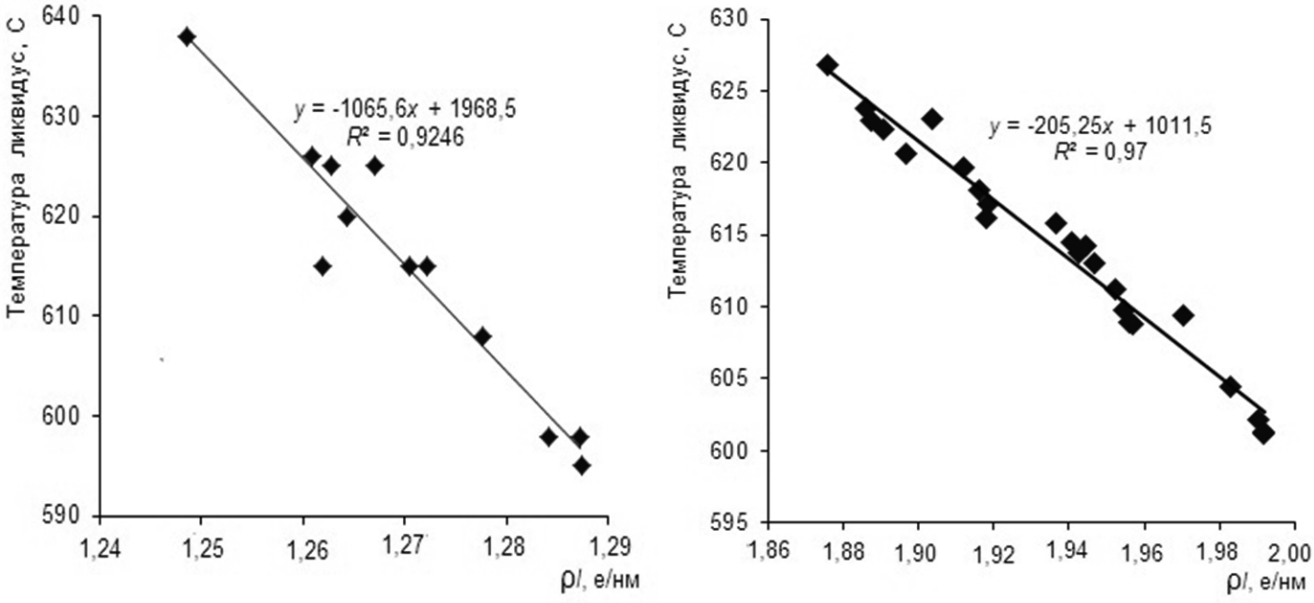

Рис. 6. Зависимость температуры ликвидус магниевых (*а*) и алюминиевых (*б*) сплавов от параметра направленной зарядовой плотности

ных компонентов этой системы, то есть где n_i – атомная доля компонента расплава.

Особенно эффективной проявилась информационная мощность параметра ρl для прогнозирования температур плавления и кристаллизации стали и сплавов специального назначения [13], например алюминиевых, магниевых, жаропрочных, никелевых и др. (рис. 6).

В отдельных случаях, например, жаропрочных, никелевых сплавов, по данным работы [13], прогнозные модели на основе указанных параметров межатомного взаимодействия обеспечили более точную оценку по сравнению с расчетами программного комплекса *jMatPro*.

В последнее время особенно активно ведутся работы по наполнению базы «Ферросплавы», содержащие экспериментальную информацию о 260 составах отечественных и зарубежных ферросплавов (феррохрома, ферросилиция, ферромарганца, феррованадия, ферротитана, ферониобия, ферроникеля, ферроциркония, ферромолибдена, силикокальция, силикомарганца, ферросилиция и др.). С использованием параметров межатомного взаимодействия получены модели для прогнозирования вышеуказанных свойств, которые используются нами при оптимизации процессов доводки стали [10, 14].

Третье направление связано с разработкой оригинальных методов многокритериальной оптимизации процессов выплавки чугуна и стали.

С использованием параметров межатомного взаимодействия, как метода «свертки» многокомпонентных составов, значительно упрощаются задачи оптимизации свойств металлопродукции по схеме состав – структура – технология обработки – свойства. Снижается параметричность моделей, что особенно упрощает реализацию процедур многокритериальной оптимизации. Так, для условий ПАО «Днепроспецсталь», совместно с инженерно-техническими службами предприятия, на основе вышеописанной методики моделирования разработаны инструментальные средства сквозного анализа металлопродукции из легированной и высоколегированной электростали текущего и перспективного марочного сортамента [10, 11].

Выявлены нелинейные зависимости, оригинальные способы построения комплексных критериев качества и стоимости в виде $F^* = f(F_i)$, где F_i – частные критерии вида:

$$F^* = \Pi_{i=1}^{m} \frac{y_i}{y_{iн}} \ ,$$

где y_i – прочностные и эксплуатационные свойства металлопродукции, $y_{iн}$ – заданные низшие границы стандартов или технических условий (ТУ), которые необходимо оптимизировать, позволили выйти на эффективные микролегирующие элементы – B, V и др.

Наличие прогнозных моделей для технологических свойств ферросплавов и специальных сплавов позволяют выбрать соответственно оптимальную добавку при доводке стали.

Методика моделирования оксидных (солевых) систем базируется на предложенной Э.В. Приходько концепции направленной химической связи и подробно описана нами в монографии [1].

В монографии изложен опыт работы по созданию интегрированной базы знаний о свойствах оксидных систем, включающей базы фундаментальных и экспериментальных физико-химических данных.

Описана методика «свертки» химического состава многокомпонентных железорудных материалов, шлаковых расплавов и оксидных систем различного технологического назначения (железные руды, агломерат, окатыши, доменные и сталеплавильные шлаки, шлакообразующие смеси, горные породы, стекла, цементы) и представлены модели для прогнозирования их физико-химических свойств на основе параметров межатомного взаимодействия.

Изложен опыт внедрения разработанных алгоритмических и программных средств в автоматизированной системе научных исследований (АСНИ) и автоматизированной системе управления технологическими процессами (АСУ ТП) ряда металлургических предприятий отрасли [15].

В последнее время нами разработана концепция моделирования процессов направленного формирования расплавов в доменной печи, которая базируется на описании процессов агрегатных и фазовых превращений материалов в доменной печи, взаимодействий в системе «металл-шлак» и формировании продуктов плавки [16, 17].

Разработанные интегральные критерии качества доменной шихты и температурно-дутьевого режима ($К_ш$ и $К_т$) позволили выйти на решение задач прогнозирования коэффициентов распределения элементов шихты между чугуном и шлаком и разработки на этой основе алгоритмических средств направленного формирования состава продуктов доменной плавки:

$$К_ш = \left(\frac{Fe_{об}}{SiO_2}\right)^{\alpha_1} \cdot \left(\frac{CaO}{SiO_2}\right)^{\alpha_2} \cdot \left(\frac{Al_2O_3}{SiO_2}\right)^{\alpha_3} \cdot \left(\frac{MgO}{SiO_2}\right)^{\alpha_4} \cdot \left(\frac{R_2O}{CaO}\right)^{\alpha_5} \cdot \left(\frac{T_{кт}}{T_{нф}}\right)^{\alpha_6} \cdot \left(\frac{FeO_{пш}}{-\Delta e/\rho}\right)^{\alpha_7} \ ,$$

где $Fe_{об}/SiO_2$ – показатель богатства шихты; CaO/SiO_2 – основность шихты; MgO/SiO_2, Al_2O_3/SiO_2, R_2O/SiO_2 – магнезиальный, глиноземный и щелочной модули шихты; $FeO_{пш}$ – содержание FeO в первичном шлаке; $T_{нф}$, $T_{кт}$ – температура начала фильтрации и температура капельного течения; Δe и ρ – химический эквивалент состава и показатель стехиометрии шихты.

$$К_т = ТИП^{0,4} \cdot \eta_{CO}^{0,3} \cdot L_{фз}^{0,3} \ ,$$

где: ТИП – температурный индекс печи; $\eta_{CO}^{0,3}$ – степень использования газа; $L_{фз}^{0,3}$ – глубина фурменной зоны.

С позиции межатомного взаимодействия в расплаве объяснен механизм влияния оксидов калия и натрия на структуру доменных шлаков.

Получена модель щелочной емкости доменного шлака, который позволяет выполнить оперативную прогнозную оценку содержащихся щелочей в шлаке и своевременно осуществить корректировку доменной шихты, обеспечивающей максимальный вывод щелочей из доменной печи [18, 19].

Эти разработки обеспечили предпосылки для решения обратной задачи – выбора рационального состава доменной шихты, что особенно важно с ухудшением сырьевых и энергетических ресурсов работы доменных печей Украины. На основе современных приемов генерации комплексных критериев оптимизации многопараметрических процессов (логин-преобразование, вероятностная функция Харингтона и др.) разработана компьютерная система оптимизации состава шихты, обеспечивающие требуемое качество продуктов плавки, которая прошла промышленное опробование на ряде печей комбинатов «АрселорМиттал Кривой Рог», «Запорожсталь». На рис. 7 представлен видеокадр системы, которая базируется на 5-ти разработанных нами патентах.

Рис. 7. Видеокадр системы выбора оптимального состава шихты

ЛИТЕРАТУРА

1. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Степаненко Д.А.* Прогнозирование физико-химических свойств оксидных систем. Монография. Днепропетровск: Пороги, 2013. 344 с.
2. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И.* Проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии. *Известия АН СССР. Металлургия. Металлы.* 1991. № 4. С. 217–220.
3. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Роль информационных технологий в повышении качества металлопродукции. *Наукові праці «Сучасні проблеми металургії». Матеріали НПК «Проблеми і перспективи одержання конкурентноздатної продукції в гірничо-металургійному комплексі України».* Дніпропетровьк. 2001. Т. 3. С. 450–462.
4. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И.* Авторизированный компьютерный продукт в отечественной металлургии. *Известия АН России. Металлургия. Металлы.* 1996. № 1. С. 29–45.
5. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И., Приходько Э.В.* О паспортизации экспериментальных материалов для банка данных «Металлургия». *Известия вузов. Черная металлургия.* 1988. № 8. С. 136–139.
6. *Тогобицкая Д.Н., Пиптюк В.П., Петров А.Ф., Греков С.В., Снигура И.Р., Лихачев Ю.М., Головко Л.А.* Базы данных и модели для экспертной оценки эффективности использования ферросплавов при производстве стали. *Сб. науч. тр. ИЧМ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии».* 2017. Вып. 31. С. 150–165.
7. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Свойства металлургических расплавов – следствие их состава и структуры. *Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины «Современные проблемы физического материаловедения».* 2017. Вып. 26. С.124–138.
8. Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов». Т. 1. Екатеринбург: УрО РАН, 2011. 218 с.
9. *Найдек В.Л., Мельник С.Г., Верховлюк А.М.* Кластеры – структурные составляющие металлических расплавов. *Металл и литье Украины.* 2015. № 7. С. 21–24.
10. *Тогобицкая Д.Н., Пиптюк В.П., Логозинский И.Н., Левин Б.А., Козачек А.С., Кукса О.В., Лихачев Ю.М.* Системный подход к выбору оптимального элементного состава стали, обеспечивающего требуемый уровень механических свойств. *Системные технологии. Региональный сборник научных трудов.* Днепропетровск. 2015. Вып. 2(97). С. 91–97.
11. *Тогобицкая Д.Н., Пиптюк В.П., Логозинский И.Н., Левин Б.А., Козачек А.С., Кукса О.В., Лихачев Ю.М.* Оптимизация химического состава стали 14Х17Н2 на основе концепции направленной химической святи. *Сб. науч. тр. ИЧМ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии».* Днепропетровск. 2015. Вып. 30. С. 312–323.
12. *Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P., Petrov A.F., Grekov E.V., Mirgorodskaya A.S.* Prediction of Ferroalloy Properties for Expert Evaluation of the Efficiency of their Use During Addition to Steel in a Ladle Furnace Unit. *Metallurgist.* 2019. Vol. 62. Iss. 11–12. P. 1115–1122. doi: https://doi.org/10.1007/s11015-019-00763-5.

13. *Тогобицкая Д.Н., Шапер М., Гридин О., Левин Б.А., Снигура И.Р.* Компьютерное моделирование температур плавления и кристаллизации сплавов специального назначения. *Сталь.* 2018. № 6. С. 11–15.

14. *Бабаченко А.И., Тогобицкая Д.Н., Козачек А.С., Кононенко А.А., Кныш А.В., Снигура И.Р.* Оптимизация химического состава стали для железнодорожных колес, обеспечивающего стабилизацию механических и повышение эксплуатационных свойств. *Металлургическая и горнорудная промышленность.* 2016. № 2. С. 67–73.

15. *Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И., Хамхотько А.Ф., Степаненко Д.А., Оторвин П.И., Нынь С.В.* Опыт создания и внедрения системы контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки в шихтовых и технологических условиях заводов Украины. *Сб. науч. тр. ИЧМ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии».* Днепропетровск. 2009. Вып. 19. С. 100–112.

16. *Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И., Степаненко Д.А.* и др. Выбор состава доменной шихты, обеспечивающего направленное формирование жидких продуктов доменной плавки. *Металлургическая и горнорудная промышленность.* 2016. № 3. С. 11–18.

17. *Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И., Степаненко Д.А., Скачко А.С.* Комплексный подход к выбору оптимального состава доменной шихты. *Спеціальна металургія: вчора, сьогодні, завтра. КПІ ім. Ігоря Сікорського.* Київ, 2018. С. 321–335.

18. *Togobitskaya D.N., Tsyupa N.A., Otorvin P.I., Skachko A.S.* Removal of Alkaline Compounds from Blast Furnaces by Means of Slag. *Steel in Translation.* 2018. Vol. 48. No. 5. P. 301–306.

19. *Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И., Степаненко Д.А.* Физико-химические основы выбора состава доменной шихты с целью направленного формирования продуктов плавки. Коллективный труд «Познание процессов доменной плавки». Днепр: Пороги, 2016. С. 286–321.

Поступила 17.09.2019

REFERENCES

1. *Prihod'ko, E.V., Togobitskaya, D.N., Hamhot'ko, A.F., Stepanenko, D.A.* (2013). Prediction of the physicochemical properties of oxide systems. Dnepropetrovsk: Porogi, 344 p. [in Russian].

2. *Togobitskaya, D.N., Zhmoidin, G.I.* (1991). The problem of information support of theoretical and applied metallurgy. *Izvestiya AN USSR. Metallurgiya. Metally. Proceedings of the USSR Academy of Sciences. Metallurgy. Metals,* no. 4, pp. 217–220 [in Russian].

3. *Prihod'ko, E.V., Togobitskaya, D.N.* (2001). The role of information technology in improving the quality of metal product. *Naukovi pratsi "Suchasni problemy metalurgii". Materialy NPK "Problemy i perspektyvy oderzhannya konkurentnozdatnoï produktsiï v girnicho-metalurgiinomu kompleksi Ukraïni". Science and Technology "The Problems of Metallurgy". Materials NPK "Problems and prospects of gaining competitive products in the iron and steel complex of Ukraine".* Dnipropetrov'k, vol. 3, pp. 450–462 [in Russian].

4. *Togobitskaya, D.N., Zhmoidin, G.I.* (1996). Authorized computer product in domestic metallurgy. I*zvestiya AN Rossii. Metallurgiya. Metally. Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Metallurgy. Metals,* no. 1, pp. 29–45 [in Russian].

5. *Togobitskaya, D.N., Zhmoidin, G.I., Prihod'ko, E.V.* (1988). About certification of experimental materials for the Metallurgy database. *Izvestiya vuzov. Chernaya metallurgiya. Proceedings of universities. Ferrous metallurgy,* no. 8, pp. 136–139 [in Russian].

6. *Togobitskaya, D.N., Piptiuk, V.P., Petrov, A.F., Grekov, S.V., Snigura, I.R., Lihachev, Yu.M., Golovko, L.A.* (2017). Databases and models for expert assessment of the efficiency of using ferroalloys in steel production. *Sb. nach. tr. IChM "Fundamental'nye i prikladnye problemy chernoj metallurgii". Sb. nauch. tr. ISI "Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy",* iss. 31, pp. 150–165 [in Russian].

7. *Prihod'ko, E.V., Togobitskaya, D.N.* (2017). Properties of metallurgical melts – a consequence of their composition and structure. *Trudy Instituta problem materialovedeniya im. I.N. Frantsevicha NAN Ukrainy "Sovremennye problemy fizicheskogo materialovedeniya". Transactions of the Institute of Problems of Materials Science named after I.N. Frantsevich NAS of Ukraine "Modern problems of physical materials science",* iss. 26, pp. 124–138 [in Russian].

8. Proceedings of the XIII Russian Conference "The structure and properties of metal and slag melts". Ekaterinburg: Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Ekaterinburg: UrO RAN, 2011, vol. 1, 218 p. [in Russian].

9. *Naidek, V.L., Mel'nik, S.G., Verkhovliuk, A.M.* (2015). Clusters – structural components of metal melts. *Metal and Casting of Ukraine,* no. 7, pp. 21–24 [in Russian].

10. *Togobitskaya, D.N., Piptiuk, V.P., Logozinskij, I.N., Levin, B.A., Kozachek, A.S., Kuksa, O.V., Lihhachev, Yu.M.* (2015). A systematic approach to choosing the optimal elemental composition of steel providing the required level of mechanical properties. *Sistemnye tekhnologii. Regional'nyj sbornik nauchnykh trudov. System Technologies. Regional collection of scientific papers,* Dnepropetrovsk, iss. 2(97), pp. 91–97 [in Russian].

11. *Togobitskaya, D.N., Piptiuk, V.P., Logozinskij, I.N., Levin, B.A., Kozachek, A.S., Kuksa, O.V., Lihachev, Yu.M.* (2015). Optimization of the chemical composition of steel 14Kh17N2 based on the concept of directional chemical bonding. *Sb. nauch. tr. IChM "Fundamental'nye i prikladnye problemy chernoj metallurgii". Sb. nauch. tr. ISI "Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy"*. Dnepropetrovsk, iss. 30, pp. 312–323 [in Russian].

12. *Togobitskaja, D.N., Piptyuk, V.P., Petrov, A.F., Grekov, E.V., Mirgorodskaya, A.S.* (2019). Prediction of Ferroalloy Properties for Expert Evaluation of the Efficiency of their Use During Addition to Steel in a Ladle Furnace Unit. *Metallurgist*, vol. 62, iss. 11–12, pp. 1115–1122. doi: https://doi.org/10.1007/s11015-019-00763-5 [in English].

13. *Togobitskaya, D.N., Shaper, M., Gridin, O., Levin, B.A., Snigura, I.R.* (2018). Computer simulation of the melting and crystallization temperatures of special alloys. *Stal'. Steel,* no. 6, pp. 11–15 [in Russian].

14. *Babachenko, A.I., Togobitskaya, D.N., Kozachek, A.S., Kononenko, A.A., Knysh, A.V., Snigura, I.R.* (2016). Optimization of the chemical composition of steel for railway wheels, providing stabilization of mechanical and improving operational properties. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost'. Metallurgical and mining industry,* no. 2, pp. 67–73 [in Russian].

15. *Togobitskaya, D.N., Bel'kova, A.I., Hamhot'ko, A.F., Stepanenko, D.A., Otorvin, P.I., Nyn', S.V.* (2009). The experience of creating and implementing a system for monitoring and controlling the slag regime of blast furnace smelting in charge and technological conditions of Ukrainian plants. *Sb. nach. tr. IChM "Fundamental'nye i prikladnye problemy chernoj metallurgii". Sb. nauch. tr. ISI "Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy".* Dnepropetrovsk, iss. 19, pp. 100–112 [in Russian].

16. *Togobitskaya, D.N., Bel'kova, A.I., Stepanenko, D.A.* (2016). The choice of the composition of the blast furnace charge, which provides the directed formation of liquid products of blast furnace smelting. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost'. Metallurgical and mining industry,* no. 3, pp. 11–18 [in Russian].

17. *Togobitskaya, D.N., Bel'kova, A.I., Stepanenko, D.A., Skachko, A.S.* (2018). An integrated approach to the selection of the optimal composition of a blast furnace. *Spetsial'na metalurgiya: vchora, s'ogodni, zavtra. KPI im. Igoria Sikors'kogo. Special metallurgy: yesterday, today, tomorrow. KPI im. Igor Sikorsky,* Kyiv, pp. 321–335 [in Russian].

18. *Togobitskaya, D.N., Tsyupa, N.A., Otorvin, P.I., Skachko, A.S.* (2018). Removal of Alkaline Compounds from Blast Furnaces by Means of Slag. *Steel in Translation,* vol. 48, no. 5, pp. 301–306 [in Russian].

19. *Togobitskaya, D.N., Bel'kova, A.I., Stepanenko, D.A.* (2016). Physico-chemical basis for the selection of the composition of the blast furnace with the aim of the directed formation of smelting products. Kollektivnyj trud "Poznanie protsessov domennoj plavki". Collective work "Cognition of the processes of blast furnace smelting", Dnepr: Porogi, pp. 286–321 [in Russian].

Received 17.09.2019

Анотація

Д.М. Тогобицька, д-р техн. наук, проф., зав. відділу, e-mail: dntog@ukr.net, https://orcid.org/0000-0001-6413-4823; **А.І. Бєлькова,** канд. техн. наук, ст. наук. співр., e-mail: alla2904b8@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8519-9351; **Д.О. Степаненко,** канд. техн. наук, ст. наук. співр., e-mail: d.gorodenskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0184-8295; **О.П. Петров,** наук. співр., https://orcid.org/0000-0001-7855-9267

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

Методологічні основи фізико-хімічного моделювання і оптимізації процесів виробництва чавуну і сталі

Присвячується пам'яті
Едуарда Васильовича Приходька

В роботі узагальнено накопичений в Інституті чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України (ІЧМ) досвід вирішення завдань оптимізації металургійних технологій з використанням методології фізико-хімічного та математичного моделювання, базовим ядром якого є розроблена Е.В. Приходьком оригінальна методика моделювання шлакових і металевих розплавів на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку. Розглянуто особливості створення системи інформаційного забезпечення теоретичної та прикладної металургії на основі ретроспективного фонду експериментальних фундаментальних фізико-хімічних даних та фонду моделей металургійних систем і процесів їх взаємодії на макро- і мікрорівнях. Описано можливості розробленого в ІЧМ оригінального системного математичного забезпечення створення документально-фактографічних баз даних і прикладних програм оцінки достовірності «зашумлених» багатовимірних масивів фізико-хімічних і технологічних даних на основі сучасних методів статистики і

візуалізації даних в різних перетинах шляхом цілеспрямованого проектування.
Викладено принципи взаємодії баз даних і бази моделей в режимі взаємної додатковості. Обґрунтовано вибір фізико-хімічних критеріїв шляхом «згортки» інформації про хімічний склад багатокомпонентних залізорудних матеріалів, шлакових і металевих розплавів і описано підходи до прогнозування їх фізико-хімічних властивостей за схемою склад-структура-властивості. Розглянуто питання врахування впливу мікронеоднорідності будови металевих розплавів на формування термодинамічних і теплофізичних властивостей феросплавів і спеціальних сплавів. Запропоновано методологію створення систем управління якістю металопродукції і методів багатоцільової оптимізації металургійних процесів, шляхом побудови комплексних критеріїв показників їх ефективності. На прикладі задачі оптимізації доменної шихти запропоновано узагальнений критерій багатоцільової ефективності, що забезпечує необхідну якість продуктів плавки і її техніко-економічні показники.

Ключові слова

Бази даних, база моделей, металургійні розплави, фізико-хімічні властивості, критерії, багатоцільова багатопараметрична оптимізація.

Summary

D.N. Togobitskaya, Dr. Sci. (Engin.), Professor, Head of the Department, e-mail: dntog@ukr.net, https://orcid.org/0000-0001-6413-4823; **A.I. Bel'kova,** PhD (Engin.), Senior Researcher, e-mail: alla2904b8@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8519-9351; **D.A. Stepanenko,** PhD (Engin.), Senior Researcher, e-mail: d.gorodenskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0184-8295; **A.F. Petrov,** Researcher, https://orcid.org/0000-0001-7855-9267

Iron and Steel Institute of Z.I. Nekrasov of the NAS of Ukraine (Dnipro, Ukraine)

Methodological bases of physical and chemical modeling and optimization of processes of production of iron and steel

Dedicated to memory of
Eduard Vasil'evich Pryhodko

The experience of solving problems of optimization of metallurgical technologies using the methodology of physicochemical and mathematical modeling, the basic of which is developed by E.V. Pryhodko, is an original method of modeling of slag and metal melts based on the concept of directed chemical bond. The features of creation of information support system of theoretical and applied metallurgy on the basis of retrospective fund of experimental fundamental physicochemical data and fund of models of metallurgical systems and processes of their interaction at macro and micro levels are considered. Possibilities of original systematic mathematical support for creation of document-factual databases and applications of reliability estimation of "noisy" multidimensional arrays of physico-chemical and technological data based on modern methods of statistics and data visualization at different cross sections by purposeful design are described.
The principles of interaction between databases and model databases in the mode of mutual additionality are outlined. The choice of physicochemical criteria by "convolution" of information on the chemical composition of multicomponent iron ore materials, slag and metal melts is substantiated, and approaches to the prediction of their physicochemical properties according to the structure-structure-properties scheme are described. The problems of taking into account the influence of microinhomogeneity of the structure of metal melts on the formation of thermodynamic and thermophysical properties of ferroalloys and special alloys are considered. The methodology of creation of quality management systems of metal products and methods of multi-purpose optimization of metallurgical processes is proposed by constructing complex criteria of their efficiency indicators. An example of a blast furnace charge optimization problem is a generalized multi-purpose efficiency criterion that provides the required quality of melting products and its technical and economic indicators.

Keywords

Databases, model base, metallurgical melts, physical and chemical properties, the criteria, multipurpose multi-parameter optimization.