

Д.Н. Тогобичкая, А.Ф. Хамхотько, А.И. Белькова, Ю.М. Лихачев

ОТ БАЗ ДАННЫХ К БАЗАМ ЗНАНИЙ О СВОЙСТВАХ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ

Рассмотрены вопросы экспертной оценки экспериментальных данных и методологии создания моделей для прогнозирования их физико–химических и технологических свойств на основе параметров межатомного взаимодействия. Изложены принципы взаимодействия баз данных и базы моделей в режиме взаимной дополнительности.

Одной из важнейших материаловедческих задач в металлургии является прогнозирование свойств шлаков, образующихся или используемых в различных переделах: доменных, мартеновских, конвертерных, рафинировочных, разливочных и других. В Институте черной металлургии НАНУ решение этой проблемы осуществляется с позиций системного подхода на основе двадцатилетнего опыта создания банка данных «Металлургия», концепция развития которого изложена нами в работах [1,2,3,4,5]. Для металлургии его специфика заключается не только в предметной области, но и структуре организации фонда знаний, ориентированного на создание:

- фактографических баз экспериментальных данных (БД) о свойствах различных групп соединений и шихтовых материалов, используемых в металлургических процессах, шлаковых и металлических расплавов доменного и сталеплавильного производств;
- фонда рассмотренных в литературе теоретических и эмпирических моделей для прогнозирования этих свойств по составу материалов;
- оригинальных физико–химических моделей структуры разных групп многокомпонентных материалов на основе использования количественных критериев, характеризующих межатомное взаимодействие в этих материалах;
- интерактивных диалоговых средств комплексного анализа, которые обеспечивают при рассмотрении конкретных научных и прикладных задач решение взаимосвязанных между собой вопросов оценки как достоверности экспериментальной информации, так и работоспособности моделей.

Такая ориентация позволяет в будущем путем интеграции этих разработок, объединенных единой идеологией их создания в сочетании с нетрадиционными средствами анализа и обработки разнотипных данных, обеспечить создание элементов интегрированной базы знаний (БЗ). Диалог пользователя с системой при изложенном подходе осуществляется по схеме <Запрос в БД> → <Выбор критериев и экспертиза данных> →

<Выдача рекомендуемых данных> → <Построение прогнозных моделей>
→ <Адаптация в системах АСУ и САПР>.

В настоящее время в базу «Шлак» введено свыше 500 документов, содержащих сведения о свойствах более 8000 составов. По химическому составу и назначению представлены шлаки практически всех систем, используемых в черной металлургии, учтены эталонные результаты основных школ отечественных и зарубежных авторов. Локальная документально-фактографическая база данных «Шлакообразующие смеси для разливки стали» в настоящее время включает более 300 опубликованных источников информации (публикации, изобретения, проспекты), содержит сведения о составах, свойствах и назначении ШОС и непрерывно пополняется.

Опыт показывает, что не всегда возможно заранее алгоритмизировать различные ситуации, возникающие при контроле и теоретической интерпретации фактической информации. Учитывая это обстоятельство, предусмотрен интерактивный режим взаимодействия исследователя с вычислительной системой и математической моделью обработки и теоретической интерпретацией информации. Примером часто встречающихся такого рода когнитивных задач является анализ причин значимой расходимости (за пределами погрешности эксперимента) результатов параллельных исследований, проведенных разными методами на одном объекте. В табл.1 представлен фрагмент данных о вязкости синтетических шлаков, взятых из справочника [6], которые свидетельствуют о существенной расходимости свойств для одних и тех же составов.

Такие расхождения – «аномалии» – могут быть следствием некорректности хотя бы одной из экспериментальных методик, либо неэквивалентности объектов исследования из-за неучтенных различий в условиях проведения экспериментов. Корректный анализ второй из вышеназванных причин требует не только высокого профессионализма и незаурядной творческой интуиции, но и включения в рассмотрение исходных данных, при формировании которых не применялся бы принцип предварительной экспертизы и самосогласования, отсеивающей все «аномальные» результаты. Чаще всего именно беспристрастный анализ этих «аномалий», как правило, и приводит к обнаружению новых, ранее не замеченных закономерностей.

Подобная проблема обсуждена нами в работах [7,8,9]. Так, например, при определении меры десульфуризирующего потенциала шлаковых расплавов английская школа оценивает его «сульфидной емкостью C_S », определяемой равновесным распределением серы между шлаковым расплавом и атмосферой известного состава. Российская школа определяет его «серопоглотительной способностью C_S » по равновесному распределению серы между шлаковым и металлическим расплавами заданного состава [10]. Немецкая школа пользуется аналогичной

величиной, но с иной нормировкой состава металлического расплава, что также приводит к теоретическим разногласиям.

Таблица 1. Свойства синтетических шлаков по данным [6].

N из [6]	Содержание, мас. %				Вязкость, Па·с, при температуре, °С						Авт ор
	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	MgO	1250	1300	1350	1400	1450	1500	
5	50	45	5	0				н.д.	0,48	0,341	М
74	50	45	5	0			>15	0,8	0,5	0,3	Г
115	50	45	5	0	>15	9	0,97	0,67	0,48	0,39	В
132	50	45	5	0		>15	1,02	0,66	0,47	0,32	В
142	45	45	5	5			н.д.	0,747	0,491	0,381	М
177	45	45	5	5		>15	2,8	0,8	0,5	0,3	Г
232	45	45	5	5	2,22	1,27	0,77	0,49	0,38	0,3	В
243	45	45	5	5	2,51	1,34	0,8	0,51	0,37	0,29	В
233	42,5	42,5	10	5	2,75	1,8	1,1	0,77	0,53	0,42	В
247	42,5	42,5	10	5	3,04	2,17	1,07	0,64	0,49	0,39	В
352	42,5	42,5	5	10	2,04	1,21	0,75	0,48	0,35	0,28	В
367	42,5	42,5	5	10		>15	5,56	0,57	0,4	0,31	В
234	46,4	38,6	10	5	5,95	1,19	0,81	0,52	0,38	0,31	В
248	46,4	38,6	10	5	>15	2,37	0,88	0,54	0,37	0,31	В
166	40	40	15	5	7,14	3,14	1,96	1,19	0,81	0,5	М
188	40	40	15	5	8,8	4,25	2,13	1,25	0,8	0,57	Г
235	40	40	15	5	4,2	2,55	1,27	0,86	0,58	0,39	В
282	40	40	10	10			н.д.	0,974	0,64	0,43	М
300	40	40	10	10	>15	1,85	0,98	0,62	0,4	0,32	Г
372	40	40	10	10	2,6	1,26	0,78	0,53	0,4	0,32	В
178	50	40	5	5			>15	3,7	1,6	0,7	Г
217	50	40	5	5	>15	7,3	2,13	0,55	0,37	0,28	В
218	52,5	37,5	5	5				3,22	1,76	11	В
245	52,5	37,5	5	5			3,95	2,08	1,08	0,68	В

Примечание: н.д. – нет данных; М – Мэчин с соавторами; Г – И.И.Гультей; В – В.Г.Воскобойников с соавторами.

Разносторонний (системный) анализ этой проблемы приводит к выводу, что получающиеся расхождения имеют не методический, а фундаментальный характер и коренятся в неэквивалентности окислительного потенциала шлакового расплава в трех названных методиках.

Принципиально новые возможности в решении связанных с этой проблемой задач открывает использование формализованных процедур многомерного сравнительного анализа (факторный и таксономия) [11], а также физико-химических моделей структуры многокомпонентных металлургических расплавов [12,13]. Не затрагивая в данной статье достаточно сложные теоретические аспекты этих разработок рассмотрим те их следствия, которые касаются аналитического обобщения накопленного фонда экспериментальной информации на примере шлаков металлургического производства.

Численные критерии предложенных подходов выполняют функции параметров свертки информации о составе многокомпонентных расплавов, что существенно повышает эффективность современных математических методов анализа экспериментальных данных и их обобщения в форме, удобной для оценки достоверности и последующего решения задач прогнозирования. Одно из основных достоинств такого метода анализа заключается в том, что можно сопоставлять результаты исследований расплавов с разным числом и сочетанием концентраций компонентов. Другое – связано с выявлением уже на первом этапе анализа экспериментальных результатов, существенно отличающихся от основного массива информации.

В качестве примера на рис.1 представлены результаты сопоставления данных разных авторов о поверхностном натяжении металлургических шлаков при их проецировании на ось главного фактора F_1 с наибольшей факторной нагрузкой показателя поверхностного натяжения σ . Расслоение данных обусловлено разновидностью систем, например, влиянием поверхностно активных добавок. На рис.2 представлены данные о температуре плавления металлургических шлаков при их проецировании на ось показателя зарядового состояния исследуемых расплавов.

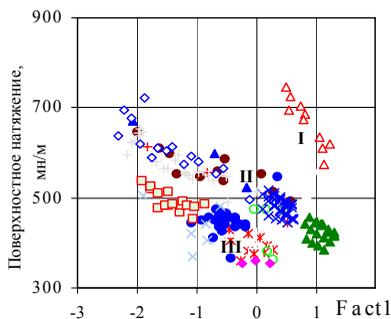


Рис.1 Проекция данных различных авторов о поверхностном натяжении на фактор с наибольшей нагрузкой (I–железосиликатные шлаки, II–сталеплавильные и доменные шлаки, III–синтетические шлаки с поверхностно –активными добавками)

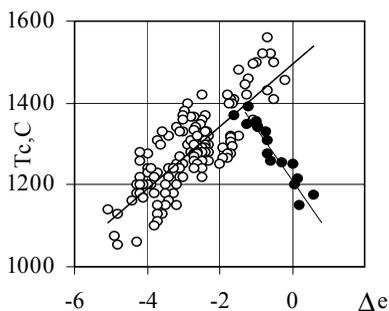


Рис.2 Зависимость температуры плавления шлакового расплава от параметра $\Delta\epsilon$ (● – шлаки с высоким содержанием фтора, о – малофтористые шлаки).

На следующем этапе производится факторный анализ причин наблюдаемых «расслоений» и переход к процедуре моделирования. В частности, из рис.1 следует, что процедуру построения прогнозных

моделей следует начинать с формирования корректных выборок для каждого класса отдельно.

Для построения прогнозных моделей нами [14] были обобщены экспериментальные данные о свойствах большого количества оксидных бесфтористых и малофтористых шлаков доменного и сталеплавильного производств и получены уравнения типа: свойство = $f(\Delta e, \rho)$ для расчета вязкости, электропроводности, поверхностного натяжения при постоянных температурах и температуры плавления названных систем, где Δe и ρ – параметры межатомного взаимодействия в расплаве.

Эти уравнения позволяют оценивать уровень названных свойств в широком диапазоне составов. Однако расширение области изученных составов, например, до высокофтористых, высокоглиноземистых, высокомагнезиальных, титаносодержащих и других, и апробация методики обобщения данных для конкретных производственных условий позволили установить, что в ряде случаев с целью повышения точности прогноза необходимо перейти от обобщенных моделей к локальным, характеризующим конкретную ситуацию.

Так, на основе накопленных в базах данных для условий работы доменных печей ЗСМК на высокоглиноземистых (до 20% Al_2O_3) и высокомагнезиальных (до 25% MgO) шлаках получены прогнозны модели на основе параметров Δe , ρ , $tg\alpha$, позволяющие с удовлетворительной для практики точностью рассчитывать температуры начала и конца плавления первичных и конечных доменных шлаков и их вязкости при постоянных температурах в диапазоне от 1250 до 1500⁰С через 50⁰С [15].

Условия работы доменных печей НТМК при плавке титаномagnetитов существенно отличаются от таковых при производстве обычных передельных чугунов, так как образующиеся доменные шлаки содержат до 18% TiO_2 . В связи с этим в уравнения для расчета температуры плавления и вязкости шлаков при 1400⁰С и 1500⁰С наряду с модельными параметрами Δe , и ρ включено содержание TiO_2 [16].

Учитывая расслоение данных на рис.2 в отличие от оксидных расплавов с акцепторным характером взаимодействия катион–анион, когда электроны переходят с атомных орбиталей на связующие, чему соответствуют отрицательные величины химического эквивалента Δe , оксифторидные высокоглиноземистые шлаки характеризуются донорным взаимодействием катион–анион и положительными величинами Δe . Такие шлаки используются в качестве рафинирующих в процессах ковшовой металлургии. Обработкой экспериментальной информации о свойствах этих шлаков получены прогнозны уравнения для температуры плавления, а также вязкости, электропроводности и поверхностного натяжения при 1500–1600⁰С с использованием модельных параметров Δe и ρ .

В результате анализа экспериментальных данных о свойствах шлаков, накопленных в базе данных «Шлакообразующие смеси», разработаны прогнозные модели для расчета комплекса свойств ШОС (интервала плавления и вязкости при постоянной температуре от 1200 до 1500⁰С) с использованием вышеназванных интегральных критериев Δe и ρ и параметра, учитывающего микронеоднородность Δe_n [17,18].

В настоящее время возникла необходимость модернизации прогнозных моделей свойств применительно к доменным шлакам заводов Украины. Это обусловлено необходимостью выбора исходной экспериментальной информации, наиболее адекватно отражающей свойства натуральных шлаков, и учетом температурного фактора при прогнозировании основных свойств, характеризующих поведение жидких шлаков, таких как вязкость и поверхностное натяжение. С использованием теоретических основ, изложенных в [19], и экспериментальной информации, сконцентрированной в базе данных «Шлак», нами уточнены прогнозные модели для комплекса свойств конечных доменных шлаков: вязкости, температур начала и конца кристаллизации, поверхностного натяжения, энтальпии и серопоглотительной способности. На основе этих моделей разработаны и адаптированы к условиям работы КГТМК «Криворожсталь» алгоритмические и программные средства системы контроля и управления шлаковым режимом в изменяющихся шихтовых условиях [20]. Видеокадр системы оценки свойств шлака текущего выпуска для доменной печи №5 представлен на рис.3.

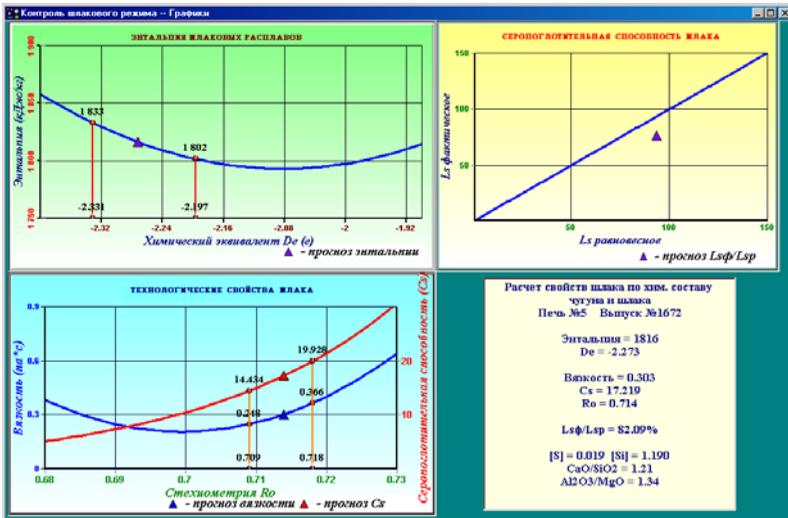


Рис.3. Видеокадр системы контроля шлакового режима доменной плавки

Система позволяет осуществлять многокритериальную оценку шлакового режима доменной плавки по комплексу свойств с целью принятия обоснованных технологических воздействий.

1. *Методология* создания базы знаний о свойствах сталей и сплавов. / Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая // *Металлознавство та обробка металів.* – Киев. – 1996. – №3. – С.50–55.
2. *Базы физико–химических и технологических данных для создания информационных технологий в металлургии.* / Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая // *Металлургическая и горнорудная промышленность.* – 1999. – №3. – С.17–21.
3. *От баз данных к базам знаний в металлургии – технологический уровень.* / Д.Н. Тогобицкая, С.С. Бродский, Г.И. Жмойдин // *Изв.АН. Металлы.* – 1998. – №6. – С.27–43.
4. *Проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии.* / Г.И. Жмойдин, Д.Н. Тогобицкая // *Известия АНССР. Металлы.* – 1991. – №3. – С.218–223.
5. *Авторизованный компьютерный продукт в отечественной металлургии.* / Г.И. Жмойдин, Д.Н. Тогобицкая // *Известия РАН. Металлургия. Металлы.* – 1996. – №1. – С.29–45.
6. *Свойства жидких доменных шлаков* / В.Г. Воскобойников, Н.Е. Дунаев, А.Г. Михалевич и др. // М.: Металлургия. – 1975. – 184 с.
7. *Организация информационной среды по десульфурации металла шлаками.* 4–й Российский семинар «Компьютерное моделирование расплавов и стекол». / Г.И. Жмойдин, Д.Н. Тогобицкая, Д.Л. Авгитов // – Курган. – 1998. – С.49–50.
8. *Оценка достоверности экспериментальных данных о свойствах доменных шлаков заводов Украины.* Сб.н.т. / Д.Н. Тогобицкая, А.Ф. Хамхотько, А.И. Белькова, П.И. Оторвин // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии.* – Киев. Наукова думка. – 2003.
9. *О паспортизации экспериментальных материалов для банка данных «Металлургия».* / Г.И. Жмойдин, Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая, А.Ф. Хамхотько, Ю.М. Лихачев // *Изв.ВУЗов. Черная металлургия.* – 1988. – №8. – С.136–139.
10. *Жмойдин Г.И.* Серопоглощительная способность и сульфидная емкость шлаков. // *Изв. АН СССР. Сер. Металлы.* – 1982. – №2. – С.3–9.
11. *Иберла К.* Факторный анализ. Пер. с нем. В.М.Ивановой. –М. Статистика. – 1980. – 399 с.
12. *Приходько Э.В.* Физико–химическая модель структуры шлаковых расплавов. // *Сталь.* – 1990. – №10. – С.14–22.
13. *Приходько Э.В.* Теоретические основы физико–химических моделей структуры многокомпонентных материалов. // *Изв. АН СССР. Металлы.* – 1991. – №6. – С. 208–214.
14. *Строение и физико–химические свойства металлургических шлаковых расплавов.* / Э.В. Приходько, А.Ф. Хамхотько, Д.Н. Тогобицкая // –М.: –1983. (Экспресс–информация /ин–т «Черметинформация»). –21с.
15. *Прогнозирование свойств магнезиально–глиноземистых доменных шлаков.* / В.П. Горбачев, А.С. Янковский, А.И. Локтев и др. // *Изв. ВУЗов. Черная металлургия.* –1988. –№12. –с.15–18.

16. *Использование* параметров электронного строения для оценки вязкости и плавкости титансодержащих доменных шлаков. / А.Ф. Хамхотько, Б.А. Марсуверский, В.И. Чеботарев // В сб. Черная металлургия. Наука–Технология–Производство. –М.: Металлургия. –1989. –с.84–85.
17. *Физико–химические критерии* для оценки влияния микронеоднородности структуры оксидных расплавов на их свойства. / Э.В. Приходько, А.И. Белькова // Теория и практика металлургии. –Днепропетровск. –1998. – №3. –с.25–28.
18. *Компьютерная система* для выбора оптимальных шлаковых смесей при разливке стали. / Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая, А.Ф. Хамхотько, А.И. Белькова // Тр. конф. «Современные проблемы производства стали и управление качеством подготовки специалистов. –Мариуполь. –2002. –с.286–289.
19. *Приходько Э.В.* Металлохимия многокомпонентных систем. –М.: Металлургия. –1995. –320 с.
20. *Автоматизированная система* контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки. / Д.Н. Тогобицкая, П.И. Оторвин, А.Ю. Гринько, А.И. Белькова Сб. докл. конференции «Энергосбережение на предприятиях металлургической и горной промышленности». Санкт–Петербург. – 2004. – С.18–19.

Статья рекомендована к печати д.т.н. Э.В.Приходько