

Э.В.Приходько, Д.Н.Тогобицкая

**РЕЗУЛЬТАТЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ СВОЙСТВ  
ЖЕЛЕЗОРУДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ШЛАКОВ – СОСТАВНАЯ ЧАСТЬ  
ТВОРЧЕСКОГО НАСЛЕДИЯ АКАДЕМИКА З.И.НЕКРАСОВА**

*Институт черной металлургии им. З.И. Некрасова НАН Украины*

Обобщены результаты фундаментальных и прикладных исследований закономерностей формирования свойств шлаков и железорудного сырья в зависимости от их состава. Для решения этой задачи использованы математический аппарат и методология развитой авторами физико–химического моделирования.

Для стиля руководства научными исследованиями со стороны академика Некрасова З.И. было характерно подчеркнутое уважение к привлечению сотрудниками достижений фундаментальных наук. Наиболее четко это проявлялось в его постоянном интересе и поддержке попыток использования современных методов обработки физико–химической и технологической информации с использованием возможностей ЭВМ и новых, пусть даже дискуссионных, теоретических представлений о закономерностях формирования свойств различных материалов в зависимости от их состава. Для авторов данной статьи этот интерес и поддержка позволили изначально сформировать основы и разработать математический аппарат теории физико–химического моделирования, включающей в качестве составных частей комплексное математическое и физико–химическое описание основных закономерностей металлургических процессов производства чугуна и стали.

Учитывая интересы современное состояние разработанной в ИЧМ теории физико–химического моделирования целесообразно рассмотреть на примере одного из конкретных и актуальных вопросов теории и технологии доменного производства. Современные экспериментальные и теоретические исследования строения оксидных расплавов [1, 2] и различных стеклообразных веществ [3, 4], подтверждая определяющую роль ближнего порядка в формировании их электронной структуры и свойств, в то же время свидетельствуют об индивидуальном наборе анионных группировок (нередко гипотетических, а не реальных) в зависимости от состава расплавов. В частности, только по структуре стеклообразного  $SiO_2$  имеется огромный объем разнообразной количественной информации и ряд моделей, базирующихся на разных исходных допущениях и нацеленных на объяснение отдельных фрагментов этой информации [5].

По мнению авторов работы [6], в жидком шлаке сосуществуют ассоциативные группировки или сложные молекулы, находящиеся в динамическом равновесии с молекулами компонентов. Как следствие, реакционная способность шлаков в молекулярных реакциях в большинстве случаев

оценивается с помощью крайне несовершенных теоретических зависимостей и эмпирических корреляционных соотношений [6]. В результате концепция ассоциативных растворов не решает и не может, на наш взгляд, решить ни одного из вопросов, инициирующих критическое отношение к классической ионной теории, поскольку остается неизменной свойственная ионной модели химической связи трактовка межатомного взаимодействия в оксидных расплавах. В лучшем случае речь может идти об одном из возможных вариантов реализации идеологии, развитой в работе [7]. Согласно представлениям ее авторов, логичным следует считать определение ионного состава оксидного расплава как минимального набора сортов ионов, который позволяет описать термодинамические свойства системы в заданной области составов с достаточной для практических целей степенью точности. Необходимо в связи с вышеизложенным обратить внимание на одно важное обстоятельство. Как в упомянутых, так и многих других (например, [8, 9]) работах, посвященных разработке моделей структур шлаковых расплавов и анализу межатомного взаимодействия в них, речь идет, как правило, только о термодинамических свойствах. Проблема формирования технологических свойств, равно как и связанная с ней проблема взаимодействия шлаковых и металлических расплавов если и обсуждаются, то или в общем виде, или вне взаимосвязи между собой и термодинамической информацией.

Информационную среду проведенных нами исследований процессов формирования расплавов в доменной печи составляют базы фундаментальных физико-химических данных о свойствах железорудных материалов («Шихта» [10]) и шлаковых расплавов («Шихта» [11]), а также база технологических данных [12].

В настоящее время в базу «Шихта» введено свыше 500 документов, содержащих сведения о плавкости, вязкости, энтальпии, серопоглотительной способности, плотности, поверхностному натяжению, электропроводности (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. Охвачены доменные шлаки, характерные для сырьевых условий Украины, высокоглиноземистые и высокомагнезиальные доменные шлаки, характерные для сырьевых условий комбинатов ЗСМК и КМК, титансодержащие шлаки.

В базу «Шихта» введены сведения об агломератах (более 260), окатышах (270 химсоставов), рудах, концентратах. Обширный материал представлен по прочностным свойствам в исходном состоянии и после восстановительно-тепловой обработки (более 100 экспериментальных измерений), степени восстановления (около сотни данных) и газопроницаемости. Приведены экспериментальные значения величин степени металлизации, пористости, влажности, истираемости, гранулометрического состава, плавкости и других свойств железорудного сырья.

В базе данных представлены результаты исследований теплофизических свойств железорудного сырья, приведены температурные зависимости коэффициентов тепло- и теплопроводности, а также теплоемкости от температуры для концентратов, агломератов, окатышей.

Поскольку информация о численных значениях свойств у материалов одного и того же состава по данным разных авторов существенно различается, мы посчитали целесообразным на начальной стадии своего исследования обратить особое внимание на проблему оценки достоверности опытных данных [13, 14]. С этой целью, в частности параллельно с анализом литературных данных были проведены тщательные экспериментальные исследования свойств шлаков предприятий Украины [15].

Были приготовлены девять групп опытных шлаков, различающихся содержанием  $Al_2O_3$  (6; 8; 10%),  $MgO$  (от 0 до 10%) и основностью  $CaO/SiO_2$  (от 1,1 до 1,3). Шлаки сплавлялись в молибденовых тиглях в печи Таммана в инертной атмосфере аргона из химически чистых реактивов ( $CaO$ ;  $SiO_2$ ;  $Al_2O_3$ ;  $MgO$ ;  $FeO$ ;  $MnO_2$ ) и по составу практически были идентичны реальным доменным шлакам. После сплавления шлаки охлаждали, дробили и исследовали химсостав и свойства.

Вязкость определяли в интервале температур 1500–1250°C через 50°C на вискозиметре вибро-амплитудного авторезонансного типа при охлаждении со скоростью 5 град/мин в печи Таммана в инертной атмосфере аргона. Материал тиглей – молибден. Термопара – платина – платинородиевая (ПР 30/6).

Поверхностное натяжение определяли методом максимального давления в газовом пузырьке. Материал тиглей и капилляров – молибден. Измерения производили при 1500°C в печи Таммана с инертной атмосферой (аргон). Термопара ПР 30/6. Всего исследовано 90 шлаков. Составы и свойства некоторых из них приведены в табл. 1 и 2.

Таблица 1. Состав синтетических доменных шлаков

Массовая доля компонентов, %					
$Al_2O_3$	$SiO_2$	$CaO$	$MgO$	$MnO$	$FeO$
6	41,57	45,73	6	0,4	0,3
6	39,67	43,63	10	0,4	0,3
8	41,5	49,8	–	0,4	0,3
8	39,69	57,61	–	0,4	0,3
10	40,6	48,7	–	0,4	0,3
10	37,86	45,44	6	0,4	0,3
6	41,5	49,8	2	0,4	0,3
8	41,57	45,73	4	0,4	0,3
10	37,81	43,49	8	0,4	0,3
8	35,85	45,95	10	0,4	0,3

Таблица 2. Свойства синтетических доменных шлаков

$\sigma_{1500}$ мН/м	Вязкость, Па·с, при температуре, °С						А	Еη, кДж/моль
	1250	1300	1350	1400	1450	1500		
360	–	2,1	0,95	0,6	0,48	0,35	–5,361	139,575
340	–	2	0,85	0,52	0,38	0,28	–6,001	154,931
440	–	1,8	1,5	1	0,85	0,7	–2,945	79,819
460	–	–	–	1,25	0,4	0,18	–12,567	338,871
450	2,2	1,45	1,25	1	0,9	0,75	–2,338	63,179
430	3,9	2	1,35	0,85	0,6	0,35	–5,441	143,864
380	–	0,85	0,7	0,55	0,35	0,2	–4,633	115,088
405	3	1,35	0,8	0,65	0,55	0,45	–4,324	112,139
410	5,5	2,85	1,7	0,9	0,5	0,27	–7,015	186,149
435	–	–	–	5	0,8	0,6	–13,326	373,102

Экспериментальные данные проанализированы с позиции модели упорядоченной структуры оксидных расплавов [16] с использованием разработанной в работе [17] методики определения физико-химических критериев  $\Delta d$  и  $\Delta e_n$  для оценки влияния микронеоднородности упорядоченной структуры оксидных расплавов на их свойства.

В результате получены уточненные модели для прогнозирования свойств доменных шлаков металлургических предприятий Украины:

Поверхностное натяжение при 1500°С, мН/м :

$$\sigma_{1500} = 1952,3 + 458,9\Delta e + 857,5\rho - 2501,1\Delta d + 43,9\Delta e_n \quad r=0,91 \quad (1)$$

(без учета микронеоднородности  $r=0,76$ )

Вязкость при различных температурах, Па·с:

$$\lg \eta_{1300} = -68,14 - 3,17\Delta e + 95,61\rho + 106,11\Delta d + 42,05\Delta e_n \quad r=0,82 \quad (2)$$

(без учета микронеоднородности  $r=0,67$ )

$$\lg \eta_{1400} = -99,07 - 4,64\Delta e + 121,56\rho + 166,46\Delta d + 56,13\Delta e_n \quad r=0,73 \quad (3)$$

(без учета микронеоднородности  $r=0,56$ )

$$\lg \eta_{1500} = -138,35 - 9,87\Delta e + 165,47\rho + 281,11\Delta d + 99,98\Delta e_n \quad r=0,79 \quad (4)$$

(без учета микронеоднородности  $r=0,36$ )

Приведенные уравнения получены обработкой данных о вязкости при конкретных постоянных температурах: 1300°С; 1400°С; 1500°С.

Для получения прогнозных моделей температур плавления шлаков в ИЧМ на высокотемпературном микроскопе исследована плавкость ( $T_{ин}$  – температура начала плавления и  $T_n$  – температура растекания) натуральных шлаков завода им. Петровского (76 составов) и ДП-9 «Криворожстали» (104 состава). Составы и температуры плавления некоторых шлаков приведены в табл.3, из которой видно, что диапазон колеблемости содержания компонентов в шлаке и величин  $T_{ин}$  и  $T_n$  довольно широкий и опре-

деляет представительность выборки для разработки прогнозных моделей по вышеописанной методике с использованием параметров, характеризующих микронеоднородность структуры шлаков:

Температура начала плавления, °C:

$$T_{нп} = 912,6 + 81,4\Delta e + 880,5\rho - 1369,2\Delta d - 357\Delta e_n$$

$$r=0,76; S=1,9\% (22,9^\circ\text{C}) \quad (5)$$

Температура конца плавления (растекания), °C:

$$T_{кп} = 333,6 + 39,16\Delta e + 1980,5\rho + 115,2\Delta d + 370,1\Delta e_n$$

$$r=0,84; S=1,2\% (15,5^\circ\text{C}) \quad (6)$$

Полученные уравнения в сочетании с рис.1 свидетельствуют о, казалось бы, недостаточно высокой корреляции расчетных величин с экспериментальными, что, как показывает анализ данных табл.3, может быть объяснено недостаточно точным химическим анализом шлаков. С другой стороны, довольно равномерная насыщенность корреляционного поля на рис.1 и низкая ошибка прогноза (15–23°C или 1,2–1,9%) свидетельствуют о приемлемости полученных уравнений для прогнозирования интервала плавления реальных доменных шлаков заводов Украины с достаточной для практических целей точностью.

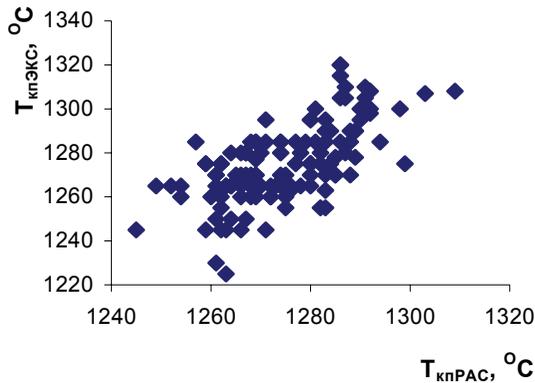


Рис.1– Сравнение экспериментальных и расчетных по уравнению (6) величин температуры конца плавления доменных шлаков

На втором этапе исследований нами были уточнены прогнозные модели для температуры плавления первичных шлаков и их вязкости при различных температурах. Изучению свойств первичных доменных шлаков посвящены работы многих авторов. При этом, несмотря на различие составов исследованных групп шлаков (высокоглиноземистых, магнезиальных, кислых, основных и т.д.), практически однозначным во всех исследованиях является вывод о значительном разжижающем влиянии  $FeO$ .

Табл.3. Состав и температуры плавления натуральных доменных шлаков

Массовая доля компонентов, %							$T_{\text{нп}},$ $^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{п}},$ $^{\circ}\text{C}$	Примечания
SiO <sub>2</sub>	CaO	MgO	MnO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	S	FeO			
43,11	43,43	4,51	0,79	6,08	1,49	0,42	1170	1235	Криворож–
41,88	45,42	4,13	0,72	7,38	1,65	0,35	1195	1270	сталь,
44,36	47,70	4,49	0,53	5,42	1,98	0,49	1240	1260	ДП–9
40,69	49,06	4,09	0,53	6,11	2,30	0,52	1265	1295	– « –
39,04	49,41	6,69	0,30	5,56	2,63	0,35	1255	1285	– « –
38,58	48,49	3,84	0,65	4,62	1,67	0,45	1250	1270	– « –
38,62	52,96	3,17	0,40	6,36	1,76	0,49	1225	1265	– « –
38,65	42,00	4,75	0,65	7,48	1,98	0,28	1220	1245	з–д им,Пет–
37,20	49,60	5,35	0,43	6,43	2,30	0,25	1290	1305	ровского
35,48	44,01	8,48	0,51	7,23	1,79	0,50	1270	1350	– « –
33,64	48,91	8,56	0,24	6,96	2,00	0,18	1247	1308	– « –
39,07	42,71	9,91	0,78	4,12	1,49	0,18	1218	1263	– « –
37,10	47,00	4,6	0,78	8,38	1,73	0,25	1193	1255	– « –

В связи с этим нами были использованы исходные данные А.А.Гиммельфарба о вязкости шлаков четырехкомпонентной системы CaO–SiO<sub>2</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–FeO, опубликованные в работе [18]. Для получения прогнозных моделей свойств шлаков, близких к шихтовым условиям «Криворожстали», в качестве базовых нами выбраны данные о шлаках с содержанием Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в диапазоне 5–10 мас.%. Температуру начала плавления шлаков определяли по кривым  $\lg \eta = f(1/T)$  при резком повышении вязкости выше 5Па·с. Температура начала плавления при нагреве твердого шлака соответствует его температуре полной кристаллизации (затвердевания) при охлаждении расплава.

В результате корреляционно–регрессионного анализа получены зависимости свойств шлаков от модельных параметров их структуры:

Температура начала плавления первичных шлаков,  $^{\circ}\text{C}$

$$T_{\text{нп}} = A_4 + B_4 \text{FeO} + C_4 \Delta e + D_4 \rho + E_4 \rho^2 \quad r=0,81 \quad (7)$$

Вязкость первичных шлаков, Па·с

$$\lg \eta = A_5 + B_5 \text{FeO} + C_5 \rho + D_5 \rho^2 + E_5 (1000/T) \quad r=0,84 \quad (8)$$

где FeO, % – содержание FeO в первичном шлаке,  $\Delta e$  – химический эквивалент шлака,  $\rho$  – стехиометрия шлака,  $T, ^{\circ}\text{C}$  – температура шлака.

Развиваемая методология физико–химического моделирования позволяет не только получить обобщающее описание ионообменных процессов по мере формирования первичных, промежуточных и конечных расплавов в печи, но и создала условия для описания закономерностей распределения кремния, серы и марганца между чугуном и шлаком как функции параметров конкретных шихтовых и технологических условий. Реализация этой возможности осуществлена в виде АРМа «Доменщик», функциони-

рующего в среде локальной вычислительной сети НПО ДМК и в условиях КГГМК «Криворожсталь» [19, 21].

Выполненный нами анализ зависимостей свойств железорудных материалов от их химсостава и известных методов прогнозирования этих свойств, свидетельствует о неоднозначности влияния различных компонентов химсостава и их соотношений на свойства [11, 20]. В частности, использование критерия основности для оценки взаимосвязи химсостава железорудных материалов с их свойствами не всегда правомочно, как и использование показателей концентрации каких либо компонентов или их соотношений. Соотношение компонентов, частным показателем которого является основность, не может служить объективным критерием для оценки свойств различных материалов, в том числе входящих в состав доменной шихты, поскольку при этом не учитывается абсолютное содержание  $\text{CaO}$  и  $\text{SiO}_2$  и недооценивается роль других компонентов, зачастую преобладающая.

Важность оценки теплофизических и термодинамических свойств в отсутствие соответствующих установок для испытания материалов на отечественных предприятиях обуславливает актуальность исследований, направленных на разработку методов прогнозирования этих свойств, что позволяет более рационально управлять тепловыми процессами и качеством продукции в нестабильных шихтовых и технологических условиях доменных плавов [22].

Для информационного обеспечения методики исследования зависимости свойств железорудного сырья от состава использовалась физико-химическая модель структуры оксидных расплавов и математический аппарат для расчета ее параметров. В результате анализа физико-химического состояния железорудных материалов в различных зонах доменной печи в процессе исследований были выявлены критерии [11, 19] характеризующие физико-химические и технологические свойства шихтовых материалов. Это позволило получить не только обобщенное описание ионообменных процессов по мере развития технологии доменной плавки и формирования соответственно первичных, промежуточных и конечных расплавов, но и создать предпосылки для прогнозирования коэффициентов распределения поступающих с шихтой элементов между конечными продуктами плавки по схеме «Шихта» + «Технология» → «Продукты плавки».

Созданная нами база данных и физико-химические критерии «свертки» информации о химическом составе явились основой для разработки моделей для прогнозирования свойств агломератов и окатышей на основе анализа их химсостава.

Необходимо отметить, что аналитическое обобщение имеющихся в базе экспериментальных данных о свойствах агломератов затруднено в связи с использованием исследователями различных методик и неидентичностью условий проведения экспериментов.

В то же время требованиями к качеству железорудного сырья приняты показатели прочности и восстановимости при восстановлении в температурном интервале 20–800<sup>0</sup>С, что соответствует верхней ступени теплообмена в доменной печи (ГОСТ 19575–84), газопроницаемости и восстановимости при 1050<sup>0</sup>С на границе косвенного восстановления (ГОСТ 21707–76):

Прочность по выходу кондиционной фракции >5 мм	$-X_{+5}, \%$ ;
Истираемость по выходу класса 0–0,5 мм	$-X_{-0,5}, \%$ ;
Степень восстановления при 800 <sup>0</sup> С	$-R_{800}, \%$ ;
Степень металлизации при 800 <sup>0</sup> С	$-\omega_{800}, \%$ ;
Усадка слоя при 1050 <sup>0</sup> С	$-\Delta H, \%$ ;
Перепад давления газового потока при 1050 <sup>0</sup> С	$-\Delta P, Pa$ ;
Степень восстановления при 1050 <sup>0</sup> С	$-R_{1050}, \%$ ;
Степень металлизации при 1050 <sup>0</sup> С	$-\omega_{1050}, \%$ ;
Температура начала размягчения	$-T_{nr}, ^\circ C$ ;
Температура плавления	$-T_n, ^\circ C$ ;

Для построения прогнозных моделей нами использованы результаты определения вышеназванных металлургических свойств агломератов и окатышей практически всех окомковательных фабрик стран СНГ, перечень которых приводится ниже, полученные на установках ИЧМ и введенные в базу данные. Для исследования выделялась фракция 10–25 мм, что исключило влияние гранулометрического состава. Технология производства железорудных материалов не учитывалась.

Перечень аглофабрик: КарМК–1, КарМК–2, м/к «Азовсталь», м/к им.Ильича, НКГОК–1, НКГОК–2, м/к «Запорожсталь», КБЖРК, НПО «Тулачермет», м/к «Криворожсталь», Коммунарского м/з, Макеевского м/з, Енакиевского м/з, ДМК–1, ДМК–2, Руставская, Лебяжья, Высокогорская, Гороблагодатская, Качканарская, НЛМК, Абагурская–1, Абагурская–2, ЗСМК, Мандыбашская, ЧерМК, ММК.

Перечень окомковательных фабрик по производству окатышей: КостГОК, СевГОК, ЦГОК, ЛебГОК, ДГОК, ССГОК, ЛисГОК, НТМК, ЧерМК.

Диапазоны содержания компонентов и свойств изученных материалов приведены в таблицах 4 и 5.

Таблица 4 – Диапазон содержания компонентов

Материал	Массовая доля, %						
	SiO <sub>2</sub>	CaO	MgO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MnO	FeO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Агломерат	4–13	6–20	0,5–5	1–5,5	0–2,5	6–36	35–77
Окатыши	3–11	0,6–9,9	0–2,5	1–5,9	–	0,5–8,5	75–91

Таблица 5 – Диапазон изменения свойств

Материал	X <sub>+5</sub> , %;	X <sub>-0,5</sub> , %;	R <sub>800</sub> , %;	ω <sub>800</sub> , %;	ΔH, %;	ΔP, Па;	R <sub>1050</sub> , %;	ω <sub>1050</sub> , %;
Агломерат	18–89	2,5–27	13–47	4–37	8–44	6–69	43–91	26–88
Окатыши	36–99	1,0–36	27–75	5–64	14–60	20–1960	35–95	17–94

Как видно из таблиц, широкий диапазон составов и свойств определяет значимость выборки для разработки прогнозных моделей.

Прогнозные модели были получены методами множественного регрессионного анализа в виде уравнений регрессии: ( $r$  – коэффициент корреляции):

Агломераты

$$X_{+5} = 731,5 - 0,81Fe_2O_3 + 0,22FeO - 1179d - 449,1\Delta e + 2286\rho \quad r=0,91 \quad (9)$$

$$X_{-0,5} = -97,9 + 0,41Fe_2O_3 + 0,04FeO + 149d + 56,2\Delta e - 286\rho \quad r=0,88 \quad (10)$$

Окатыши

$$X_{+5} = -2699,6 - 302,95\Delta e - 794,3\rho + 2683,69Z_{(k-a)} - 2200Z_{(k-k)} + 1,46Fe_2O_3 \quad r=0,94 \quad (11)$$

$$X_{-0,5} = 1191,6 + 124,2\Delta e + 414,7\rho - 1191,1Z_{(k-a)} + 986,38Z_{(k-k)} - 0,68Fe_2O_3 \quad r=0,82 \quad (12),$$

где  $Z_{(k-a)}$  – заряд катионов в связи катион–анион;  $Z_{(k-k)}$  – заряд катионов в связи катион–катион.

Агломераты

$$R_{800} = -136,1 + 1,2Fe_2O_3 + 0,28FeO + 29,08d + 6,4\Delta e + 25,9\rho \quad r=0,87 \quad (13)$$

$$\omega_{800} = -96,3 + 0,71Fe_2O_3 + 0,23FeO - 84,73d - 45,48\Delta e + 268,7\rho \quad r=0,89 \quad (14)$$

$$\Delta H = 134,9 - 1,1Fe_2O_3 - 2,14FeO + 80,37d + 10,64\Delta e - 300,94\rho \quad r=0,84 \quad (15)$$

$$\Delta P = 939,5 + 0,6Fe_2O_3 - 0,46FeO - 1075d - 398,2\Delta e + 1622\rho \quad r=0,93 \quad (16)$$

$$R_{1050} = -12,54 + 0,31Fe_2O_3 - 0,18FeO + 97,3d + 49,52\Delta e - 133,1\rho \quad r=0,67 \quad (17)$$

$$\omega_{1050} = -100,16 + 0,33Fe_2O_3 + 0,27FeO + 132,7d + 61,45\Delta e - 132,07\rho \quad r=0,78 \quad (18)$$

$$T_{np} = 824,7 + 0,97Fe_2O_3 + 1,66FeO - 60,56\Delta e + 215,39\rho \quad r=0,66 \quad (19)$$

$$T_n = 1523,8 + 2,1Fe_2O_3 + 2,68FeO - 58,83\Delta e - 592,5\rho \quad r=0,74 \quad (20)$$

В случае необходимости прогнозирования свойств металлургического сырья для смеси агломерат + окатыши предлагаются следующие модели:

$$R_{800} = 159,1 + 1,02Fe_2O_3 + 6,9\Delta e + 75,1\rho - 211,9Z_{(k-a)} + 199,7Z_{(k-k)} \quad r=0,92 \quad (21)$$

$$\omega_{800} = 290,5 + 0,88Fe_2O_3 - 11,7\Delta e + 27,5\rho - 311,1Z_{(k-a)} + 316Z_{(k-k)} \quad r=0,88 \quad (22)$$

$$R_{800} = 108,5 + 0,56Fe_2O_3 + 57,6\Delta e + 177,31\rho - 148,4Z_{(k-a)} + 72,1Z_{(k-k)} \quad r=0,79 \quad (23)$$

$$\omega_{1050} = -462 + 0,82Fe_2O_3 + 47,16\Delta e + 219,12\rho + 305,94Z_{(k-a)} - 345,18Z_{(k-k)} \quad r=0,85 \quad (24)$$

$$\Delta H = 624 - 0,2Fe_2O_3 - 8,7\Delta e - 171,4\rho - 404Z_{(k-a)} + 397,4Z_{(k-k)} \quad r=0,80 \quad (25)$$

$$\Delta P = 1852 + 0,64Fe_2O_3 + 202,3\Delta e - 82,1\rho - 1455,9Z_{(k-a)} + 1143,2Z_{(k-k)} \quad r=0,72 \quad (26)$$

Прогнозные модели предусматривают использование исходной информации только о химическом составе агломератов без учета технологии их получения и в целом обеспечивают удовлетворительную точность прогноза для практических целей. Резервом повышения точности прогноза является надежность и полнота исходной информации о химическом составе и учет технологических показателей агломерационного производства.

Разработанные модели обеспечивают удовлетворительную точность прогнозирования свойств для практических целей. Полученные прогнозные уравнения могут быть использованы для сертификации железорудных материалов, поступающих на доменную печь, и прогнозирования зоны плавления доменной шихты.

Разработанная методика программно реализована на ПЭВМ для прогнозирования свойств при изменении состава и соотношения исходных шихтовых компонентов в условиях производства агломерата.

Приведенные результаты являются убедительной иллюстрацией плодотворности и перспективности использования методологии физико-химического моделирования при решении актуальных проблем материаловедения в металлургии. Фундамент этих исследований, заложенный при поддержке академика Некрасова З.И., является, в частности, надежной основой научно-технического прогресса в изучении свойств как шихтовых материалов, так и продуктов доменной плавки.

1. *Сидоров Т.А.* Молекулы и сильное электростатическое межмолекулярное взаимодействие в стеклах. //Неорганические материалы. –1991. –т.27. –№11. –С.397–401.
2. *Соболев В.В.* Проблемы взаимосвязи электронной структуры некристаллических веществ и кристаллов. //Физика и химия стекла. –1995. –т.21. –№1. –С.3–16.

3. *Варшал Б.Г.* К вопросу о структурной модели силикатных стеклообразующих расплавов и стекол. //Физика и химия стекла. –1983. –т.19. –№1. –С.12–23.
4. *Езиков В.И., Пасишник С.В.* Структура анионов в расплавах  $RxOy-SiO_2$  ( $R=Ca, Pb, Bi$ ). //Физика и химия стекла. –1995. –т.21. –№1. –С.87–96.
5. *Леко В.К.* Структура стеклообразного кремнезема. //Физика и химия стекла. –1983. –т.19. –№5. –С.673–715.
6. *Зайцев А.И., Мосутов Б.М.* Новый взгляд на природу шлаковых расплавов. //Сталь. –1994. –№9. –С.17–22.
7. *Барабошкин А.Н., Хватов А.Ю.* Ионный состав поливольфраматных расплавов. //Электрохимия. –1994. –т.30. –№1. –С.83–86.
8. *Моисеев Г.К., Ватолин Н.А.* Термодинамическое моделирование: содержание, применение проблемы. //Расплавы. –1990. –№5. –С.15–40.
9. *Белащенко Д.К.* Компьютерное моделирование расплавов и стекол системы  $CaF_2-SiO_2$ . //Неорганические материалы. –1995. –т.31. –№2. –С.230–236.
10. *От баз данных к базам знаний о свойствах металлургических шлаков / Д.Н.Тогобицкая, А.Ф.Хамхотько, А.И.Белькова, Ю.М.Лихачев* //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. –2004. –Вып.9. –С.225–232.
11. *Приходько Э.В., Хамхотько А.Ф., Тогобицкая Д.Н.* База данных и модели для прогнозирования плавкости железорудных материалов. //Сталь. –1998. –№9. –С.7–9.
12. *Товаровский И.Г.* Перспективы создания и использования баз технологических данных о работе металлургических агрегатов. //Металлы. –1991. –№5. –С.217–221.
13. *Тогобицкая Д.Н., Хамхотько А.Ф., Лихачев Ю.М.* Создание баз физических данных о свойствах шлаковых расплавов в рамках банка данных «Металлургия», создание, развитие, перспектива. Сб.тр. VII Всесоюзной конференции. –Челябинск. –1990.
14. *Оценка достоверности экспериментальных данных о свойствах доменных шлаков заводов Украины / Д.Н.Тогобицкая, А.Ф.Хамхотько, А.И.Белькова, П.И.Оторвин* //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. –2003. –Вып.6. –С.85–92.
15. *Хамхотько А.Ф., Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И.* Роль микронеоднородности структуры в формировании свойств доменных шлаков металлургических предприятий Украины. //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. –2002. –Вып.5. –С.90–95.
16. *Приходько Э.В.* Физико–химическая модель структуры шлаковых расплавов // Сталь. –1990. –№10. –С.14–22.
17. *Приходько Э.В., Белькова А.И.* Физико–химические критерии для оценки влияния микронеоднородности структуры оксидных расплавов на их свойства // Теория и практика металлургии. –Днепропетровск. –1998. –№3. –С.25–28.
18. *Гиммельфарб А.А.* К вопросу о выборе оптимального состава первичного шлака доменной плавки. //Сб. «Шлаковый режим доменных печей». –М.: Металлургия. –1967. –С.84–98.
19. *Гладков Н.А., Тогобицкая Д.Н.* Физико–химическое состояние железорудных материалов в различных зонах доменной печи и их высокотемпературные свойства. //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. –1999. –Вып.3. –С.40–48.

20. Выбор состава доменной шихты, обеспечивающей заданные свойства шлака / А.И.Белькова, Д.Н.Тогобицкая, А.Ф.Хамхотько, Н.М.Можаренко // Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. – 2001. –Вып.4. –С.51–55.
21. *Тогобицкая Д.Н.* Моделирование межфазного распределения элементов в системе «металл–шлак» при выплавке чугуна. //Металлургическая и горнорудная промышленность. –1999. –№1. –С.115–119.
22. *Хамхотько А.Ф., Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И.* Прогнозирование теплофизических и термодинамических характеристик продуктов аглодоменного производства. //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. Сб.н.тр. ИЧМ. –2001. –Вып.4. –С.247–250.

*Сведения об авторах:*

**Приходько Эдуард Васильевич**, докт.техн.наук, профессор, заведующий отделом физико-технических проблем металлургических процессов Института черной металлургии НАН Украины;

**Тогобицкая Дарья Николаевна**, докт.техн.наук, профессор, старший научный сотрудник отдела физико-технических проблем металлургических процессов Института черной металлургии НАН Украины.