

Биткін Сергій Віталійович, здобувач, кандидат технічних наук, доцент, ORCID: 0000-0003-3583-3371

Критська Тетяна Володимирівна, доктор технічних наук, професор, Запорізький національний університет, ORCID: 0000-001-6933-0460

МОДЕЛЮВАННЯ РОЗКИСЛЕННЯ СТАЛІ З ВИКОРИСТАННЯМ Mn, Si, Al У ОБЧИСЛЮВАНОМУ СЕРЕДОВИЩІ MathCAD ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ РІЗНИХ МЕТОДІВ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ РОЗРАХУНКОВИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Для моделювання розкислювання стали традиційними домішками (Mn, Si, Al) запропонована методика використання MathCAD, що включає різні елементи розрахунку і візуалізації отриманих результатів. Методом обчислювального експерименту показано, що при введенні розкислювача, R, тобто збільшенні [R], відбувається нелінійне зменшення концентрації розчиненого кисню [O] і модуля чисельного значення $(d[O])/dR$. Аналіз характеру зміни швидкості реакції розкислювання, $d/dR(d[O])/dR$, вказує на існування концентрації R, при якій спостерігається «злам» залежності (виявлене зниження кута нахилу функції $d/(dR)(d[O])/dR=f([R])$), тобто яскраво виражене зменшення зміни швидкості зниження концентрації [O]. Іншими словами, починаючи з певного значення [R], збільшення концентрації розкислювача не ефективно. Запропоновані оптимальні розрахункові концентрації розкислювачів. Гранично необхідними концентраціями розкислювачів [mass%], при яких швидкість зменшення змісту розчиненого в сталі [O] практично дорівнює нулю, являються: [Mn] $\approx 0,85$; [Si] $\approx 3,35$; [Al] $\approx 0,05$. Технологічну концентрацію [Al], ймовірно, можна зменшити до $\sim 0,015\%$ (точка «зламу»), що теоретично дозволить зменшити [O] до $\sim 1,7 \cdot 10^{-3}$ ppm при $t \cong 1600$ °C. Обґрунтоване припущення, що для розкислення сталі з використанням кремнію оптимальною є концентрація [Si] $\cong 0,5\%$. Для марганцю такий підхід не представляється прийнятним, для слабого розкислювача недоцільно використовувати другу точку «зламу», оскільки при концентрації [Mn] $\sim 0,207\%$ у розрахунковому експерименті спостерігається [O] $\sim 0,2\%$, а якщо застосувати чисельне значення [Mn] $\sim 0,85\%$ то розрахункове значення [O] $\sim 0,05\%$, тобто у чотири рази менше. Запропонована методика моделювання дозволяє визначити гранично допустиму концентрацію розчиненого в металі кремнію [Si], використовуюваного для його розкислювання, яка відповідає його концентрації, при якій спостерігається прояв зміни напряму реакції зв'язування [O] відповідно до принципу Ле Шательє – Брауна. При [Si] $\cong 3,35$ mass % швидкість розкислення практично дорівнює нулю. Зміна (збільшення) концентрації [Si] призводить до зміщення рівноваги у напрямі, що протидіє зробленій зміні, а саме: збільшення концентрації розкислювача призводить до зростання швидкості збільшення концентрації кисню.

Ключові слова: моделювання, обчислювальний експеримент, MathCAD, розкислення, оптимальна концентрація розкислювача

Постановка проблеми у загальному вигляді. Проведення попереднього аналітичного та/або чисельного моделювання металургійних фізико-технологічних процесів [1], що протікають у високотемпературному або іншому агресивному середовищі, дозволяє проводити обмежену кількість дорогих експериментальних досліджень з метою оптимізації виробничого процесу [2]. Математичне моделювання завжди виконується при досить великих припущеннях, тому при застосуванні існуючих математичних моделей для розрахунків неможливо врахувати всі особливості складних фізичних процесів [3].

Підтвердження відповідності розрахунків реальному протіканню досліджуваного фізичного явища проводиться експериментально або шляхом порівняння отриманих результатів з даними, представленими в довідковій літературі. Можливість активного використання аналітичних методів обумовлена можливістю застосування пакетів для математичних обчислень, наприклад, Statistica, MatLab, MathCAD, Maple, Mathematica та ін. [4]. В той же час, практичне застосування розрахунково-аналітичних методів не отримало досить широкого поширення у виробничій практиці [5], тому актуальною є розробка прикладних методів розрахунку характеристик технологічних процесів з використанням програм, які можуть бути застосовані технологами в умовах промислового підприємства.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Моделювання не є розвитком (удосконаленням) теорії або заміною експерименту, це специфічна міждисциплінарна форма отримання прикладних (емпіричних) наукових знань [6], що припускає використання значних обчислювальних ресурсів. Більшість реальних технологічних процесів і математичних моделей, що відповідають їм, не лінійна, як і рівняння, що однозначно описують об'єкт моделювання (математична постановка завдання моделювання). По суті, найбільш правильним підходом є застосування моделювання як обчислювального експерименту, що частково замінює дорогий і складний (як організаційно, так і технічно) технологічний експеримент. З використанням методів, вживаних прикладною математикою, специфіка розробки і застосування моделей для вирішення прикладних завдань в різних областях дуже докладно проаналізована в [7; 8]. Для проведення моделювання розроблена велика кількість різних математичних пакетів; порівняльний аналіз їх переваг і недоліків, сфер застосування—окреме дослідницьке завдання. З точки зору рішення прикладних розрахункових завдань заводськими технологами переважно використати одну з найпопулярніших математичних систем—MathCAD, що має, з точки зору рішення практичних завдань інженера-технолога, фактично необмежений набір інструментальних, інформаційних і графічних засобів. Це ефективно і відносно просте універсальне обчислювальне середовище, яке спочатку створювалося для чисельного вирішення математичних завдань, у тому числі з використанням інструментів символічної математики, вбудованої системи автоматичного перерахунку одиниць вимірів, зручної системи візуального представлення результатів розрахунку. Важливою перевагою пакету є доступність в мережі інформаційних і навчальних матеріалів різної складності [9; 10]. Показана можливість спільного практичного використання прикладних пакетів STATISTICA, MathCAD для попередньої оцінки ефективності застосування нового технологічного рішення, зокрема, проведений статистичний аналіз експериментальних даних по експериментально-дослідній плавці 09Г2Д із застосуванням феросилікоалюмінія [11].

Виділення невирішених науково-технічних завдань. У роботі [12] проведений термодинамічний розрахунок процесів розкислювання сталі с застосуванням Mn, Si і Al з використанням пакету MathCAD, але використана обмежена методика його застосування (використовується тільки двовимірна графіка, не розглядається можливість застосування проекцій поверхні, що відбиває концентрацію розчиненого в сталі кисню як функції двох змінних (температури металу і концентрації розкислювач), не наводяться тексти програм (лістингів), що виключає практичне застосування технологами запропонованих алгоритмів розрахунків.

Метою цієї роботи є підтвердження можливості практичного застосування технології проведення розрахунків із застосуванням MathCAD для вирішення завдань оптимізації традиційного розкислювання сталі із застосуванням Mn, Si і Al.

Виклад основного матеріалу. З точки зору застосування обчислювальних пакетів і розрахункових методів зручне застосування керівництв з детальним описом модельованих процесів, наприклад [13]. Для розрахунку залежності концентрації розчиненого в сталі кисню [O], при розкислюванні Mn при різній температурі використовуємо рівняння, приведені в [14], записані у формі, прийнятій в MathCAD (лістинг 1).

$Mn + 1/2 O_2 = MnO$ - власне процес розкислення

$$\Delta G0_MnO(T_steel) := -95400 + 19.7 \cdot (T_steel)$$

$Mn = [Mn]$ реакція розчинення марганцю в сталі

$$\Delta G0_Mn_Mn_in_steel(T_steel) := 1320 - 9.35 \cdot (T_steel)$$

$1/2 O_2 = [O]$

$$\Delta G0_O2_O_in_steel(T_steel) := -28000 - 0.69 \cdot T_steel$$

$$\Delta G0_in_steel_deoxidation_by_Mn(T_steel) := \Delta G0_MnO(T_steel) - \Delta G0_Mn_Mn_in_steel(T_steel) - \Delta G0_O2_O_in_steel$$

$$e0Mn := -0.021$$

$$f0(Mn_cont) := 10^{e0Mn \cdot Mn_cont}$$

$$KMn(T_steel) := 10^{\frac{-\Delta G0_in_steel_deoxidation_by_Mn(T_steel)}{2.3 \cdot Universal_gas_constant \cdot T_steel}}$$

$$Oxygen_in_steel(Mn_cont, T_steel) := \frac{1}{Mn_cont \cdot f0(Mn_cont) \cdot KMn(T_steel)}$$

$$t_steel := 1400, 1400 + 25.. 1800$$

$$Oxygen_in_steel_t_steel(Mn_cont, t_steel) := \frac{1}{Mn_cont \cdot f0(Mn_cont) \cdot KMn(t_steel + 273.15)}$$

$$Oxygen_t_steel(Mn_cont, t_steel) := CreateMesh(Oxygen_in_steel_t_steel, 0.1, 2.5, 1450, 1750, 20)$$

Лістинг 1 – Рівняння для розрахунку концентрації [O, масовий %] у MathCAD при розкислюванні сталі Mn при різних температурах (°C)

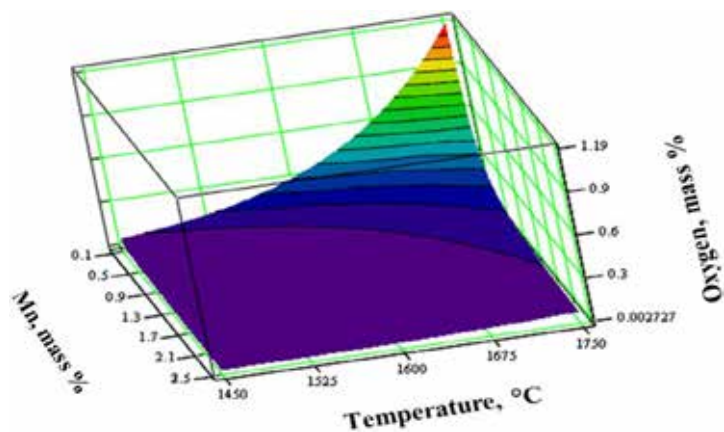
Представлення результатів обчислень у вигляді поверхні дозволяє наочно якісно оцінити поєднання концентрацій Mn і температури розкислювання для досягнення заданої концентрації [O, mass %] (рис. 1).

З точки зору застосування MathCAD для технологічних розрахунків зручно використати двовимірний графік з відображенням функції двох змінних на площині (рис. 2).

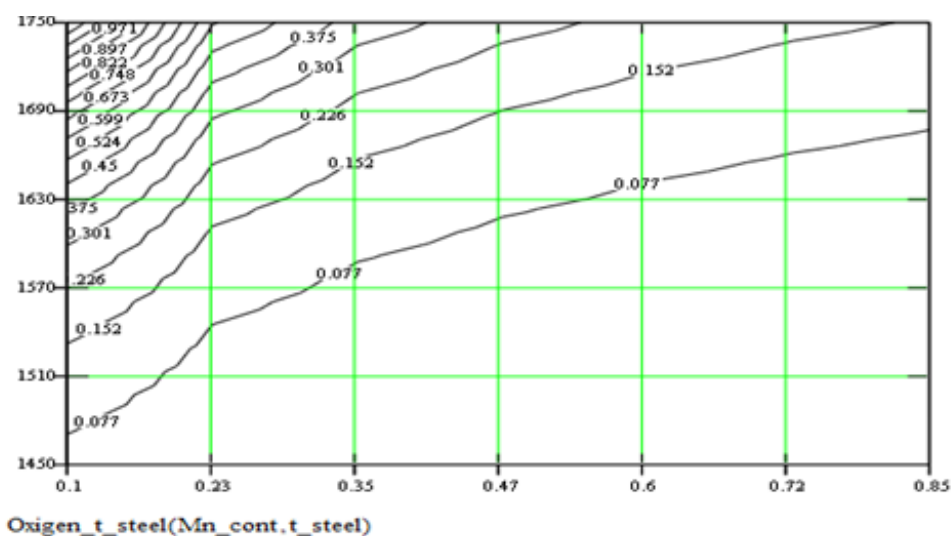
Для оптимізації концентрації Mn, вживаного для розкислювання, розрахуємо швидкість зміни [O] при [Mn], $t \text{ } ^\circ\text{C} = \text{var}$ (рис. 3).

Модель наочно представляє зміну зниження швидкості протікання процесу при $[Mn] \cong 0,154$ і $0,207$ mass %; при $[Mn] \cong 0,85$ mass% швидкість розкислювання практично дорівнює нулю. Аналогічно проводиться розрахунок залежностей зниження [O] при використанні Si як розкислювача (лістинг 2).

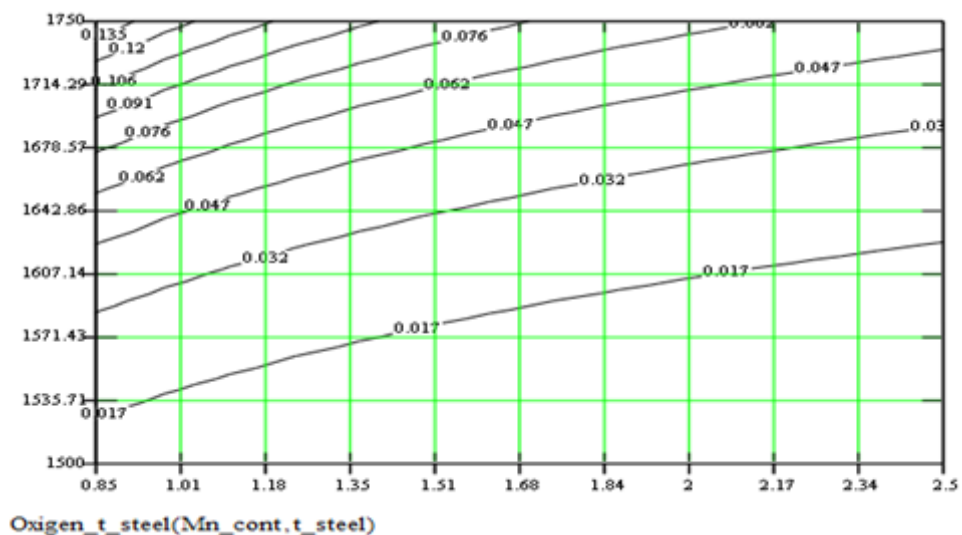
Результати розрахунків наведені на рис. 4.



а



б



в

а – поверхня відгуку $[O] = f([Mn], t \text{ } ^\circ\text{C})$; б, в – лінії рівня для різних діапазонів $[Mn]$ і $t \text{ } ^\circ\text{C}$
 Рисунок 1 – Візуалізація результатів розрахунків концентрації кисню $[O]$, масовий % у сталі при розкислюванні Mn при різних температурах

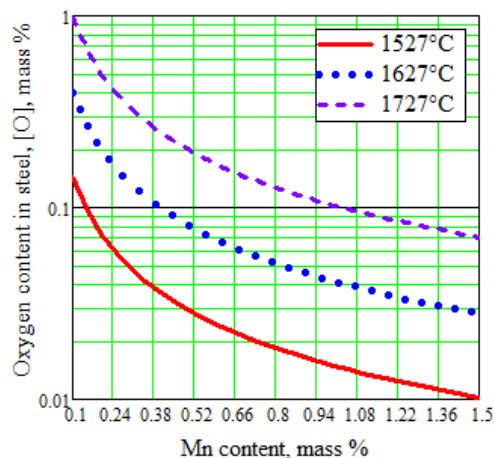
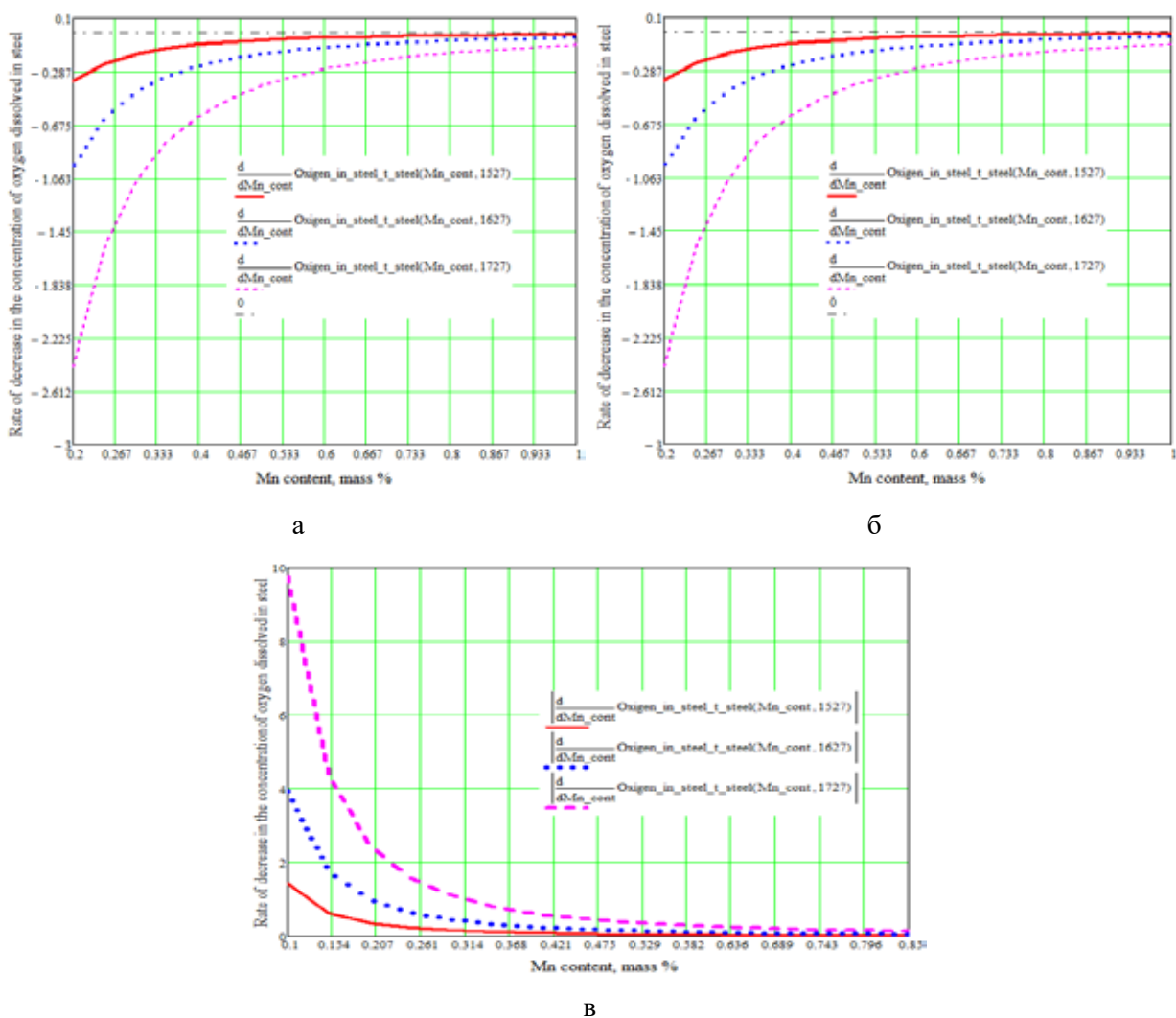


Рисунок 2 – Автоматизована номограма для розрахунку концентрації кисню, розчиненого в сталі [O], mass%, при різному змісті в ній Mn при різних t °C

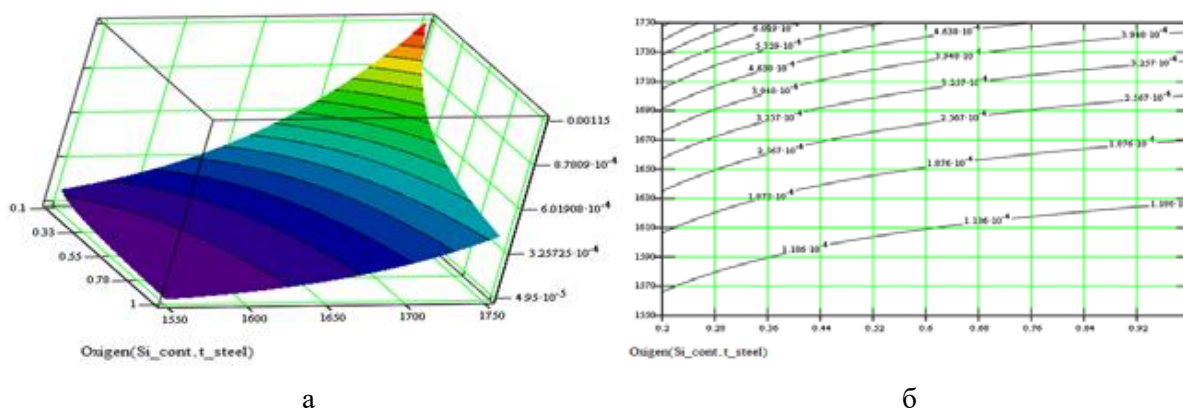


а – зменшення швидкості розкислювання при різних концентраціях Mn і t °C;
б, в – те ж при побудові залежності модулів величини швидкості зменшення [O]
від концентрації [Mn] і t °C

Рисунок 3–Швидкість зміни концентрації розчиненого в сталі кисню

$$\begin{aligned}
 &[\text{Si}] + 2[\text{O}] = \text{SiO}_{2\text{тв.}} \quad \text{- власне процес розклення} \\
 &\Delta G_0_{\text{SiO}_2}(\text{T_steel}) := -215567 + 40.83 \cdot \text{T_steel} \\
 &\text{Si} = [\text{Si}] \quad \text{реакція розчинення Si у сталі} \\
 &\Delta G_0_{\text{Si_Si_in_steel}}(\text{T_steel}) := -31500 - 4.14 \cdot \text{T_steel} \\
 &1/2 \text{O}_2 = [\text{O}] \\
 &\Delta G_0_{\text{O}_2_{\text{O_in_steel}}}(\text{T_steel}) := -28000 - 0.69 \cdot \text{T_steel} \\
 &\Delta G_0_{\text{in_steel_deoxidation_by_Si}}(\text{T_steel}) := \Delta G_0_{\text{SiO}_2}(\text{T_steel}) - \Delta G_0_{\text{Si_Si_in_steel}}(\text{T_steel}) - \Delta G_0_{\text{O}_2_{\text{O_in_steel}}}(\text{T_steel}) \\
 &\text{KSi}(\text{T_steel}) := 10^{\frac{-\Delta G_0_{\text{in_steel_deoxidation_by_Si}}(\text{T_steel})}{2.3 \cdot \text{Universal_gas_constant} \cdot \text{T_steel}}} \\
 &f_0(\text{Si_cont}) := 10^{e_0\text{Si} \cdot \text{Si_cont}} \quad e_0\text{Si} := -0.13 \\
 &\text{Oxygen_cont_in_steel}(\text{Si_cont}, \text{T_steel}) := \left(\frac{1}{\text{Si_cont} \cdot f_0(\text{Si_cont}) \cdot \text{KSi}(\text{T_steel})} \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &\text{Oxygen_in_steel}(\text{Si_cont}, \text{t_steel}) := \sqrt{\frac{1}{\text{Si_cont} \cdot f_0(\text{Si_cont}) \cdot \text{KSi}(\text{t_steel} + 273.1)}} \quad \text{t_steel} := 1500, 1500 + 25..1800 \\
 &\text{T_steel}(\text{t_steel}) := \text{t_steel} + 273.15 \\
 &\text{Oxygen}(\text{Si_cont}, \text{t_steel}) := \text{CreateMesh}(\text{Oxygen_in_steel}, 0.1, 1, 1550, 1750, 50) \quad \text{Si_cont} := 0.1, 0.1 + 0.01..5
 \end{aligned}$$

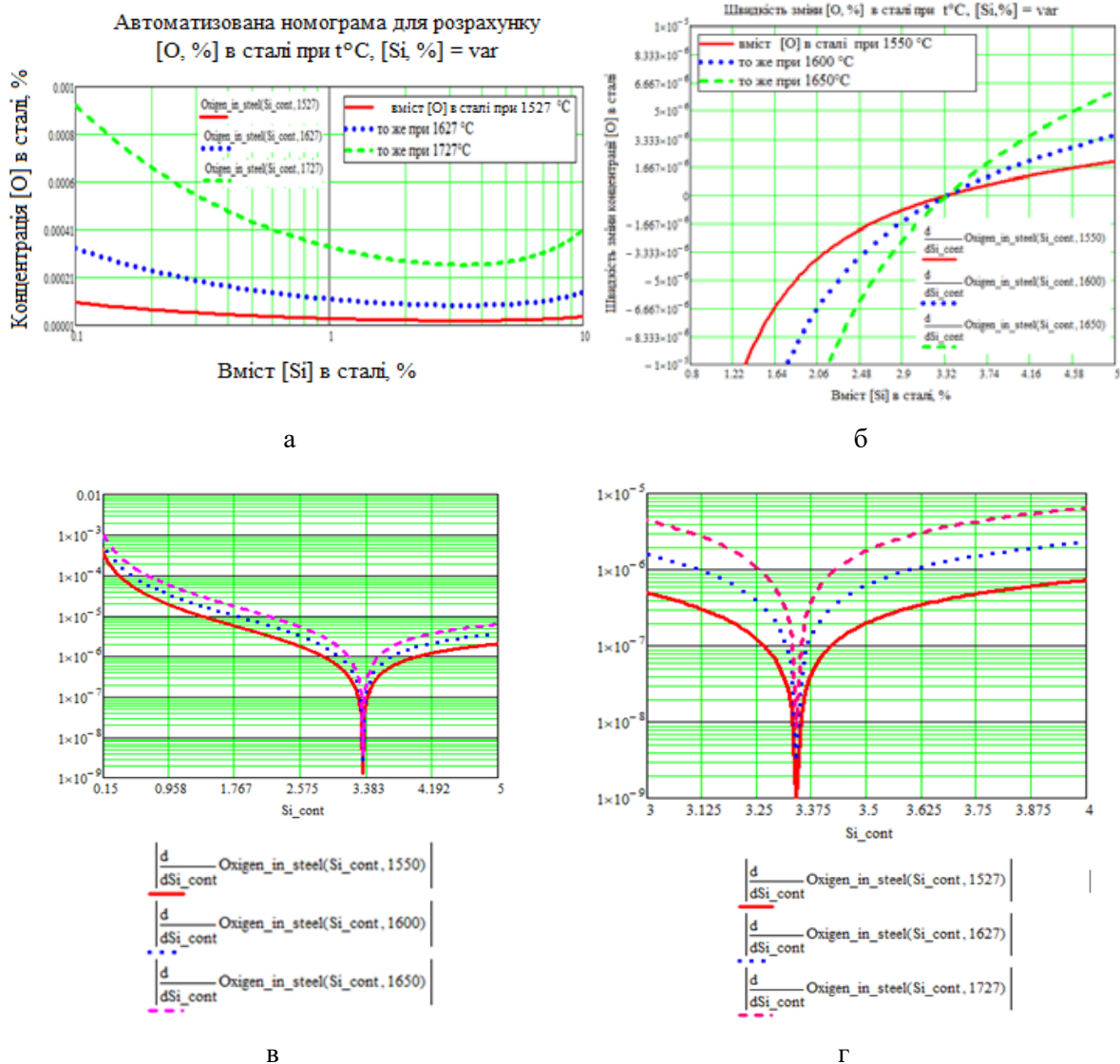
Лістинг 2 – Рівняння для розрахунку концентрації [O, масовий %] у MathCAD при розкислюванні сталі Si при різних температурах (°C)



а – поверхня відгуку [O] = f([Si], t °C); б – лінії рівня для різних чисельних значень [Si] і t °C
 Рисунок 4 – Візуалізація результатів розрахунків концентрації кисню [O, масовий %] у сталі при розкислюванні Si при різних температурах

Для оптимізації концентрації Si, вживаного для розкислювання, розрахуємо швидкість зміни [O] при [Si], t °C = var, рис. 5.

Запропонована методика моделювання дозволяє набагато точніше визначити гранично допустиму концентрацію розчиненого в металі кремнію [Si], використовуюваного для його розкислювання, яка відповідає його концентрації, при якій спостерігається прояв зміни напряму реакції зв'язування [O] відповідно до принципу Ле Шательє – Брауна. Зміна (збільшення) концентрації [Si] призводить до зменшення рівноваги у напрямі, що протидіє зробленій зміні [15; 16]. Іншими словами, збільшення концентрації розкислювача призводить до зростання швидкості збільшення концентрації кисню.



а – залежність концентрації кисню, розчиненого в сталі [O], mass%, при різному вмісті Si і $t^{\circ}\text{C}$;
 б – зменшення швидкості розкислювання при різних концентраціях Si і $t^{\circ}\text{C}$; в, г – те ж при
 побудові залежності модулів величини швидкості зменшення [O] від концентрації [Si]
 Рисунок 5 – Зміна концентрації розчиненого в сталі кисню при розкислюванні кремнієм

Можливий дещо інший підхід до оцінки швидкості розкислювання сталі кремнієм, залежною від його концентрації, рис. 6. Зміна швидкості зменшення концентрації [O] практично припиняється при $[\text{Si}] \cong 7 \mp 1 \text{ mass \%}$ (рис. 6, а), але з точністю, достатньою для практичного застосування, можна вважати, що для розкислювання оптимальна концентрація $[\text{Si}] \cong 0,5 \text{ mass \%}$ (рис. 6, б)– $[\text{O}] \leq 2 \text{ ppm}$ при 1627°C . Це значення [Si] підтверджується в роботі [17]. При вмісті Si більше 0,5%, в зоні термічного впливу зварного з'єднання утворюється велика кількість мартенситно-аустенітної складової, що призводить до помітного зниження ударної в'язкості і погіршення механічних властивостей зварного шва.

Для розкислювання сталі Al потрібно меншу концентрацію реагенту, рис. 7. Достатній ефект розкислювання проявляється при вмісті Al не менше 0,01%, але при його вмісті більше 0,08% може збільшитися концентрація неметалічних включень у сталі, і, внаслідок цього, знизитися її ударна в'язкість [18].

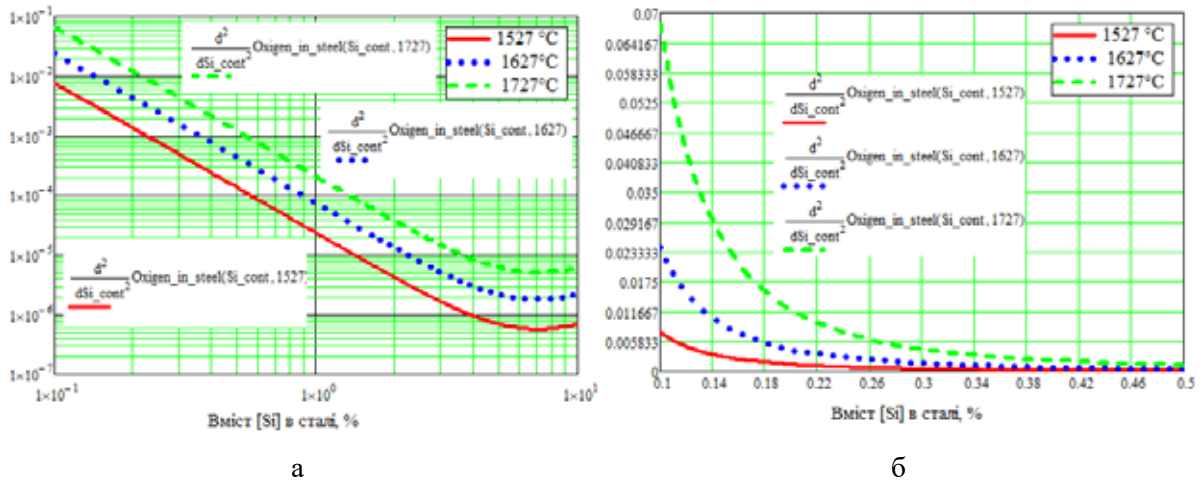
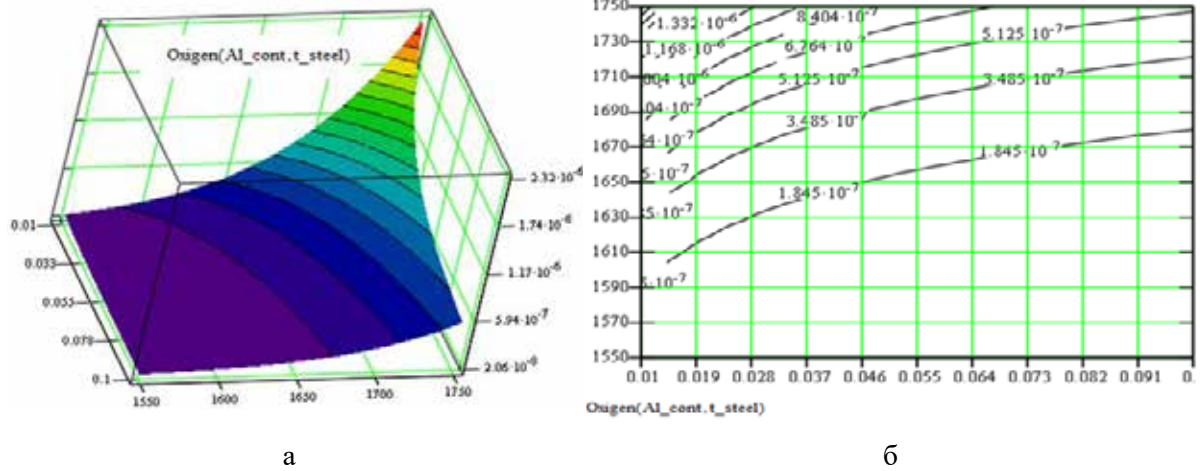


Рисунок 6 – Зміна швидкості зниження концентрації розчиненого в сталі кисню при розкислюванні кремнієм, побудовані в різних координатах: логарифмічна (а) і прямокутна (б) система координат

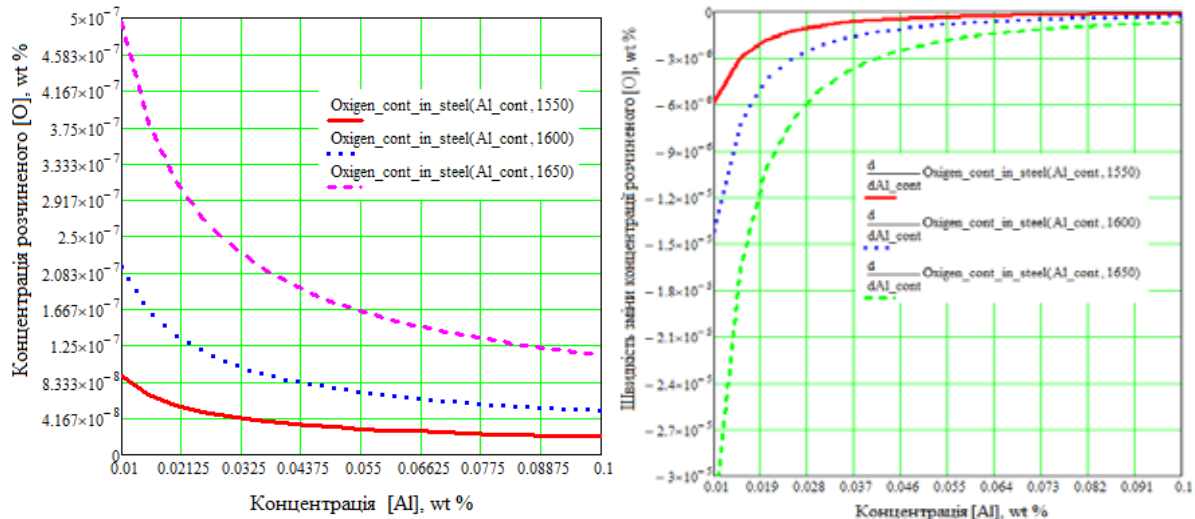


а – поверхня відгуку $[O] = f([Al], t^{\circ}C)$; б – лінії рівня для різних чисельних значень $[Al]$ і $t^{\circ}C$
 Рисунок 7 – Візуалізація результатів розрахунків концентрації кисню $[O]$, масовий% у сталі при розкислюванні Al при різних температурах

Для оптимізації концентрації Al, вживаного для розкислювання, розрахуємо швидкість зміни $[O]$ при $[Al], t^{\circ}C = var$ і залежність зміни швидкості розкислювання від $[Al]$, рис. 8.

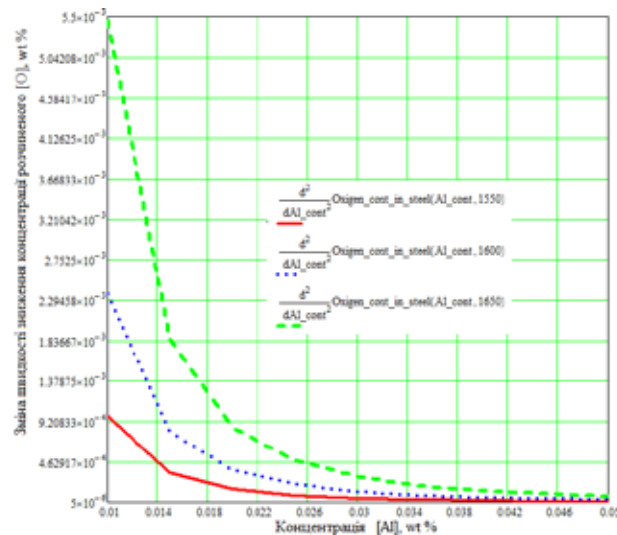
При проведенні моделювання використовується термодинамічний підхід [18; 19], що припускає, що кращим окисником є хімічний елемент, що забезпечує мінімальний вміст розчиненого кисню $[O]$ при власному мініальному залишковому вмісті в сталі, оскільки продукт реакції розкислювання не повинен залишатися у вигляді неметалічних включень. Крім того, потрібне можливо повніше засвоєння розкислювача, що досягається тільки при високій швидкості реакції зменшення концентрації кисню, такі дані зазвичай відсутні. При введенні додаткової кількості розкислювача, R, тобто збільшенні $[R]$, відбувається нелінійне зменшення концентрації розчиненого кисню $[O]$

і одночасне зменшення чисельного значення (модуля) $\frac{d[O]}{dR}$. Аналіз характеру зміни швидкості реакції розкислювання, $\frac{d}{dR} \frac{d[O]}{dR}$, зокрема на рис. 8, в вказує на існування



а

б



в

а – залежність концентрації кисню, розчиненого в сталі [O], mass %, при різному змісті Al і t°C;

б – зменшення швидкості розкислювання при різних концентраціях Al і t°C;

в – залежність зміни швидкості зменшення [O] від концентрації [Al] і t°C

Рисунок 8 – Зміна концентрації і швидкості зниження концентрації розчиненого в сталі кисню при розкислюванні алюмінієм

концентрації R, при якій спостерігається «злам» залежності (виявлене зниження кута нахилу функції $\frac{d}{dR} \frac{d[O]}{dR} = f([R])$, тобто яскраво виражене зменшення зміни швидкості зниження концентрації [O]. Іншими словами, починаючи з певного значення [R], збільшення концентрації розкислювача не ефективно, не впливає на його засвоєння (низька швидкість реакції розкислення) і домішка, якщо її не передбачається використати як легуючий елемент, стає баластом.

Таким чином, з розрахункової точки зору гранично необхідними концентраціями розкислювачів [mass %], при яких швидкість зменшення змісту розчиненого в сталі [O] практично дорівнює нулю, являються: [Mn] \approx 0,85; [Si] \approx 3,35; [Al] \approx 0,05.

Але технологічну концентрацію [Al], ймовірно, можна зменшити до $\sim 0,015\%$ (точка «зламу» на рис. 8, в), що теоретично дозволить зменшити [O] до $\sim 1,7 \cdot 10^{-3}$ ppm при $t \cong 1600$ °C. Можна зробити обґрунтоване припущення, що для розкислення сталі з використанням кремнію оптимальною є концентрація [Si] $\cong 0,5\%$ (рис. 6, б). Для марганцю такий підхід теж представляється прийнятним, але, скоріш за все, для слабкого розкислювача краще використовувати другу точку «зламу» (рис. 3, в) оскільки при концентрації [Mn] $\sim 0,207\%$ у розрахунковому експерименті спостерігається [O] ~ 20 ppm, рис. 2.

Висновки з проведеного дослідження та перспективи подальшого пошуку. Для моделювання розкислювання сталі традиційними домішками запропонована методика використання MathCAD, що включає різні елементи розрахунку і візуалізації отриманих результатів. Методом обчислювального експерименту показано, що розрахунок оптимального вмісту розкислювача можливий із застосуванням аналізу зміни швидкості зменшення розчиненого у сталі кисню [O]. Ця характеристика має складний характер, спостерігаються її різкі зміни («злами»). Концентрація [R], коли цей ефект спостерігається, теоретично може розглядатися як оптимальна з технологічної точки зору для реагенту, використовуваного для розкислення. Отже, подальшим напрямом дослідження логічно розглядати проведення відповідного експерименту.

Бібліографічний перелік

1. Echterhof, T., Ohno, K.-I., Visuri, V.-V. Modeling and Simulation of Metallurgical Processes in Ironmaking and Steelmaking. *Metals*, 2022. № 12. P. 1185.
2. Kuniharu Ito, Tetsuaki Kurokawa, Masanori Shioya, Hirokazu Kobayashi, Masatoshi Ago, Junichi Mori. Production Planning and Scheduling Technology for Steel Manufacturing Process. *Nippon steel & sumitomo metal technical report*, 2019. No. 121. P. 31–47.
3. Wendelstorf Jens. Metallurgical Process Modelling. *STEELSIM – 2007*. Graz/Seggau, Austria. P. 433–438.
4. Прудковский Б.А. Зачем металлургу математические модели? / Отв. ред. П.И. Полухин. Изд. 3-е. Москва : Издательство ЛКИ, 2010. 200 с.
5. Звонарев С.В. Основы математического моделирования. Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2019. 112 с.
6. Radi Romansky. An Approach for Mathematical Modeling and Investigation of Computer Processes at a Macro Level. *Mathematics*, 2020. № 8. P. 1838.
7. Tilliander A., Ersson M., Jonsson L. and Jönsson P. Fundamental Mathematical Modeling of Metallurgical Processes – Current and Future Situation. Conference : *SCANMET III*, 2008. P. 333–346.
8. Richard Turner. Modeling and Simulation of Metal Processing. *Metals*, 2022. № 12. P. 231.
9. Бахрушин В.С. Математичні основи моделювання систем. Запоріжжя : КПУ, 2009. 224 с.
10. Brent Maxfiel. Engineering With Mathcad. Using Mathcad to Create and Organize Your Engineering Calculations. Butterworth-Heinemann is an imprint of Elsevier : Science and Technology Rights Department in Oxford, 2006. 494 p.
11. Биткін С.В., Критська Т.В. Методика статистичної оцінки результатів технологічного експерименту в чорній металургії у середовищі «STATISTICA» та «MathCAD». *Металургія*. Запоріжжя : ЗДІА, 2020. Вип. 1. С. 103–109.
12. Казаков А.А., Рябошук С.В. Физико-химические основы сталеплавильных процессов. Санкт-Петербург : Издательство Политехнического университета, 2013. 44 с.
13. Seshadri Seetharaman. Fundamentals of metallurgy. Cambridge England : Woodhead Publishing Limited and CRC Press LLC, 2005. 589p.
14. Дильдин А.Н., Соколова Е.В. Теория металлургических процессов. Челябинск : Изд. ЮУрГУ, 2007. 33 с.
15. Юсупходжаев Анвар Абдуллаевич, Хожиев Шохрух Тошпулатович, Мирзажоннова Саодат Бакиджановна. Анализ состояния системы в металлургии : монография. LAP LAMBERT Academic Publishing (brand of OmniScriptum S.R.L. Str. Armeneasca 28/1, office 1 Chisinau, MD-2012, Republic of Moldova), 2020. 179 с.

16. Shamsuddin M. Physical Chemistry of Metallurgical Processes. *The Minerals, Metals & Materials Society*. Published by John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA. Copyright, 2016. 617 p.

17. Яковлев Д.С. Повышение качества сварных соединений электросварных труб при использовании порошковых проволок : дис. ... канд. техн. наук : спец. 05.02.10 – сварка, родственные процессы и технологии. Южно-Уральский государственный университет. Челябинск, 2016.

18. André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva, Flávio Beneduce Neto, Roberto Ribeiro de Avillez. Liquid iron deoxidation by aluminum: a brief review of experimental data and thermodynamic description. *Tecnologia em metalurgia, materiais e mineracao*. São Paulo, 2015. v. 12, n. 4. P. 267–273.

19. Ghosh Ahindra, Chatterjee Amit. Ironmaking and Steelmaking. *Theory and Practice*. PHI Learning Private Limited, New Delhi, 2008. P. 472.

References

1. Echterhof, T., Ohno, K.-I., Visuri, V.-V. Modeling and Simulation of Metallurgical Processes in Ironmaking and Steelmaking. *Metals*, 2022. № 12. P. 1185.

2. Kuniharu Ito, Tetsuaki Kurokawa, Masanori Shioya, Hirokazu Kobayashi, Masatoshi Ago, Junichi Mori. Production Planning and Scheduling Technology for Steel Manufacturing Process. *Nippon steel & sumitomo metal technical report*, 2019. No. 121. P. 31–47.

3. Wendelstorf Jens. Metallurgical Process Modelling. *STEELSIM – 2007*. Graz/Seggau, Austria. P. 433–438.

4. Prudkovsky B.A. Why does a metallurgist need mathematical models? / Ed. P.I. Polukhin. Ed. 3rd. Moscow : LKY Publishing House, 2010. 200 p.

5. Zvonarev S.V. Fundamentals of mathematical modeling. Ekaterinburg : Izd-vo Ural. University, 2019. 112 p.

6. Radi Romansky. An Approach for Mathematical Modeling and Investigation of Computer Processes at a Macro Level. *Mathematics*, 2020. № 8. P. 1838.

7. Tilliander A., Ersson M., Jonsson L. and Jönsson P. Fundamental Mathematical Modeling of Metallurgical Processes – Current and Future Situation. Conference : *SCANMET III*, 2008. P. 333–346.

8. Richard Turner. Modeling and Simulation of Metal Processing. *Metals*, 2022. № 12. P. 231.

9. Bakhrushin V.E. Mathematical foundations of system modeling. Zaporizhzhia : KPU, 2009. 224 p.

10. Brent Maxfiel. Engineering With Mathcad. Using Mathcad to Create and Organize Your Engineering Calculations. Butterworth-Heinemann is an imprint of Elsevier : Science and Technology Rights Department in Oxford, 2006. 494 p.

11. Bytkin S.V., Krytskaja T.V. The methodology of statistical evaluation of the results of a technological experiment in ferrous metallurgy in the “STATISTICA” and “MathCAD” environment. *Metallurgy*. Zaporizhzhia : ZDIA, 2020. Is. 1. P. 103–109.

12. Kazakov A.A., Ryaboshuk S.V. Physical and chemical foundations of steelmaking processes. St. Petersburg : Polytechnic University Publishing House, 2013. 44 p.

13. Seshadri Seetharaman. Fundamentals of metallurgy. Cambridge England : Woodhead Publishing Limited and CRC Press LLC, 2005. 589p.

14. Dyldin A.N., Sokolova E.V. Theory of metallurgical processes. Chelyabinsk : Izd. SUU, 2007. 33 p.

15. Yusuphodzhaev Anvar Abdullaevich, Khozhiev Shokhrukh Toshpulatovych, Myrzazhonova Saodat Bakidzhanovna. Analysis of the state of the system in metallurgy : monograph. LAP LAMBERT Academic Publishing (brand of OmniScriptum S.R.L. Str. Armeneasca 28/1, office 1 Chisinau, MD-2012, Republic of Moldova), 2020. 179 c.

16. Shamsuddin M. Physical Chemistry of Metallurgical Processes. *The Minerals, Metals & Materials Society*. Publ. by John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA. Copyright, 2016. 617 p.

17. Yakovlev D.S. Improving the quality of welded joints of electrowelded pipes when using flux-cored wires : diss. ... candidate technician of science : specialty 05.02.10 – quarrel, related processes and technologies. South Ural State University. Chelyabinsk, 2016.

18. André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva, Flávio Beneduce Neto, Roberto Ribeiro de Avillez. Liquid iron deoxidation by aluminum: a brief review of experimental data and thermodynamic description. *Tecnologia em metalurgia, materiais e mineracao*. São Paulo, 2015. v. 12, n. 4. P. 267–273.

19. Ghosh Ahindra, Chatterjee Amit. Ironmaking and Steelmaking. *Theory and Practice*. PHI Learning Private Limited, New Delhi, 2008. P. 472.

Bytkin Serhii, recipient, candidate of technical sciences, associate professor, ORCID: 0000-0003-3583-3371
Kriytska Tetyana, doctor of technical sciences, professor, Zaporizhia National University, ORCID: 0000-001-6933-0460

**SIMULATION OF STEEL OXIDATION
USING Mn, Si, Al IN THE COMPUTING ENVIRONMENT OF MathCAD
USING DIFFERENT METHODS OF VISUALIZING CALCULATION RESULTS**

For modeling the deoxidation of traditional impurities (Mn, Si, Al), a method of using MathCAD is proposed, which includes various elements of calculation and visualization of the obtained results. It is shown by the method of a computational experiment that when the deoxidizer, R, is introduced, that is, an increase in [R], there is a nonlinear decrease in the concentration of dissolved oxygen [O] and the modulus of the numerical value $(d[O])/dR$. Analysis of the nature of the change in the deoxidation reaction rate, $d/dR(d[O])/dR$, indicates the existence of a concentration R at which a “break” in the dependence is observed (a decrease in the slope of the function $d/(dR)(d[O])/dR=f([R])$), that is a pronounced decrease in the rate of change in the concentration [O]. In other words, starting from a certain value of [R], increasing the deoxidizer concentration is not effective. Optimal calculated concentrations of deoxidizers are proposed. The marginally necessary concentrations of deoxidizers [mass %], at which the rate of reduction of the content of [O] dissolved in steel is practically zero, are: [Mn] ≈ 0.85 ; [Si] ≈ 3.35 ; [Al] ≈ 0.05 . The technological concentration of [Al] can probably be reduced to $\sim 0.015\%$ (the “break-even” point), which theoretically allows [O] to be reduced to $\sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ ppm at $t \cong 1600$ °C. It is reasonable to assume that for deoxidation for steel using silicon, the optimal concentration is [Si] $\cong 0.5\%$. For manganese, this approach is not acceptable, for a weak deoxidizer, it is impractical to use the second “break” point, because at a concentration of [Mn] $\sim 0.207\%$, [O] $\sim 0.2\%$ is observed in the calculation experiment, and if we apply the numerical value [Mn] $\sim 0.85\%$, then the calculated value [O] $\sim 0.05\%$, that is, four times less. The proposed modeling technique makes it possible to determine the maximum allowable concentration of dissolved in metal silicon [Si] used for its deoxidation, which corresponds to its concentration, at which a change in the direction of the binding reaction [O] is observed according to the principle of Le Chatelier – Brown. At [Si] $\cong 3.35$ mass %, the rate of deoxidation is practically zero. A change (increase) in the concentration of [Si] leads to a disturbance of the equilibrium in the direction opposing the change made, namely: an increase in the concentration of the deoxidizer leads to an increase in the rate of increase in the concentration of oxygen.

Keywords: modeling, computational experiment, MathCAD, deoxidation, optimal deoxidizer concentration

Стаття надійшла до редакції 23.01.2022 р.