УДК 669.046.516.2+669.046.582.2 DOI: https://doi.org/10.26661/2071-3789-2021-1-03

Харченко Олександр Вікторович, докторант, кандидат технічних наук, Запорізький національний університет. ORCID: 0000-0003-3717-3872
Лічконенко Наталія Володимирівна, старший викладач, Запорізький національний університет. ORCID: 0000-0002-7960-061X

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ КОЕФІЦІЄНТИ ЗАСВОЄННЯ В СИСТЕМАХ КОНТРОЛЮ СТАЛЕПЛАВИЛЬНОГО ВИРОБНИЦТВА

З використанням методу хімічних потенціалів Гіббса виконано термодинамічний аналіз систем «метал-шлак» і «метал-шлак-газ». Введено поняття диференціальних коефіцієнтів засвоєння (ДКЗ), які враховують всі перехресні ефекти впливу одних хімічних елементів у металі на вміст інших. Дано визначення ДКЗ як змінювання маси *i*-го елемента в металі за додаванням одиниці маси *j*-го елемента до системи. Отримано аналітичні вирази для ДКЗ, що необхідні для ефективного вирішення зворотної задачі в системах управління процесами плавлення та легування рідкої сталі. Сформульовано специфічні вимоги до компонентів квадратної матриці ДКЗ щодо її дії на вектори валентностей хімічних елементів у шлаку та складу рівноважного металу і шлаку. Запропоновано спосіб перевірки термодинамічних моделей багатокомпонентних розчинів у металі та шлаку за допомогою аналітичного обчислення ДКЗ, що використовують. Введено поняття диференціальної концентраційної матриці (ДКМ) як похідної від ДКЗ, елементи якої дорівнюють змінюванню концентрації *i*-го елемента в металі за додавання одиниці маси *j*-го елемента до системи. Показано, що ДКМ може бути використана для класифікації різних матеріалів за їх впливом на вміст кисню, сірки, фосфору та інших домішок у сталі в точці поточного стану системи «метал-шлак-газ». Отримано системи нерівностей з матрицями ДКЗ або ДКМ для оптимізації кількості матеріалів симплекс-методом за умови гарантованого попадання в заданий хімічний склад напівпродукту або марочний склад сталі. Виконано аналіз можливого впливу технологічних та організаційних обмежень на вирішення розширеної системи нерівностей. Зроблено висновок, що використання ДКЗ є ключовою особливістю та необхідним елементом сучасних комп'ютерних систем управління плавкою і позапічної обробкою стали. Наведено приклади практичного застосування ДКЗ у системах проектування та контролю сталеплавильного виробництва.

Ключові слова: сталь, плавка, коефіцієнти засвоєння, шлак, матеріали, феросплави, розкислювання, легування, матриця

Вступ. Коефіцієнти засвоєння здавна застосовують у металургійному виробництві під час визначення кількості шихтових або легуючих матеріалів, що потрібно для одержання необхідного складу напівпродукту або готового металу. Використовувані величини засновані на середньостатистичних даних, характерних для даного періоду плавки, складу вихідного металу, одержуваної марки сталі та усталеного набору матеріалів. Будь-яке відхилення зазначених параметрів у той чи інший бік з великою ймовірністю призводить до виникнення позаштатних ситуацій та, як наслідок, до виробничого браку. Причина цього полягає в тому, що в дійсності коефіцієнти засвоєння не є константами, а залежать від температури, складу металевої, шлакової та газової фаз, а також від складу застосовуваних шихтових і легуючих матеріалів. Більш того, засвоєння одних елементів може зменшуватися або збільшуватися за додаванням інших хімічних елементів, тобто існують перехресні ефекти, вплив яких є відомим лише на емпіричному рівні для окремих випадків.

© О.В. Харченко, Н.В. Лічконенко, 2021

Постановка завдання. Існує принципова можливість точного обчислення коефіцієнтів засвоєння, в тому числі перехресних, якщо є адекватна термодинамічна модель системи «метал-шлак-газ». У роботі ставиться завдання отримати аналітичні вирази для ДКЗ, які можна було б безпосередньо використовувати для розв'язання зворотної задачі термодинамічного аналізу системи «метал-шлак-газ» в сталеплавильному виробництві, тобто завдання оптимізації кількості матеріалів з гарантованим попаданням у заданий склад напівпродукту або готового металу.

Основна частина досліджень. Межа можливостей, що надаються знанням середньостатистичних коефіцієнтів засвоєння, була досягнута в інформаційно-технологічній системі «Форвард» [1], де оптимальні кількості шихтових матеріалів розраховували без врахування складних фізико-хімічних процесів, що відбуваються в сталеплавильному агрегаті (або ковші). Зокрема, одним з істотних її недоліків була неможливість оптимізації кількостей неметалічних матеріалів, що не давало можливості проектувати технології десульфурації, дефосфорації, прямого легування тощо. В іншій системі «Оракул» [2] зазначені обмеження були частково зняті, але залишилися серйозні проблеми з адекватністю та стійкістю одержаних результатів.

У загальному вигляді рівноважний стан у системі «метал-шлак» або «метал-шлак-газ» може бути представлено наступною системою рівнянь:

$$F_i(m_1, m_2, ..., m_k; \bar{m}_{[1]}, \bar{m}_{[2]}, ..., \bar{m}_{[k]}; \bar{m}_{(1)}, \bar{m}_{(2)}, ..., \bar{m}_{(k)}) = 0, \quad (1)$$

де m_1, m_2, …, m_k – маси елементів в системі; $\bar{m}_{[1]}, \bar{m}_{[2]}, ..., \bar{m}_{[k]}$ – рівноважні маси елементів в металі; $\bar{m}_{(1)}, \bar{m}_{(2)}, ..., \bar{m}_{(k)}$ – рівноважні маси елементів в шлаку.

Іншими словами, якщо задані маси елементів, то така модель «повинна» розподіляти їх між металом, шлаком і газом. Із системи рівнянь (1) методом неявного диференціювання знаходяться величини U_{ij}:

$$U_{ij} = \frac{\partial m_{[i]}}{\partial m_j} = -\left[\frac{\partial F_i}{\partial m_{[j]}}\right]^{-1} \cdot \left[\frac{\partial F_i}{\partial m_j}\right]\Bigg|_{m_{[i]}=\bar{m}_{[i]}}, \quad (2)$$

які складають квадратну матрицю і є шуканими диференціальними коефіцієнтами засвоєння (ДКЗ). Фізичний сенс величин ДКЗ досить простий: «на скільки зміниться маса елемента *i* в *металі* за додаванням одиниці маси елемента *j* до *системи*». Таким чином, з'являється можливість врахувати всі перехресні ефекти впливу одних елементів на вміст інших.

Разом з тим, формула загального вигляду (2) не дає уявлення про структуру ДКЗ і є досить проблематичною з точки зору обсягу та стійкості обчислень за великої кількості врахованих елементів. Представляється доцільним, використовуючи формалізм термодинамічної моделі, привести ДКЗ до компактного вигляду, зручного як для проведення обчислень, так і аналізу їх структури.

Виведення диференціальних коефіцієнтів засвоєння в явному вигляді

За базову термодинамічну модель системи «метал-шлак-газ» (1) використовують детерміновану фізико-хімічну модель [3–6], яка найбільш точно описує процеси, що відбуваються в сталеплавильному агрегаті. Суттєвою характерною особливістю даної моделі є врахування електронного вкладу в хімічний потенціал елементів у шлаку. Далі буде показано, що перевірка адекватності цієї моделі може бути виконаною з використанням отриманих виразів для ДКЗ незалежно від прийнятих моделей металевих і шлакових розчинів.

Виведемо спочатку ДКЗ для системи «метал-шлак». Вихідна система $k + 1$ нелінійних рівнянь, яка заснована на рівності хімічних потенціалів елементів в металі та шлаку, в цьому разі має вигляд:

$$\begin{cases} \dfrac{x_{(i)}}{x_{[i]}} = \dfrac{K_{[i)} \cdot \gamma_i}{\psi_i} \exp\left(-\dfrac{\mu \cdot \nu_i}{R \cdot T}\right), \ i = 1..k \\ \sum_{i=1}^{k} x_{(i)} \cdot \nu_i = 0 \end{cases}, \tag{3}$$

де $x_{(i)}$ – молярні частки елементів у шлаку; $x_{[i]}$ – молярні частки елементів у металі; $K_{[i)}$ – константи рівноваги «метал-шлак»; γ_i – коефіцієнти активності елементів у металі; ψ_i – коефіцієнти активності елементів у шлаку; ν_i – валентності елементів у шлаку; μ – рівень Фермі електронів в шлаку, або окислювально-відновний потенціал системи; T – температура в системі; R – універсальна газова постійна.

Виконуємо такі перетворення над системою рівнянь (3):

1. Переходимо від мольних часток до чисел молей елементів відповідно в металі $n_{[i]} = N_m \cdot x_{[i]}$ і шлаку $n_{(i)} = N_s\, x_{(i)}$, де N_m і N_s – загальне число молей в металі та шлаку. В цьому разі сума молей кожного елемента в металі та шлаку дорівнює числу молей цього елемента в системі $n_i = n_{[i]} + n_{(i)}$.

2. Вводимо позначення $A_i = \ln\left(\dfrac{K_{[i)} \cdot \gamma_i}{\psi_i}\right)$ і назвемо величини A_i логарифмами консолідованих (або ефективних) констант рівноваги «метал-шлак».

3. Окислювально-відновний потенціал системи ⌈ будемо далі вимірювати в одиницях $R\,T$. Таким чином, знаменник $R\,T$ зникне.

4. Вводимо змінну $Y = \ln(N_m / N_s)$, яка дорівнює натуральному логарифму зворотної величини мольної кратності шлаку.

Перетворена система рівнянь після підстановки $n_{[i]} = n_i - n_{(i)}$ матиме наступний вигляд:

$$\begin{cases} n_{(i)} = \dfrac{n_i}{1 + \exp(-A_i + Y + \mu \cdot \nu_i)}, \quad i = 1..k \\ \sum_{i=1}^{k} n_{(i)} \cdot \nu_i = 0 \end{cases}. \tag{4}$$

В отриманих рівняннях число молей елемента в шлаку $n_{(i)}$ виражається через число молей даного елемента в системі та змінні μ і Y. Наступний крок – виключити змінні $n_{(i)}$, скориставшись тим фактом, що суму молей в шлаку можна представити двома способами: як суму величин $n_{(i)}$ або як частку загального числа молей в системі N, виражену через змінну Y.

Прирівнюючи отримані вирази для суми молей в шлаку, приходимо до компактної системі двох нелінійних рівнянь відносно невідомих μ і Y, яка повністю еквівалентна вихідній системі (3)

$$\begin{cases} F_1 = \sum_{i=1}^{k} \dfrac{n_i \cdot \nu_i}{1 + \exp(-A_i + Y + \mu \cdot \nu_i)} = 0 \\ F_2 = \sum_{i=1}^{k} \dfrac{n_i}{1 + \exp(-A_i + Y + \mu \cdot \nu_i)} - \dfrac{N}{1 + \exp(Y)} = 0 \end{cases}. \tag{5}$$

Переваги системи рівнянь (5) полягають у тому, що вирішення її чисельними методами є стійким, а необхідна точність досягається приблизно в k разів швидше, ніж під час вирішення вихідної системи $k + 1$ нелінійних рівнянь. Окрім того, компактні матриці Якобі системи рівнянь (5) дозволяють отримати ДКЗ в явному вигляді.

Вирішенням системи рівнянь (5) є величини μ і Y, за допомогою яких після підстановки (4) отримуємо рівноважний молярний склад шлаку $\overline{n}_{(1)}, \overline{n}_{(2)}, ..., \overline{n}_{(k)}$ і рівноважний молярний склад металу $\overline{n}_{[1]}, \overline{n}_{[2]}, ..., \overline{n}_{[k]}$. Важливо відзначити, що після вирішення даної

системи кількості молей елементів в металі $n_{[i]}$ і шлаку $n_{(i)}$, а також їх суми N_m і N_s у всіх наступних виразах є рівноважними величинами. Для зручності читання ми опускаємо риску над ними.

Використовуючи рівняння (4), представимо число молей елемента *i* в металі у вигляді:

$$n_{[i]} = n_i - n_{(i)} = \frac{n_i}{1+\exp(A_i - Y - \mu \cdot \nu_i)}. \tag{6}$$

Знайдемо спочатку загальний вигляд матриці мольних ДКЗ. Для цього скористаємося правилом диференціювання складної функції (6) $n_{[i]} = f_i(n_i, \mu, Y)$:

$$V_{ij} = \frac{\partial n_{[i]}}{\partial n_j} = \frac{\partial f_i}{\partial n_i}\frac{\partial n_i}{\partial n_j} + \frac{\partial f_i}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial n_j} + \frac{\partial f_i}{\partial Y}\frac{\partial Y}{\partial n_j} \tag{7}$$

Частинні похідні $\frac{\partial f_i}{\partial n_i}$, $\frac{\partial f_i}{\partial \mu}$, $\frac{\partial f_i}{\partial Y}$ знаходять безпосередньо з рівняння (6) диференціюванням за відповідними змінними. Похідна $\frac{\partial n_i}{\partial n_j}$ дорівнює символу Кронекера δ_{ij}. У підсумку, після підстановок з (4) і (6), отримуємо структурну формулу для мольних ДКЗ:

$$V_{ij} = \frac{n_{[i]}}{n_i} \cdot \left(\delta_{ij} + \nu_i \cdot n_{(i)} \frac{\partial \mu}{\partial n_j} + n_{(i)} \frac{\partial Y}{\partial n_j} \right). \tag{8}$$

Решту похідних знаходимо шляхом неявного диференціювання системи рівнянь (5):

$$\left[\frac{\partial \mu}{\partial n_j}, \frac{\partial Y}{\partial n_j} \right] = -\mathbf{J_1^{-1} J_2} = -\left[\frac{\partial (F_1, F_2)}{\partial (\mu, Y)} \right]^{-1} \left[\frac{\partial (F_1, F_2)}{\partial n_j} \right] \tag{9}$$

Функціональні матриці $\mathbf{J_1}$ і $\mathbf{J_2}$ після підстановок із (4) та (6) набувають наступного вигляду:

$$\mathbf{J_1} = \left[\frac{\partial (F_1, F_2)}{\partial (\mu, Y)} \right] = \begin{bmatrix} -\sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h^2}{n_h} & -\sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h}{n_h} \\ -\sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h}{n_h} \cdot & \frac{N_s \cdot N_m}{N} - \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]}}{n_h} \end{bmatrix} \tag{10}$$

$$\mathbf{J_2} = \left[\frac{\partial (F_1, F_2)}{\partial n_j} \right] = \begin{bmatrix} \frac{\nu_j \cdot n_{(j)}}{n_j} \\ \frac{n_{(j)}}{n_j} - \frac{N_s}{N} \end{bmatrix} \tag{11}$$

Відзначимо, що матриця Якобі $\mathbf{J_1}$ є симетричною та непозитивно визначеною. Її визначник (якобіан) дорівнює нулю, коли в системі немає або металу, або шлаку. Знання матриці $\mathbf{J_1}$ корисно не тільки для розрахунку ДКЗ, а й для чисельного вирішення системи рівнянь (5) методом Ньютона.

Підстановка матриць $\mathbf{J_1}$ (10) і $\mathbf{J_2}$ (11) до рівняння (9), дає наступні формули для відсутніх похідних:

$$\frac{\partial \mu}{\partial n_j} = -\frac{1}{D} \left[\frac{n_{(j)} \cdot \nu_j}{n_j} \left(\frac{N_s \cdot N_m}{N} - \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]}}{n_h} \right) + \left(\frac{n_{(j)}}{n_j} - \frac{N_s}{N} \right) \cdot \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h}{n_h} \right] \tag{12}$$

$$\frac{\partial Y}{\partial n_j} = -\frac{1}{D} \left[\frac{n_{(j)} \cdot \nu_j}{n_j} \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h}{n_h} - \left(\frac{n_{(j)}}{n_j} - \frac{N_s}{N} \right) \cdot \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h^2}{n_h} \right], \tag{13}$$

де D – якобіан системи (5).

$$D = -\left(\sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h}{n_h}\right)^2 - \left(\frac{N_s \cdot N_m}{N} - \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]}}{n_h}\right) \cdot \sum_{h=1}^{k} \frac{n_{(h)} \cdot n_{[h]} \cdot \nu_h^2}{n_h}.$$

Найважливішою особливістю отриманих формул для ДКЗ є та обставина, що вони не містять в явному вигляді константи рівноваги та коефіцієнти активності в металі і шлаку. Останні вже враховані в рівноважних величинах $n_{[1]}, n_{[2]},\ldots, n_{[k]}; n_{(1)}, n_{(2)},\ldots, n_{(k)}$. Це означає, що ДКЗ можуть бути оперативно обчисленими безпосередньо з експериментальних даних про рівноважний склад металу та шлаку незалежно від прийнятих моделей розчинів у відповідних фазах, наприклад, за даними експрес-аналізу відібраних проб.

З іншого боку, ці ж формули дозволяють виконати ефективну експериментальну перевірку адекватності вихідних термодинамічних моделей багатокомпонентного розчину в металі і шлаку шляхом порівняння фактичного $\Delta n_{[]}$ та розрахункового $V\Delta n$ змінюапггя вмісту елементів у металі в рівноважних системах «метал-шлак» з близькими елементними складами.

Слід зазначити, що V – матриця ДКЗ – не може бути довільною. Вона повинна задовольняти таким очевидним умовам:

1. Рівноважний метал, що додають до системи, повинен повністю переїходити в метал:

$$\mathbf{V}\mathbf{n}_{[]} = \mathbf{n}_{[]}. \tag{15}$$

2. Аналогічно, рівноважний шлак, що додають до системи, повинен повністю переходити в шлак, тобто в метал він потрапляти не повинен:

$$\mathbf{V}\mathbf{n}_{()} = \mathbf{0}. \tag{16}$$

3. За додаванням до системи малої кількості довільного матеріалу частина його, що переходить у шлак, повинна бути електронейтральною. В системі «метал-шлак» ця вимога приводиться до наступного виразу:

$$\mathbf{V}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} = \mathbf{v}. \tag{17}$$

Отримані вище формули для ДКЗ повністю задовольняють всім трьом умовам.

Відзначимо також, що елементи матриці ДКЗ під час переходу від елементного складу до фазового складу системи перетворюються як тензор другого рангу. Матриця ДКЗ має і інші цікаві властивості, обговорення яких виходить за рамки даної роботи.

Диференціальні коефіцієнти засвоєння в системі «метал-шлак-газ»

Для системи «метал-шлак-газ» вихідну систему рівнянь (3) доповнимо рівняннями, що виражають рівність хімічних потенціалів елементів у металі та газі:

$$\begin{cases} \dfrac{x_{(i)}}{x_{[i]}} = \dfrac{K_{[i)}\gamma_i}{\psi_i} \exp\left(-\dfrac{\mu\nu_i}{RT}\right), \ i = 1..k \\ \dfrac{x_{\{i\}}}{x_{[i]}} = \dfrac{K_{[i\}}\gamma_i}{\lambda_i}, \ i = 1..k \\ \sum\limits_{i=1}^{k} x_{(i)}\nu_i = 0 \end{cases}. \tag{18}$$

Підхід з використанням елементного складу газу $x_{\{i\}}$, відповідних констант рівноваги «метал-газ» $K_{[i\}}$ і коефіцієнтів активності елементів у газі λ_i розвинене й обговорене у роботах [7–10]. Перевагою такого підходу є уніфікація подання хімічних потенціалів та активностей елементів у газі і можливість одночасного обчислення парціальних тисків багатьох молекулярних і атомарних газів, що входять до складу газової фази.

Методика виведення ДКЗ для трифазної системи принципово не відрізняється від описаної вище процедури виведення ДКЗ для системи «метал-шлак». Тому нижче будуть наведені основні результати, необхідні для практичних розрахунків.

Використовуючи аналогічні перетворення, приводимо систему $2k+1$ рівнянь (18) до системи трьох рівнянь:

$$\begin{cases} F_1 = \sum_{i=1}^{k} \dfrac{n_i \nu_i}{1+\exp(-A_i + Y + \mu\nu_i)\left[1+\exp(B_i - Z)\right]} = 0 \\ F_2 = \sum_{i=1}^{k} \dfrac{n_i}{1+\exp(-A_i + Y + \mu\nu_i)\left[1+\exp(B_i - Z)\right]} - \dfrac{N}{1+\exp(Y)\left[1+\exp(-Z)\right]} = 0, \\ F_3 = \sum_{i=1}^{k} \dfrac{n_i}{1+\left[1+\exp(A_i - Y - \mu\nu_i)\right]\exp(Z - B_i)} - \dfrac{N}{1+\exp(Z)\left[1+\exp(-Y)\right]} = 0 \end{cases} \quad (19)$$

де B_i – натуральний логарифм консолідованої (ефективної) константи рівноваги «метал-газ»; $B_i = \ln\left(\dfrac{K_{[i\}}\gamma_i}{\lambda_i}\right)$; $Z = \ln(N_m / N_g)$ – натуральний логарифм величини, що є зворотною до мольної кратності газу.

Результатом вирішення системи рівнянь (19) є набор величин μ, Y, Z, за якими визначають рівноважні вмісти елементів у всіх фазах.

Структурна формула для ДКЗ в системі «метал-шлак-газ» має такий вигляд:

$$V_{ij} = \frac{n_{[i]}}{n_i}\left(\delta_{ij} + \nu_i n_{(i)} \frac{\partial\mu}{\partial n_j} + n_{(i)} \frac{\partial Y}{\partial n_j} + n_{\{i\}} \frac{\partial Z}{\partial n_j}\right). \quad (20)$$

Частинні похідні для формули (20) обчислюють неявним диференціюванням системи рівнянь (19):

$$\left[\frac{\partial\mu}{\partial n_j}, \frac{\partial Y}{\partial n_j}, \frac{\partial Z}{\partial n_j}\right] = -\mathbf{J}_1^{-1}\mathbf{J}_2 = -\left[\frac{\partial(F_1, F_2, F_3)}{\partial(\mu, Y, Z)}\right]^{-1}\left[\frac{\partial(F_1, F_2, F_3)}{\partial n_j}\right], \quad (21)$$

де

$$\mathrm{J}_1 = \begin{bmatrix} \sum_{h=1}^{k} n_{(h)}\nu_h^2 \cdot \left(\dfrac{n_{(h)}}{n_h} - 1\right) & \sum_{h=1}^{k} n_{(h)}\nu_h \left(\dfrac{n_{(h)}}{n_h} - 1\right) & \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{(h)} n_{\{h\}} \nu_h}{n_h} \\ \sum_{h=1}^{k} n_{(h)}\nu_h \cdot \left(\dfrac{n_{(h)}}{n_h} - 1\right) & \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{(h)}^2}{n_h} - \dfrac{N_s^2}{N} & \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{(h)} n_{\{h\}}}{n_h} - \dfrac{N_s N_g}{N} \\ \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{(h)} n_{\{h\}} \nu_h}{n_h} & \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{(h)} n_{\{h\}}}{n_h} - \dfrac{N_s N_g}{N} & \sum_{h=1}^{k} \dfrac{n_{\{h\}}^2}{n_h} - \dfrac{N_g^2}{N} \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$\mathbf{J}_2 = \begin{bmatrix} \dfrac{n_{(j)}\nu_j}{n_j} \\ \dfrac{n_{(j)}}{n_j} - \dfrac{N_s}{N} \\ \dfrac{n_{\{j\}}}{n_j} - \dfrac{N_g}{N} \end{bmatrix} \quad (23)$$

Через громіздкість виразів ми не приводимо частинні похідні до явного вигляду, надаючи можливість читачеві зробити це самостійно. Для практичних цілей достатньо обчислити $\mathbf{J}_1$ і $\mathbf{J}_2$, а далі використовувати чисельні методи матричної алгебри.

Порівнюючи рівняння (8), (20) і (5), (19) попарно, не можна не відзначити суворе виконання *принципу відповідності*, тобто за відсутності газової фази формули (19) і (20) для системи «метал-шлак-газ» переходять у формули (5) і (8), справедливі для двофазної рівноваги «метал-шлак».

У подальших розрахунках буде фігурувати матриця масових ДКЗ **U**, елементи якої обчислюють з мольної матриці **V** за формулою

$$U_{ij} = V_{ij} \frac{M_i}{M_j}, \tag{24}$$

де M_i, M_j – атомні маси елементів *i* та *j* відповідно.

Диференціальна концентраційна матриця

Матрицю **W** з елементами $W_{ij} = \partial x_{[i]} / \partial m_j$, де $x_{[i]}$ – масова частка елементу *i* в металі, визначимо як диференціальну концентраційну матрицю (ДКМ). Використовуючи правило диференціювання складної функції $x_{[i]} = \dfrac{m_{[i]}}{\sum_{j=1}^{k} m_{[j]}}$, виразимо W_{ij} через елементи матриці **U**:

$$W_{ij} = \frac{1}{M_m}\left(U_{ij} - x_{[i]}\sum_{h=1}^{k} U_{hj}\right), \tag{25}$$

де M_m – маса металу.

Фізичний сенс елементів ДКМ: «на скільки зміниться масова частка елемента *i в металі* за додаванням одиниці маси елемента *j до системи*».

Множення матриці ***W*** на вектори рівноважних складів фаз і будь-яких їх лінійних комбінацій має результатом нульовий вектор. Це відображає той факт, що додавання в систему або відбирання з системи рівноважних металу, шлаку і газу в будь-якому співвідношенні не впливає на концентрації елементів у металі.

Додавання до системи малої кількості деякого матеріалу з вектором елементного складу **Δb** призводить до змінювання масових часток елементів у металі на величину $\Delta\mathbf{x}_{\mathrm{II}} = \mathbf{W}\Delta\mathbf{b}$. Таким чином, за допомогою ДКМ можна класифікувати будь-який матеріал за його впливом на концентрацію елементів у металі в точці поточного стану системи. Наприклад, якщо $\Delta x_{[S]} < 0$, то матеріал є десульфуратором, якщо $\Delta x_{[O]} < 0$ – є розкислювачем тощо.

Знання матриць ДКЗ і ДКМ дозволяє розробляти та/або оперативно підбирати найбільш ефективні склади і оптимальні кількості всіх матеріалів, необхідних для проведення плавки сталі.

Застосування ДКЗ і ДКМ для оптимізації матеріалів

Матриці ДКЗ і ДКМ безпосередньо використовують для вирішення задачі оптимізації кількості матеріалів з гарантованим попаданням у заданий склад напівпродукту або готового металу. Критерієм оптимальності при цьому служить мінімум сумарної вартості обраних матеріалів. Далі під матеріалами ми матимемо на увазі широкий клас власне матеріалів, включаючи феросплави, шлакоутворювальні матеріали, розкислювачі, лігатури, вуглецеві матеріали, а також синтетичні шлаки і флюси, кисень, інертні гази та всі види енергоносіїв, в тому числі природний газ і електроенергію.

Для того, щоб напівпродукт або готовий метал задовольняв заданим обмеженням за хімічним складом, потрібно, щоб виконувалася система *2k*-2 нерівностей (*k* – кількість елементів). У матричному запису вона може бути компактно подана наступним чином:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathbf{U^H(P^H + B^HX)}}{\mathbf{I^TU^H(P^H + B^HX)}} \geq \mathbf{F^H} \\ \dfrac{\mathbf{U^B(P^B + B^BX)}}{\mathbf{I^TU^B(P^B + B^BX)}} \leq \mathbf{F^B} \end{cases}, \tag{26}$$

де $\mathbf{U^H}$, $\mathbf{U^B}$ – матриці масових диференціальних коефіцієнтів засвоєння (нижня та верхня межа); $\mathbf{P^H}$, $\mathbf{P^B}$ – вектори фактичного вихідного елементного складу відповідних систем до завантаження матеріалів (нижня та верхня межа), т; $\mathbf{B^H}$, $\mathbf{B^B}$ – матриці елементного складу всіх доступних матеріалів (нижня та верхня межа), масові частки; $\mathbf{X}$ – шуканий вектор оптимальних мас матеріалів, т; $\mathbf{F^H}$, $\mathbf{F^B}$ – вектори складу металу, регламентованого стандартом (готовий метал) або технологічною інструкцією (напівпродукт), (нижня та верхня межа), масові частки; $\mathbf{I^T}$ – одиничний вектор.

Матриці $\mathbf{U^H}$, $\mathbf{U^B}$ отримують із рівнянь (18)-(24) шляхом термодинамічного розрахунку рівноваги в системах «метал-шлак-газ», які мають поточні склади $\mathbf{P^H} + \mathbf{B^HX}$ і $\mathbf{P^B} + \mathbf{B^BX}$ відповідно.

Вектори $\mathbf{B^HX}$ і $\mathbf{B^BX}$ мають сенс надходження до системи хімічних елементів з матеріалами $\mathbf{X}$.

Елементарними перетвореннями систему нерівностей (26) приведемо до вигляду $\mathbf{HX} \leq \mathbf{H_0}$, який є придатним для її вирішення симплекс-методом:

$$\begin{cases} \mathbf{(F^HI^T - E)U^HB^HX \leq (E - F^HI^T)U^HP^H} \\ \mathbf{(E - F^BI^T)U^BB^BX \leq (F^BI^T - E)U^BP^B} \end{cases}. \tag{27}$$

В матрицях $\mathbf{B^H}$ і $\mathbf{B^B}$ береться відповідно нижній і верхній склад матеріалів за всіма елементами, виключаючи розчинник (як правило, залізо), масову частку якого обчислюють як доповнення до одиниці. Дві нерівності, які відповідають залізу, із системи рівнянь (27) виключають.

У деяких випадках (наприклад, під час легування на зливі) замість ДКЗ можна використовувати матрицю ДКМ. При цьому вихідна система нерівностей (26), що забезпечує гарантоване потрапляння у заданий склад, значно спрощується:

$$\begin{cases} \mathbf{S^H + W^HB^H\Delta X \geq F^H} \\ \mathbf{S^B + W^BB^B\Delta X \leq F^B} \end{cases}, \tag{28}$$

де $\mathbf{S^H}$, $\mathbf{S^B}$ – вектори поточного елементного складу металу (нижня та верхня межа), масові частки; $\mathbf{W^H}$, $\mathbf{W^B}$ – диференційні концентраційні матриці (нижня та верхня межа).

Перетворимо систему нерівностей (28) до виду $\mathbf{HX} \leq \mathbf{H_0}$:

$$\begin{cases} \mathbf{W^HB^HX \geq F^H - S^H - W^HB^HX_0} \\ \mathbf{W^BB^BX \leq F^B - S^B - W^BB^BX_0} \end{cases}. \tag{29}$$

Отримані нерівності (27) і (29) доповнимо системою нерівностей виду $\mathbf{RX} \leq \mathbf{R_0}$, що враховують різноманітні технологічні й організаційні обмеження, такі як:

– необхідна і допустима маса напівпродукту або готового металу;

– фактичні кількості наявних в цеху (на складі) матеріалів;

– обмеження на склад групи та частку окремих матеріалів, наявність обов’язкових матеріалів;

– гранично допустиме змінювання температури металу під час завантаження матеріалів;

– граничні параметри дозаторів (фурм, пальників, електрорегуляторів);

– граничні параметри металургійного агрегату, включаючи його мінімальну та максимальну продуктивність, завантаженість, допустиму температуру робочого об'єму;

– часові обмеження;

Розширена система нерівностей щодо шуканого вектора матеріалів **X** матиме вигляд:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{R} \end{bmatrix} \mathbf{X} \le \begin{bmatrix} \mathbf{H}_0 \\ \mathbf{R}_0 \end{bmatrix}. \qquad (30)$$

Слід зазначити, що додаткові обмеження можуть суттєво вплинути на результат вирішення системи нерівностей. Наприклад, можлива повна заміна одних матеріалів на інші, зміщення температурного інтервалу. Окрім того, додаткові обмеження, як правило, призводять до підвищення сумарної вартості матеріалів.

Систему нерівностей (30) вирішують ітераційно двоїстим симплекс-методом з використанням швидкого алгоритму відкладених обчислень. При цьому мінімізують функціонал загальної вартості матеріалів, який дорівнює $\mathbf{Q}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}$, де **Q** – вектор цін. Ітерації припиняють, коли модуль вектора $\Delta\mathbf{X} = \mathbf{X} - \$5_0$ виявляється менше деякої малої величини.

Висновки. Викладені теоретичний підхід і розрахункова схема дає змогу ефективно вирішувати задачі оптимального управління та проектування плавки сталі в практично необмеженому діапазоні вхідних і вихідних параметрів. Відповідні алгоритми для ДСП, кисневого конвертера, установок «ківш-піч» і легування на зливі реалізовано в комп'ютерних системах проектування, контролю й управління плавкою сталі, що працюють в реальному масштабі часу [11–13]. Алгоритм з використанням ДКЗ реалізовано також в навчально-науковому програмному комплексі «Excalibur» [14]. Загалом використання ДКЗ є ключовою особливістю і необхідним елементом сучасних комп'ютерних систем управління плавкою і позапічної обробкою сталі.

Бібліографічний перелік

1. Харченко А.В., Пономаренко А.Г., Храпко С.А., Иноземцева Е.Н. Разработка информационно-технологической системы «ФОРВАРД» для управления металлургическими процессами в реальном масштабе времени. *Известия Вузов. Черная металлургия*. 1991. № 12. С. 89–91.
2. Храпко С.А., Иноземцева Е.Н., Харченко А.В. Термодинамическая модель системы металл-шлак-газ и интегрированная система «Оракул»: использование для прогнозных расчётов и управления в составе АСУТП и разработки сталеплавильных процессов. «Тезисы докладов конф. «Моделирование физико-химических систем и технологических процессов в металлургии». Новокузнецк : наука, 1991. С. 222–223.
3. Харченко А.В., Будаква С.А. Интегрированный расчет материального, энергетического и теплового балансов плавки в системах управления сталеплавильными процесами. Труды Девятого конгресса сталеплавильщиков. Старый Оскол, 17-19.10.2006. Москва : Черметинформация, 2007. С. 178–187.
4. Харченко А.В., Пономаренко А.Г., Корзун Е.Л. Термодинамическая модель многокомпонентной конденсированной фазы. *Металлургическая и горнорудная промышленность*. 2004. № 8(228). С. 135–139.
5. Харченко А.В., Синяков Р.В. Термодинамическая модель многокомпонентной жидкой шлаковой фазы / А.В. Харченко. *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2016. Вип. 2(36). С. 16–22.
6. Харченко А.В. Теплоёмкость и другие термодинамические функции смешения многокомпонентной конденсированной фазы. *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2012. Вип. 2(27). С. 20–28.
7. Харченко А.В., Пономаренко А.Г. Термодинамическое моделирование системы металл-шлак-газ с учетом тепла химических реакцій. *Металлургическая и горнорудная промышленность*. 2004. № 8. С. 40–43.
8. Харченко А.В. Термодинамическое моделирование системы «металл-шлак-газ» с учетом энтальпийного теплового баланса. Метал та лиття України. 2005. Том 13. № 6. С. 13–17.
9. Харченко А.В., Личконенко Н.В. Вторичное электротермическое легирование и рафинирование металла с участием газовой фазы. *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2016. Вип. 1(35). С. 9–13.

10. Харченко А.В., Синяков Р.В., Личконенко Н.В. Применение метода химических потенциалов Гиббса в черной металлургии. *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2017. Вип. 2(38). С. 20–25.

11. Синяков Р.В. Разработка технологии выплавки и внепечной обработки стали с использованием программного комплекса «DesigningMelt». *Современная электрометаллургия*. 2011. № 2. С. 34–37.

12. Синяков Р.В., Харченко А.В. Автоматизированное проектирование и управление кислородно-конвертерной плавкой. *Металлургическая и горнорудная промышленность*. 2018. № 3. С. 14–26.

13. Харченко, А.В., Ковалев В.Л., Личконенко Н.В., Ляшенко Р.П. Усовершенствование системы контроля сталеплавильного производства «Мастер». *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2019. Вип. 2(42). С. 11–15.

14. Харченко А.В. Личконенко Н.В., Мосейко Ю.В. Возможности и перспективы использования программы «Excalibur» в учебном процессе. *Металургія : наукові праці ЗДІА*. 2013. Вип. 1(29). С. 169–175.

References

1. Kharchenko A.V., Ponomarenko A.G., Khrapko S.A., Inozemceva E.N. Eazrabotka informacionno-tekhnologichnoy systemy «Forvard» dlya uoravlinnya metalurgijnymy processamy v real'nomu masshtabi chacu. *Izvestiya Vuzov, Chernaya netallurgiya*. 1991. No 12. S. 89–91.

2. Khrapko S.A., Unozemceva E.N., Kharchenko A.V. Termodinamicheskata model' sisteny «metall-shlak-gaz» i untegrirovannaya sistema «Orakul»: ispol'zovanie dlya prognoznykh raschetov i upravleniya v sostave ASUTP i razrabotki staleplavil'nykh processov. «Tezisy dokladov konferencii «Modelirovanie fiziko-khimicheskikh sistem i tekhnologicheskikh processov v metallurfii». Novokuzneck : nauka, 1991. S. 222–223.

3. Kharcnenko A.V., Budakva S.A. Interrirovannyy raschet material'nogo, energeticheskogo i teplovogo balansov plavki v sistemakh upravleniya ctaleplavil'nymi processami. Trudy Devyatogo kongressa staleplavil'shchikov. Staryj Oskol. 17-19.10.2006. Moskva : Chermetinformaciya, 2007. S. 178–187.

4. Kharcnenko A.V., Ponomarenko A.G., Korzun E.L. Termodinamichskaya model' mnogokomponentnoy kondensirovannoy fazy. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost'*. 2004. No 8(228). S. 135–139.

5. Kharcnenko A.V., Sinyakov R.V. Termodinamichskaya model*'* mnogokomponentnoy hidkoy shlakovoy fazy. *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. Zaporizhzhya. 2016. Iss. 2(36), S. 16–22.

6. Kharcnenko A.V. Teploemkost i drugie termodinamicheskie feukcii smesheniya mnogokomponentnoy kondensirovannoy fazy. *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. Zaporizhzhya. 2012. Iss. 2(27), S. 20–28.

7. Kharcnenko A.V., Ponomarenko A.G. Termodinamicheskoe modelirovanie sistemy metal-shlak-gaz s uchetom tepla khimicheskikh reakciy. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost*'. 2004. No 8(228). S. 40–43.

8. Kharcnenko A.V. Mermodinamicheskoe modelirovanie sistemy metal-shlak-gaz s uchetom ental piynogo teplovogo balansa. *Metal ta lyttya Ukrainy*. 2005. Iss. 13. No 6. S. 13–17.

9. Kharcnenko A.V., Lichkonenko N.V. Vtorichnoe elktrotermicheskoe legirovanie i rafinirovanie metalla s uchetom gazovoy fazy. *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. Zaporizhzhya. 2016. Iss. 1(35), S. 9–13.

10. Kharcnenko A.V., Sinyakov R.V., Lichkonenko N.V. Primenenie metoda khimicheskikh potencialov Gibbsa v chernoy metallurgii. *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. Zaporizhzhya. 2017. Iss. 2(38). S. 20–25.

11. Sinyakov R.V. Razrabotka tekhnologii vyplavki i vnepechnoy obrabotki stali s ispol'zodfybtv programmnogo kompleksa «DesigningMelt». *Sovremennaya elektrometallurgiya*. 2011. No 2. S. 34–37.

12. Sinyakov R.V., Kharcnenko A.V. Avtomatizirovannoe proektirovanie i upravlenie kislorodno-konberternoy plavkoy. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost*'. 2018. No 3. S. 14–26.

13. Kharcnenko A.V., Kovalev V.L., Lichkonenko N.V, Lyashenko R.P. Usovershenstvovanie sistemy kontrolya staleplavil'nogo proizvodstva «Master». *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. 2019. Iss. 2(42). S. 11–15.

14. Kharcnenko A.V., Lichkonenko N.V., Mosejko Yu.V. Vomohnosti i perspektivy ispol'ovaniya programmy «Excalibur» v uchebnom processe. *Metalurgiya*. *Naukovi praci ZDIA*. 2013. Iss. 1(29). S. 169–175.

Kharchenko Alexander, doctoral candidate, candidate of technical sciences, associate professor of department of metallurgy, Zaporizhzhya National University, Engineering Institute (Zaporizhzhya, Ukraine)
Lichkonenko Natalia, senior lecturer of department of metallurgy, Zaporizhzhya National University, Engineering Institute (Zaporizhzhya, Ukraine)

DIFFERENTIAL ASSIMILATION COEFFICIENTS IN STEEL PRODUCTION CONTROL SYSTEMS

Thermodynamic analysis of the «metal-slag» and «metal-slag-gas» systems using the Gibbs chemical potential method has been carried out. The concept of differential assimilation coefficients (DAC) is introduced, which take into account all the cross-effects of the influence of some chemical elements in the metal on the content of others. The definition of DAC as a change in the mass of the *i*-th element in the metal when adding a unit of mass of the *j*-th element to the system is given. Analytical expressions for DAC, which are necessary for effective solution of the inverse problem in control systems of melting and alloying processes of liquid steel, are obtained. Specific requirements to the components of the square matrix of DAC concerning its action on the valence vectors of chemical elements in the slag and the composition of the equilibrium metal and slag are formulated. A method for testing the used thermodynamic models of multicomponent solutions in metal and slag by analytical calculation of DAC is proposed. The concept of differential concentration matrix (DCM) as a derivative of DAC is introduced, the elements of which are equal to the change in the con-centration of the *i*-th element in the metal when adding the unit mass of the *j*-th element to the system. It is shown that DCM can be used to classify various ma-terials in respect to their effect on the content of oxygen, sulfur, phosphorus and other impurities in steel at the current state of the system «metal-slag-gas». Sys-tems of inequalities with matrices of DAC or DCM for optimization of materials quantities using simplex method on condition of guaranteed compliance in the set chemical composition of an intermediate product or grade structure of steel are derived. An analysis of the possible impact of technological and organizational constraints on the solution of the extended system of inequalities has been made. It is concluded that the use of DAC is a key feature and a necessary element of modern computer control systems for melting and out-of-furnace processing of steel. Examples of practical application of DAC in systems of design and control of steel production are given.

Keyswords: steel, heat, assimilation coefficients, slag, materials, ferroalloys, deoxidation, alloying, matrix

Стаття надійшла 26.03.2021 р.