

ПРОГРАММА «EXCALIBUR» – ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОМ ПРОИЗВОДСТВЕ

А.В. Харченко, Р.В. Синяков (НПО «Доникс», г. Донецк)

В работе показаны основные возможности компьютерной программы «Excalibur». Программа предназначена для расчетов металлургических процессов на основе термодинамического моделирования системы «металл-шлак-газ» с учетом энтальпийного теплового баланса.

Если сталеплавильный агрегат представить в виде системы, на входе которой задан вектор независимых управляющих переменных X (как то: шихтовые материалы, энергоносители, давление и температура), а на выходе – вектор зависимых переменных Y , таких как металл, шлак и газ определенного состава и массы, то *прямую задачу* термодинамического моделирования такой системы можно определить как функцию $Y(X)$. Соответственно, *обратная задача* определяется функцией $X(Y)$. Существенное их отличие заключается в том, что прямая задача имеет единственное решение, а обратная – бесконечное множество решений.

В программе «Excalibur» впервые в полном объеме реализованы прямая и обратная задачи, работающие в тандеме. Алгоритм прямой задачи основан на термодинамической модели многокомпонентной конденсированной фазы [1] и ее последующих модификациях [2, 3], энтальпийном тепловом балансе [4, 5] и учете кинетического запаздывания [6]. В алгоритме обратной задачи реализован универсальный метод фазовых операторов [7], частным случаем которых являются дифференциальные коэффициенты усвоения (ДКУ) в металле [8].

Программа «Excalibur» является развитием информационно-технологической системы «Форвард» [9] и программы «Оракул» [10], в создании которых авторы принимали непосредственное участие. Промышленная реализация одного из вариантов программы – система управления плавкой и внепечной обработкой «Гиббс»[®] [11, 12] – внедрена на Белорусском металлургическом заводе в 2004 году.

По своим возможностям «Excalibur» значительно превосходит ранее созданные программы термодинамического моделирования системы «металл-шлак-газ». Ниже перечислены основные преимущества программы «Excalibur», отличающие ее от других программных продуктов аналогичного назначения:

- Термодинамический расчет равновесия в многокомпонентной гетерогенной системе «металл-шлак-газ» с учетом тепла химических ре-

акций;

- Интегрированный термодинамический расчет конечной температуры системы на основе энтальпийного теплового баланса;
- Точный учет заданного внешнего давления. Расчет парциальных давлений всех атомарных и молекулярных составляющих газовой фазы;
- Вычисление и отображение всех интегральных и парциальных термодинамических функций составляющих системы, включая все фазы и отдельные химические элементы, на основе единого стандарта;
- Точный учет тепла энергоносителей и тепловых потерь, температуры и агрегатного состояния материалов;
- Расчет и наглядное отображение кинетики взаимодействия фаз в сталеплавильном агрегате на основе принципов неравновесной термодинамики и решения динамической системы дифференциальных уравнений;
- Полный расчет плавки в ДСП, в том числе: динамики плавления лома, масс и химического состава металла, шлака и газа, температуры по ходу плавки. Учет кинетического запаздывания, скачивания шлака, тепловых потерь и геометрических параметров печи;
- Термодинамические расчеты в широком диапазоне составов и температур; принципиальная возможность использования программы в ферросплавном и доменном производстве.

В рамках полного и точного решения обратной задачи термодинамического моделирования программа «Excalibur» обеспечивает:

- Оптимизацию масс всевозможных легирующих и шихтовых материалов (в любом агрегатном состоянии) и расхода энергоносителей по критериям их суммарной минимальной стоимости или максимальной производительности сталеплавильного агрегата;
- Задание и гарантированное выполнение комплекса односторонних и двусторонних оптимизационных ограничений по химическому составу и массам конечных металла, шлака и газа, массам материалов, расходу энергоносителей, конечной температуре системы;
- Применение матричной алгебры фазовых операторов и быстродействующего алгоритма двойственного симплекс-метода;
- Расчет и учет перекрестного влияния содержания одних элементов на усвоение других в каждой из фаз;
- Расчет консолидированной матрицы влияния добавок материалов и энергоносителей на массу и состав фаз, а также температуру системы;
- Учет неопределенности исходных и расчетных данных путем зада-

ния соответствующих доверительных интервалов «нижний предел – верхний предел»;

- Практическую реализацию принципа ситуационного управления процессами на основе оперативной выработки альтернативных вариантов легирования, раскисления и внепечной обработки стали при отсутствии решения обратной задачи в первоначальном виде.

На рис. 1 показана концептуальная блок-схема программы «Excalibur».

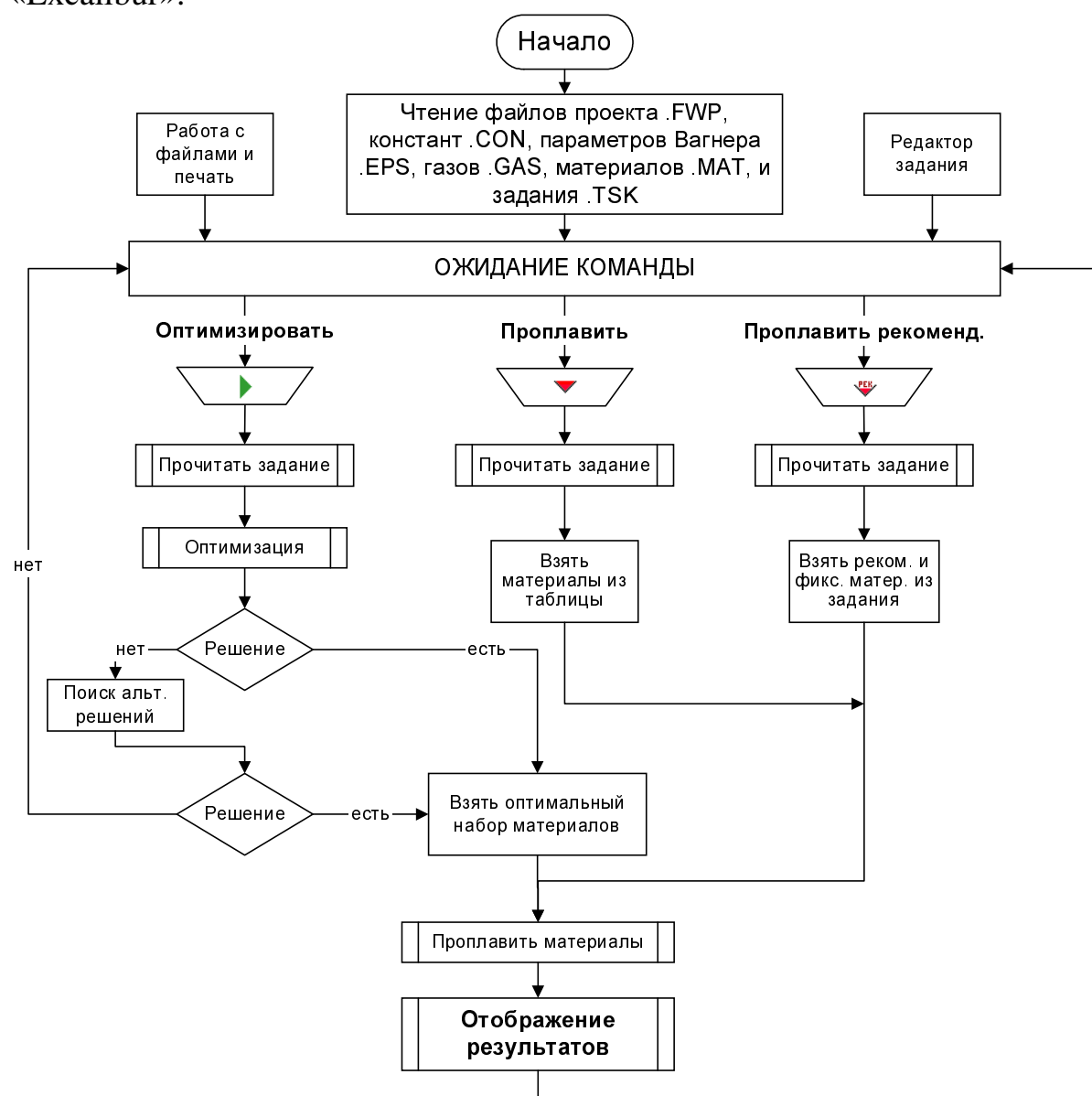


Рисунок 1 – Концептуальная блок-схема основных режимов работы программы «Excalibur».

При запуске программа считывает файлы проекта, констант, параметров Вагнера, газов, материалов и заданий и проплавляет набор материалов из последнего открытого задания. Запуск прямой и обратной задач

производится путем нажатия кнопок на панели инструментов или выбором соответствующих пунктов меню. Результатом всех расчетов прямой задачи являются массы и составы металла, шлака и газа, парциальные давления всех составляющих газовой фазы и конечная температура системы. Составы фаз могут отображаться в виде массовых процентов, мольных процентов, килограммов и киломолей. Кроме того, вычисляются объем выделившегося газа, основность шлака, окислительно-восстановительный потенциал системы (уровень Ферми электронов в шлаке), химические потенциалы и парциальные энтальпии смешения всех элементов во всех фазах, тепловой эффект химических реакций. Все расчетные величины имеют доверительный интервал «нижний предел» – «верхний предел». В обратной задаче дополнительно рассчитываются и отображаются оптимальные массы материалов, обеспечивающие гарантированное выполнение всех оптимизационных ограничений, указанных в задании на плавку. Расчеты прямой и обратной задач производится очень быстро, как правило, в течение 0,01 – 1 секунд. Задачи кинетики, моделирования плавки в ДСП и поиска альтернативных решений в обратной задаче рассчитываются за 0,01 – 2 минуты. Конечный итог большинства расчетов отображается на главной форме. Программа имеет интуитивный дружественный интерфейс (рис. 2), что позволяет пользователям эффективно работать с ней, опираясь на минимальную теоретическую подготовку в области металлургии черных металлов и информатики. Работа с файлами и печать результатов производится с помощью стандартных кнопок панели инструментов, сочетаний «горячих клавиш» или путем выбора соответствующих пунктов меню. Таблицы материалов, элементов и газов имеют контекстные всплывающие меню, что делает работу с программой еще удобнее. Если в результате расчета прямой или обратной задачи содержание какого-либо элемента в металле или шлаке выходит за пределы, определенные в задании на плавку, то соответствующая величина в таблице элементов маркируется красным цветом.

Поскольку в любом режиме работы «Excalibur» обращается к заданию на плавку, которое по сути является спецификацией как прямой, так обратной задачи, особое значение придается редактору задания на плавку, для которого была создана отдельная форма (рис. 3). На этой форме пользователь с помощью редактируемых таблиц и полей может задать любые исходные данные и оптимизационные ограничения (односторонние и двусторонние) применительно к металлу, шлаку и газу, а также ко всем доступным и недоступным материалам и энергоносителям. В частности, здесь можно задать химический состав и интервал масс исходных металла и шлака, начальную температуру, температуру окружающей среды, требуемый состав металла и шлака, требуемые массы металла, шлака и газа, ограничения по конечной температуре металла, а также указать величину те-

пловых потерь в МДж.

Темп. исх., С	N	Материал	Опт	N	Эл	Мет >=	Мет <=	Шлк >=	Шлк <=	Газ >=	Газ <=	N	Газ	P >=	P <=
1625	1	FeMn	1,103	1	Fe	99,53	99,46	6,102	4,685	0,019	0,019	1	CO	0,9434	0,9519
Темп. кон., С	2	SiMn		2	C	0,05	0,061	0	0	41,47	41,66	2	CO2	0,054	0,0452
1614..1615	3	FeSi45		3	Si	0,005	0,007	19,18	20,05	0	0	3	Mg	0,0017	0,002
Давление, ат	4	FeSi65		4	Mn	0,295	0,358	10,01	9,784	0,036	0,043	4	S2	2,9e-4	2,9e-4
1	5	AB-87	0,058	5	Al	0	0	3,99	4,657	0	0	5	Mn	1,9e-4	2,3e-4
Металл, т	6	Коксик	0,1	6	S	0,039	0,04	0,041	0,043	0,079	0,08	6	PO	1,1e-4	9,7e-5
231,5..256,6	7	Карбид Si		7	P	0,013	0,014	0,525	0,367	0,018	0,018	7	Fe	9,8e-5	9,6e-5
Шлак, т	8	Футеровка	0,125	8	Mg	0,0001	0,0001	7,919	8,01	0,145	0,171	8	PS	5,2e-5	5,7e-5
3,01..3,87	9	Известь		9	O	0,068	0,056			58,24	58,01	9	SO	3,9e-5	3,2e-5
Основность ш.	10	Окалина		10	Ca	0	0	52,25	52,43	0	0	10	S	2,5e-5	2,5e-5
3,01..3,14	11	Кислород		11								11	SO2	2,1e-5	1,4e-5
Газ, т	12			12								12	Всего	1,0	1,0
0,275..0,285	13			13								13	Куб.м	2376	2297
Масса ШМ, т	14			14								14			
1,39	15			15								15			
Стоимость ШМ	16			16								16			
2984,82	17			17								17			
	18			18								18			
	19			19								19			
	20			20								20			
	21			21								21			
	22			22								22			
	23			23								23			

Снять ограничение	Заданное	Ожидаемое	Стоимость
Min [O]	0,06...0,07	0,068...0,056	2985
Отсутствие SiMn	0	1,309	3590

Итераций: 9 Время счета: 1,027 с МЦ/РТ: 3,02...3,12 Состав фаз: массовые % Excalibur.MAT Тепл. эффект: -92...91 МДж Newton

Рисунок 2 – Общий вид главной формы «Excalibur»

Кроме того, по каждому материалу можно указать рекомендуемые массы, фиксированные (обязательные) массы и задать верхний и/или нижний пределы использования данного материала в тоннах и/или процентах от общей массы всех материалов.

Редактор заданий допускает ввод до 100 различных заданий на плавку, которые могут быть сохранены в файле. В пределах формы редактора работа с файлами заданий и отдельными заданиями производится с помощью контекстного меню (рис 4). На главной форме (рис. 2) быстрое переключение между файлами заданий и отдельными заданиями производится с помощью двух выпадающих списков в верхней части формы.

Для моделирования плавки металла в дуговой электропечи (ДСП) разработана специальная форма, на которой в реальном масштабе времени отображаются все ключевые характеристики данного процесса. Типичный вид формы приведен на рис. 5.

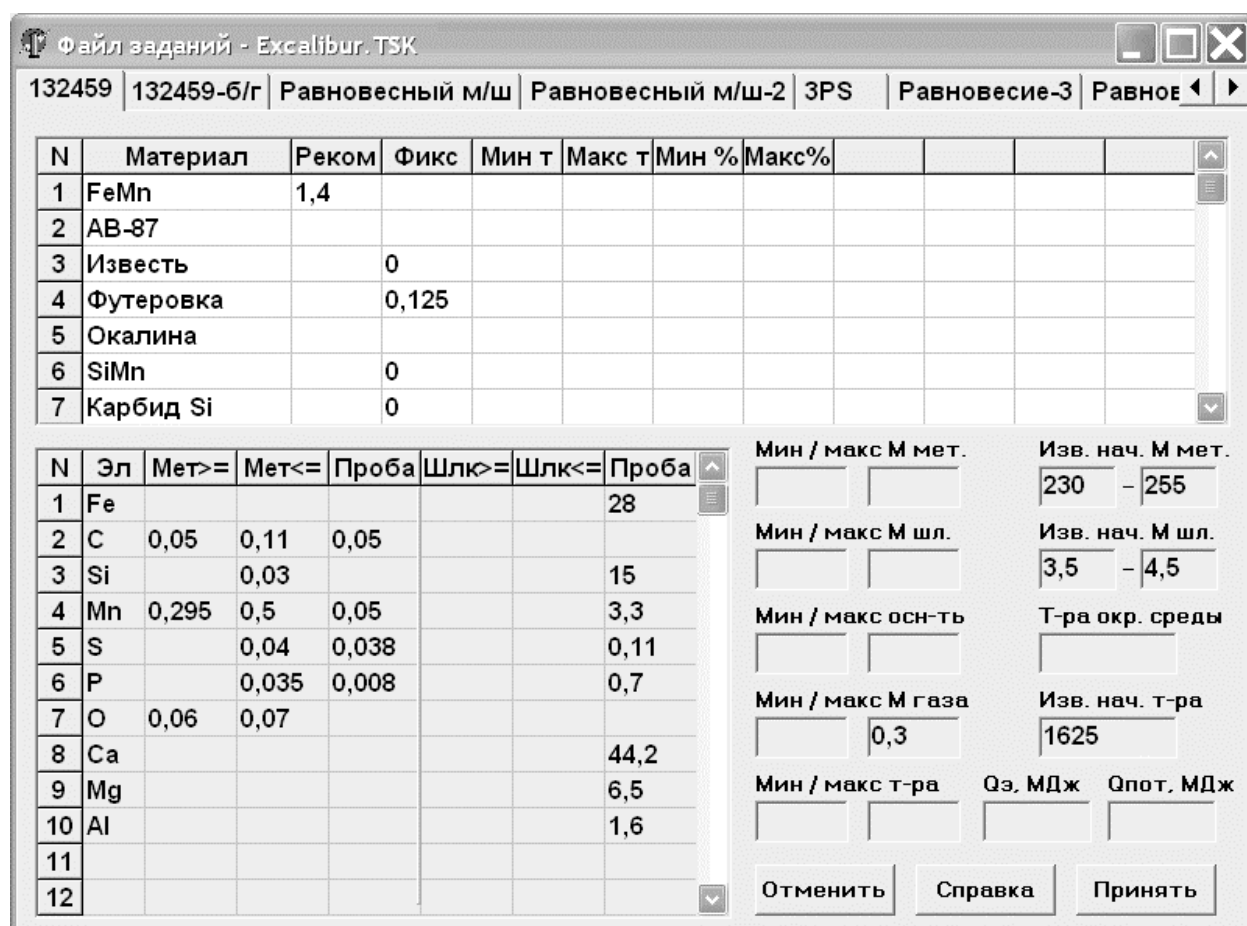


Рисунок 3 – Форма редактора задания на плавку.

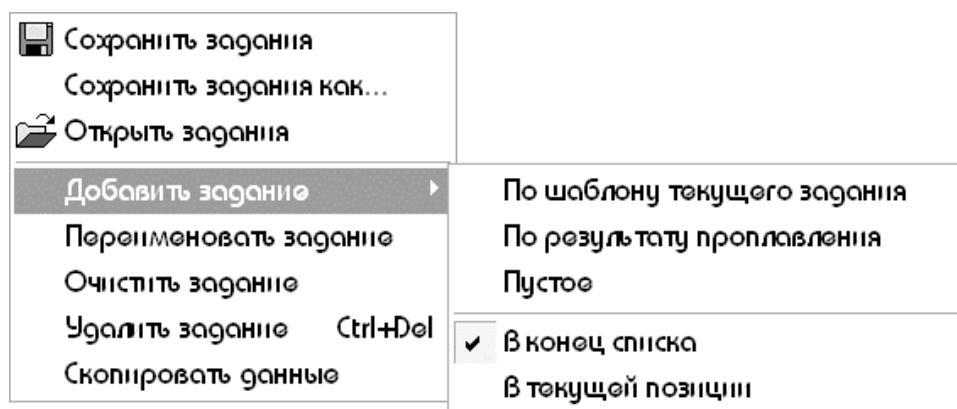


Рисунок 4 – Контекстное меню редактора задания на плавку.

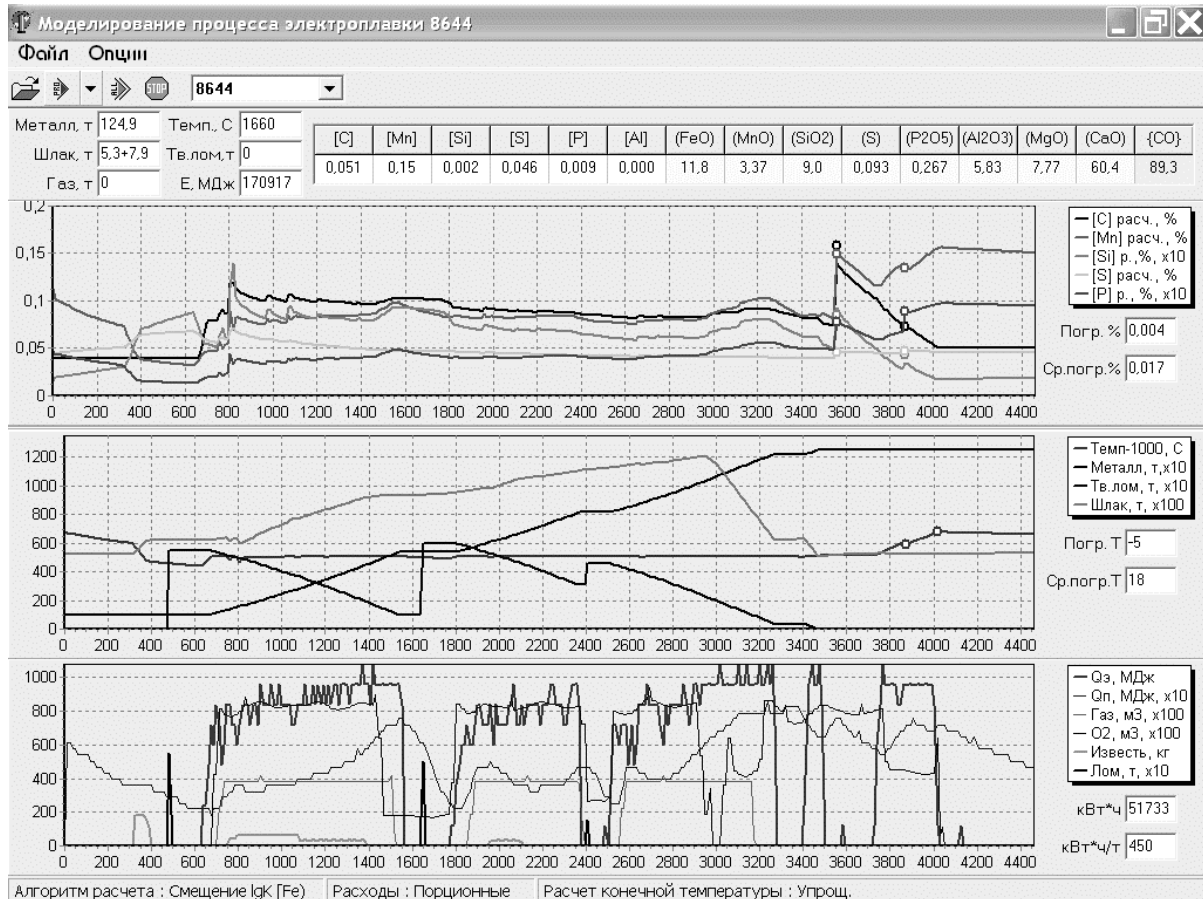


Рисунок 5 – Форма моделирования плавки в дуговой электропечи.

При моделировании электроплавки используются дополнительные файлы протоколов отдачи материалов и энергоносителей в печь, а также тепловых потерь.

Моделирование процессов в ДСП на основе разработанных алгоритмов прямой и обратной задачи с учетом тепла химических реакций и энтальпийного теплового баланса позволяет поднять проектирование технологий электросталеплавильного производства на качественно новый уровень. Эти алгоритмы по существу являются интеллектуальным ядром верхнего уровня систем управления технологическими процессами ДСП.

В таблице 1 приведен типичный пример применения обратной задачи для оптимизации легирования стали 12ГС при выпуске металла в ковш.

Для этой марки стали необходимо обеспечить содержание углерода 0,09-0,15%, марганца 0,8-1,2%, кремния 0,5-0,8%, не более 0,040% серы и не более 0,035% фосфора.

Вариант легирования I, который не является результатом какой-либо оптимизации, имеет максимальную суммарную стоимость материалов 8809 грн. В этом варианте получаем избыточное содержание марганца в стали, тогда как содержание кремния может выйти за нижний предел.

Одним из трех способов, доступных пользователю на главной форме,

например, с помощью функциональной клавиши F10, включим оптимизацию материалов. Время счета составляет доли секунды. В результате для получения стали заданного состава достаточно задать в ковш набор материалов: 1,952 т SiMn, 0,72 т FeSi65 и 0,398 т карбида Si общей стоимостью 7111 грн. (вариант II).

С помощью контекстного меню таблицы материалов (активируемого нажатием правой кнопки мыши) из списка доступных материалов последовательно убираем карбид кремния, ферросилиций, ферромарганец и включаем оптимизацию. С введением каждого нового ограничения стоимость легирования неизменно повышается (варианты III-V), оставаясь, однако, минимальной для данных условий.

Дальнейшее запрещение доступных материалов приведет к срабатыванию алгоритма поиска альтернативных решений с неполным соответствием заданным ограничениям.

Таблица 1. Исходные данные и результаты расчетов различных вариантов легирования стали 12ГС

Материалы	Цена за 1 т, грн.	Оптимальные массы материалов (т) по вариантам					
		I	II	III	IV	V	
FeMn	2375	2		1,496	1,5	нет	
SiMn	2550		1,952			1,955	
FeSi45	1955				2,394	1,668	
FeSi65	2300	1,5	0,72	1,647	нет	нет	
AB-87	6085	0,1					
Коксик	140					0,079	
Карбид Si	1200		0,398	нет	нет	нет	
Стоимость легирования, грн.		8809	7111	7341	8243	8257	
Состав металла, %	На выпуске	Задание	Металл в ковше				
[C]	0,05	0,09-0,15	0,12-0,14	0,13-0,15	0,10-0,12	0,10-0,12	0,09-0,11
[Si]		0,50-0,80	0,48-0,57	0,50-0,59	0,50-0,59	0,50-0,59	0,50-0,59
[Mn]	0,05	0,80-1,20	1,03-1,10	0,80-0,83	0,80-0,85	0,80-0,86	0,80-0,83
[S]	0,038	≤ 0,04 0	0,015-0,016	0,015-0,017	0,015-0,017	0,015-0,016	0,015-0,016

[P]	0,015	$\leq 0,03$ 5	0,025- 0,028	0,023- 0,027	0,023- 0,026	0,023- 0,027	0,024- 0,027
Масса металла, т	147- 151		150,4- 154,5	149,9-154	150,0- 154,1	150,7- 154,8	150,5- 154,6
Состав шлака, %	На вы- пуске	Зада- ние	Шлак в ковше				
(FeO)	23		0,20-0,23	0,21-0,23	0,22-0,24	0,21-0,22	0,21-0,23
(SiO ₂)	16		34,6-34,7	39,8-43,9	39,7-43,8	39,8-43,9	39,8-43,9
(MnO)	5		2,35-2,43	1,97-1,98	1,99-2,07	1,96-2,04	1,97-1,99
(Al ₂ O ₃)	1,5		6,93-11,2	1,74-1,76	1,74-1,76	1,74-1,75	1,74-1,75
(CaO)	50	≤ 55	45,8-50,8	46,5-51,2	46,8-51,2	46,4-51,2	46,4-51,2
(MgO)	4		4,30-4,41	4,43-4,32	4,43-4,32	4,43-4,31	4,43-4,31
(S)	0,1		1,29-2,78	1,29-2,77	1,28-2,77	1,31-2,83	1,30-2,87
(P ₂ O ₅)	0,4		0,003- 0,004	0,003	0,003	0,003	0,003
Масса шлака, т	1,25- 2,5	$\leq 3,0$	1,4-2,49	1,38-2,47	1,38-2,47	1,38-2,47	1,38-2,47
Темпера- тура, С	1625	\geq 1570	1581- 1594	1583- 1596	1586- 1599	1578- 1592	1582- 1595

Примечание. По варианту I оптимизация не проводилась.

Программа «Excalibur» является наукоемким продуктом, в котором реализованы наиболее передовые достижения теории металлургических процессов последних трех десятилетий. Она дает исчерпывающий ответ на любой вопрос, который можно поставить при термодинамическом моделировании системы «металл-шлак-газ» с учетом энтальпийного теплового баланса. Программа служит мощным инструментом исследователя и технолога, позволяющим разрабатывать новые технологии, проигрывать различные варианты ведения плавки, внепечной обработки, раскисления, легирования, десульфурации и дефосфорации стали. «Excalibur» может использоваться также в качестве учебной программы для студентов металлургических специальностей.

Список литературы

1. Пономаренко А. Г. Вопросы термодинамики фаз переменного состава, имеющих коллективную электронную систему // ЖФХ, 1974, Т.48, № 7, С. 1668-1674; № 8, С. 1950-1958.
2. Харченко А. В., Пономаренко А. Г. Экспериментальные основания термодинамической модели коллективизированных электронов // Сб. трудов ДонНТУ.- 2003.- С. 17-24.

3. Харченко А. В., Пономаренко А. Г., Корзун Е. Л. Термодинамическая модель многокомпонентной конденсированной фазы // *Металлургическая и горнорудная промышленность.*- 2004.- № 8.- С. 135-139.
4. Харченко А. В., Пономаренко А. Г. Термодинамическое моделирование системы «металл-шлак-газ» с учетом тепла химических реакций // *Металлургическая и горнорудная промышленность.*- 2004.- №8.- С. 40-43.
5. Харченко А. В. Термодинамическое моделирование системы «металл-шлак-газ» с учетом энтальпийного теплового баланса // *Металл и литье Украины.*- 2005.- № 6.- С. 13-17.
6. Харченко А. В., Пономаренко А. Г. О кинетике межфазного массопереноса в металлургических агрегатах // *Металл и литье Украины.*- 2002.- № 12.- С. 41-42.
7. Харченко А. В. Оптимизация внепечной обработки и легирования стали на основе решения обратной задачи термодинамического анализа // *Металлургическая и горнорудная промышленность.*- 2004.- №8.- С. 115-120.
8. Харченко А. В., Пономаренко А. Г., Довгонюк С. В. Дифференциальные коэффициенты усвоения в компьютерных системах управления плавкой и внепечной обработкой стали // *Металлургическая и горнорудная промышленность.*- 2002.- № 10.- С. 131-137.
9. 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.
10. 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. // В кн. "Тезисы докладов конф. "Моделирование физико-химических систем и технологических процессов в металлургии". - Новокузнецк. - 1991. - С. 222-223.
11. Пономаренко А. Г., Синяков Р. В., Довгонюк С. В., Харченко А. В. и др. Развитие интеллектуальных систем управления технологическими процессами выплавки стали // *Труды Седьмого конгресса сталеплавильщиков. Магнитогорск, 15-17 октября, 2002* - М.: Черметинформация, 2003 - С. 293-297.
12. Синяков Р. В., Гуляев М. П., Мартынов Р. Н., Харченко А. В. и др. Промышленное освоение системы управления внепечной обработкой стали (печь-ковш – вакууматор) ГИБС[®] на БМЗ // *Металл и литье Украины.* - 2005. - №3-4. - С. 98-100.