

Д.Н. Тогобицкая, д.т.н., проф., зав.отделом, ORSID 0000-0001-6413-4823

А.И. Белькова, к.т.н., с.н.с., ORSID 0000-0001-8519-9351

Д.А. Степаненко, к.т.н., с.н.с., ORSID 0000-0002-0184-8295

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

## **РАЗВИТИЕ БАЗЫ ЗНАНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ**

**Аннотация.** В Институте черной металлургии создана База знаний «Металлургия» (БДМет), которую можно использовать для моделирования физико-химических свойств металлургических систем и процессов на базе современных информационных компьютерных технологий. Целью работы является развитие фундаментальных основ и выявление основных направлений развития БДМет, расширение представления информации фундаментальной, технологической и нормативно-справочной направленности для анализа и многокритериальной оптимизации технологических процессов. Составной частью БДМет является также База моделей металлургических систем и технологических процессов, прикладное и программное обеспечения теоретических исследований. База данных содержит экспериментальные данные физико-химических свойств металлических и шлаковых расплавов, образующихся из соответствующих шихтовых материалов в восстановительных и окислительных условиях. Показаны результаты актуальных научных и прикладных разработок отдела физико-химических проблем металлургических процессов. Отмечено, что наличие в БДМет фонда моделей по переделам и единая методология их создания по модульному принципу позволяет обеспечить генерацию моделей в единую сквозную модель, выявить оптимальную схему металлургических процессов и обеспечить производство металла заданного качества в рамках сквозной технологии. Показано, что использование позволяет решать задачи оптимизации технологических процессов производства чугуна и стали. Определены перспективы развития дальнейших исследований для системного накопления в базах документально-фактографических данных и экспериментальной информации о свойствах металлических и шлаковых расплавов, а также их дальнейшего использования в восстановительных и окислительных процессах металлургического производства.

**Ключевые слова:** база данных, база моделей, методология, физико-химическое и математическое моделирование, физико-химические свойства систем, металлургические процессы.

**Ссылка для цитирования:** *Тогобицкая Д.Н., Белькова А.И., Степаненко Д.А.* Развитие базы знаний для моделирования физико-химических свойств металлургических систем и процессов. //«*Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*». – 2019. – Вып.33. – С.193-204. (In Russian). DOI 10.52150/2522-9117-2019-33-193-204

### **Состояние проблемы.**

Современные технологии должны базироваться на глубоких знаниях физико-химических процессов, сопровождающих все сквозные стадии производства металлопродукции. В решении этого вопроса особая роль принадлежит инвестициям ученых академической науки, в совершенстве владеющих методологией научных исследований в области свойств материалов, формирование которых осуществляется по схеме «Шихта+Технология=Готовая продукция».

Современный этап научного познания характеризуется стремлением к глобальному синтезу знаний, что в значительной степени определяется уровнем интеграции знаний Ученых-экспериментаторов и усиливающейся математизацией их анализа, методов обработки и глубокого осмысливания. Именно с таких отправных позиций были развернуты работы по созданию в конце прошлого столетия Банка данных «Металлургия» (БДМет) [1, 2]. Основоположниками принципов создания БДМет явились три крупных научных центра СССР, а инициатором выступил Институт черной металлургии, три ведущих специалиста которого (д.т.н. Товаровский И.Г., д.т.н. Приходько Э.В. и д.т.н. Тогобицкая Д.Н) вошли в Госкомитет по науке и технике по вопросам ведения БДМет. При выработке стратегических решений развития отраслевой металлургии организаторы и участники Проекта ставили глобальную задачу сохранения и преумножения накопленного «золотого» фонда результатов экспериментальных исследований о поведении и свойствах металлургических расплавов и систем, а также доведение результатов фундаментальных исследований до уровня авторизованных программных продуктов с их реализацией для решения практических задач металлургии.

Именно этой важнейшей проблеме в Институте черной металлургии уже несколько десятков лет уделяется самое пристальное внимание. Главным куратором в этом направлении является созданный в конце прошлого века отдел физико-химических проблем металлургических процессов. К настоящему времени отдел не только сохранил принципы создания и развития БДМет, но и обеспечил переход к созданию интегрированной Базы Знаний для сквозного анализа производства металлопродукции на базе современных информационных компьютерных технологий. Отдел физико-химических проблем металлургических процессов самостоятельно и совместно с технологическими отделами института осуществляет фундаментальные, поисковые и прикладные исследования, связанные с созданием информационных технологий в области металлургии чугуна и стали на основе комплексного использования методов физико-химического и математического

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вып.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

*ISSN 2522-9117 «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

моделирования, позволяющих проводить научно-обоснованный поиск новых технологических решений путем вычислительного эксперимента.

Интеграция усилий и накопленные когнитивные знания физико-химиков и математиков обеспечили весомый прогресс методов познания физико-химической природы металлургических систем, их математического моделирования по схеме состав-структура-свойства на уровне межатомного взаимодействия на основе оригинальной концепции направленного химической связи, разработанной д. т.н. Приходько Э.В. и аналитически реализованной в творческом сотрудничестве с д.т.н. Тогобицкой Д.Н.

На протяжении последних 27 лет методика физико-химического моделирования многокомпонентных систем обеспечивает возможность прогнозировать свойства металлических и шлаковых расплавов и систем всех переделов производства металлопродукции на основе расчета параметров межатомного взаимодействия [3], обеспечивает основу для построения и программной реализации надежных моделей процессов производства чугуна, стали и проката, процессов десульфурации, дефосфорации и шлакообразования. Эти разработки реализованы в системах АСНД, АСУП и АСУТП, которые внедрены на многих металлургических предприятиях Украины и стран СНГ.

**Целью настоящей работы является** изложение результатов научных исследований и практических разработок отдела физико-химических проблем металлургических процессов, полученных в последнее десятилетие в рамках развиваемой в Институте черной металлургии Базы Знаний «Металлургия» и направленных на совершенствование методологических основ для прогнозирования и оптимизации металлургических процессов и систем в современных условиях.

**Основной материал исследования.** Создание интегрированной Базы Знаний для сквозного анализа производства металлопродукции требуемого качества при минимальных энергетических и сырьевых затратах на базе современных информационных компьютерных технологий, включает:

- актуализацию и ведение Баз данных фундаментальной, технологической и нормативно-справочной направленности, в частности, экспериментальные данные физико-химических свойств металлических и шлаковых расплавов, образующихся из соответствующих шихтовых материалов в восстановительных и окислительных условиях [4];

- развитие и пополнение Базы моделей, содержащей физико-химические и математические модели металлургических систем и технологических процессов;

- разработку прикладного и системного программного обеспечения теоретических исследований, в частности, средств работы с базами

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вып.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

ISSN 2522-9117 *«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

данных, сервис работы с многомерными данными и инструментальные средства "свертки" физико-химической и технологической информации, методы оценки достоверности экспериментальных данных и работоспособности моделей различного уровня, а также многокритериальной оптимизации технологических процессов.

Наличие баз данных и моделей по каждому переделу производства металлопродукции позволит оперативно генерировать инструментальные средства (подсистемы) для комплексного анализа, прогнозирования и оптимизации физико-химических процессов; технико-экономических показателей технологий получения металла (производительности, расхода энергетических и сырьевых затрат), а также анализа показателей металлургических агрегатов, аудита предприятий и отрасли в целом за счет привлечения современных достижений академической и отраслевой науки, соответствующих технических средств и организации работы технолога с информационно-аналитической системой в режиме тандема взаимной дополнительности.

За последние годы в отделе главное внимание было уделено созданию методологических основ анализа и оптимизации процессов производства чугуна и стали на основе комплексного использования методов математического и физико-химического моделирования. Наиболее значимые научно-практические результаты разработок в этом направлении были получены для практически всех металлургических переделов.

Для решения задач оптимизации состава доменной шихты и качества чугуна на основе установленных закономерностей влияния качества железорудного сырья на процессы их агрегатных преобразований в доменной печи разработана концепция моделирования процессов направленного формирования расплавов, реализованная в виде комплекса физико-химических и математических прогнозных моделей, критериев и методов для оптимизации технико-экономических показателей доменной плавки [5-8]. Методика обеспечивает прогнозный расчет химического состава чугуна и шлака и позволяет решать обратную задачу: определять показатели загружаемой подачи по заданным показателям продуктов плавки. Полученные результаты подтверждены 4 новыми патентами на изобретение (2012-2016гг.), реализованы в компьютерной системе и опробованы для выбора рационального состава доменной шихты в сырьевых условиях ПАО «АрселорМиттал Кривой Рог», МК «Запорожсталь», «Северсталь».

С целью развития научных основ о структуре шлаковых расплавов и использования полученных новых знаний при выборе рационального состава шлаков для процесса электрошлакового переплава выполнены аналитические и экспериментальные исследования теплофизических

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вып.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

*ISSN 2522-9117 «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

свойств шлаков, температур чугуна и шлака, вязкости и электропроводности доменных шлаков, шлаков ЭШП и ШОС, усовершенствованы прогнозные модели для их оперативной оценки на основе накопленных данных. В результате актуализирована база данных «Шлак» и совместно с сотрудниками отдела металлургии стали сформирована база данных «ШОС», содержащая информацию о вязкости и электропроводность шлакообразующих смесей, как структурно чувствительных свойств.

Для учета гетерогенности шлаковых расплавов с целью обоснованного выбора рационального шлакового режима доменной и сталеплавильной плавки на основе взаимосвязи вязкости и удельной электропроводности шлаков разработан критерий - температура гетерогенизации, характеризующий температуру расплава, при которой в равновесном состоянии находятся гетеро- и гомеоплярные связи структурных частиц шлака [9]. С позиции оценки гетерогенности расплавов доменных шлаков научно обоснован рациональный шлаковый режим доменной плавки для условий работы ДП№4 ОАО «Запорожсталь» и ДП№8 ПАО «АМКР».

Результаты исследований использованы для установления оптимального состава шлака процессов ЭШП при участии Института электросварки им. Е.А. Патона НАНУ. Под руководством академика НАНУ М.И. Гасика совместно с сотрудниками ПАО «Днепропетсталь» научно обоснована замена импортного плавикового шпата щелочным алюмосиликат - пегматит Елисеевьского месторождения при внепечной обработке стали на установке «ковш-печь».

Для решения задач оптимизации процессов выплавки и доводки стали совместно с сотрудниками отдела металлургии стали разработана методика прогнозирования физико-химических свойств конвертерных, электропечных и рафинировочных шлаков, которая используется для выбора рационального шлакового режима (ПАО «Меткомбинат им. Дзержинского», ПАО «Днепропетсталь»).

На основе физико-химического моделирования расплавов на уровне межатомного взаимодействия впервые разработан метод оценки и учета микронеоднородности металлических систем с использованием интегральных физико-химических параметров - структурного ( $\Delta d$ ) и зарядового состояния ( $\Delta Z_y$ ) и направленной зарядовой плотности ( $\rho_l$ ), что позволило линеаризовать сложные концентрационные зависимости термодинамических свойств и повысить точность описательных моделей. В частности, с использованием сформированной базы данных «Ферросплавы», включающей информацию отечественных и зарубежных авторов о свойствах ферросплавов широкого сортамента, разработан и программно реализован комплекс моделей для расчета физических и

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. – Вип.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

ISSN 2522-9117 *«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

теплофизических свойств стандартных марок ферросплавов отечественного производства (ФМн78, ФС65 и МнС17), которые целесообразно использовать в системах АСНД и АСУТП доводки стали. Разработана методика генерации комплексных ферросплавов нового поколения, обеспечивающих решение задач легирования и микролегирования стали [10]. По результатам исследований получено авторское право на научное произведение «Методика корректировки содержания элементного состава стали» (№70524, дата регистрации 20.02.2017) [11].

Для решения задач улучшения физико-механических свойств готовой металлопродукции в отделе разработана методика комплексной оптимизации химического состава и технологических параметров производства сталей и сплавов целевого назначения [12], которая прошла апробацию в условиях ряда предприятий отрасли.

В частности, на основе физико-химической модели структуры металлических расплавов научно обоснованные рациональные пределы изменения компонентного состава жаропрочной коррозионностойкой стали 14X17H2 в условиях ОАО «Днепроспецсталь». Обоснована целесообразность разделения общего легирующего комплекса стали на подсистемы: матричную, легирующую и примесную. Выявлена роль примесной микролегирующей подсистемы в формировании механических свойств стали и получены закономерности для оценки степени ее влияния на основе интегральных параметров ее химического состава.

Обоснована и промышленно подтверждена целесообразность микролегирования стали 14X17H2 бором [13], которая обеспечивает необходимое качество и снижение дефектов в металлопродукции на 24 кг/т и 6 кг/т для выборочной и сплошной зачистки соответственно. Алгоритмические и программные средства прошли промышленную апробацию в условиях комбината и переданы технологическим службам для их внедрения в системы контроля и управления качеством металлопродукции ОАО «Днепроспецсталь».

Для решения задач выбора оптимального состава стали совместно с отделом конструкционных сталей создана интегрированная база данных о составе и свойствах колесных сталей, включая нормативно-справочную информацию, данные лабораторных исследований, а также производственные поточные данные плавов. Выявлены закономерности влияния химического состава на физико-механические свойства сталей для железнодорожных колес на уровне межатомного взаимодействия [14]. На основе вычислительного эксперимента и оптимизационных процедур определены рациональные диапазоны изменения элементов матричной системы, обеспечивающие необходимые технологические свойства стали, соответствующие ГОСТ 10791-2004. В результате исследований влияния

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вип.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

*ISSN 2522-9117 «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

температурно-временных параметров на твердость хромомолибденовой стали с использованием управляющих картограмм показано, что на снижение показателей твердости большее влияние оказывает температура нагрева, чем продолжительность изотермической выдержки.

Кроме перечисленных наиболее важных научно-практических результатов, в отделе постоянно ведутся работы по совершенствованию информационно-математического обеспечения исследований, в частности, развивается информационно-поисковая система для ведения баз данных, разработана методика генерации интегральных критериев многопараметрической оптимизации металлургических процессов, развито прикладное обеспечение для оценки достоверности и комплексного анализа оперативных фактических данных, формирования массивов репрезентативных данных с целью снижения зашумленности входной информации для создания адекватных прогнозных моделей, способствующих обоснованному выбору рациональных технологических режимов.

**Заключение.** Потенциал развития исследований отдела физико-химических проблем металлургических процессов связан с развитием фундаментальных основ интегрированной Базы Знаний «Металлургия» для сквозного анализа и оптимизации производства металлопродукции.

В настоящее время в отделе в рамках выполнения академических работ и трех целевых работ конкурсной тематики «Новые материалы» (рук. НИР д.т.н. Бабаченко А.И., д.т.н. Вергун А.С., д.т.н. Муравьева И.Г.) совместно со специалистами технологических отделов ведутся системные работы по накоплению в базах документально-фактографических данных экспериментальной информации о свойствах металлических и шлаковых расплавов и процессах их получения в восстановительных и окислительных условиях. Также в отделе постоянно развивается база моделей, содержащая физико-химические и математические модели металлургических систем и технологических процессов на основе теоретических основ описания физико-химических и теплофизических свойств на уровне межатомного взаимодействия. База знаний является информационной и теоретической основой для создания интеллектуальных систем прогнозирования, оптимизации и управления процессами производства чугуна и стали в составе АСНИ, АСУП и АСУТП.

### **Библиографический список**

1. *Тогобицкая Д.Н., Жмойдин Г.И.* Проблема информационного обеспечения теоретической и прикладной металлургии // Известия АН СССР. Металлургия. Металлы. – 1991. – №4. – С.217–220.

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вип.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

ISSN 2522-9117 *«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

2. *Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н.* Роль информационных технологий в повышении качества металлопродукции // Наукові праці «Сучасні проблеми металургії». Матеріали НПК «Проблеми і перспективи одержання конкурентноздатної продукції в гірничо-металургійному комплексі України». Дніпропетровськ. – 2001. – Т.3. – С.450–462.
3. *Прогнозирование физико-химических свойств оксидных систем / Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая, А.Ф. Хамхотько, Д.А. Степаненко.* // Днепропетровск: Пороги. – 2013. – 339 с.
4. *Бази даних про властивості матеріалів – інформаційна основа моделювання металургійних систем і процесів / Д.М. Тогобицька, А.І. Белькова, Д.О. Степаненко, Ю.М. Ліхачов, І.Р. Снігура* // Матеріали МНТК «Інформаційні технології в металургії та машинобудуванні». Дніпро: НМетАУ. – 2019. – С.37.
5. *Тогобицкая Д.Н.* Выбор состава доменной шихты, обеспечивающего направленное формирование жидких продуктов доменной плавки / Д.Н. Тогобицкая, А.И. Белькова, Д.А. Степаненко [и др.] // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. Днепропетровск. – 2016. – № 3. – С.11–18.
6. *Togobitskaya D.N.* Experience of Using the Integral Indicator of the Domain Charge in Selecting the Basic Mode of the Domain Melt / D.N. Togobitskaya, A.I. Bel'kova, I.G. Murav'eva, D.A. Stepanenko // *Steel in Translation*. – 2018. – Vol. 48. – №. 10. – Pp. 652–658. <https://doi.org/10.3103/S096709121810011X>
7. *Пат. 110435 С2* Україна, МПК (2015.1) С21В 5/00. Спосіб ведення доменної плавки: Пат. 110435 С2 Україна, МПК (2015.1) С21В 5/00 / Д.М. Тогобицька, А.І. Белькова, Д.О. Степаненко, М.А. Гладков, О.С. Скачко (Україна) – № а201409407; Заявлено 26.08.2014; Опубл. 25.12.2015, Бюл. №24. – 5 с.
8. *Пат. 110572 С2* Україна, МПК (2015.1) С21В 5/00. Спосіб доменної плавки луговмісної шихти: Пат. 110572 С2 Україна, МПК (2015.1) С21В 5/00 / Д.М. Тогобицька, Н.А. Цівата, А.І. Белькова, Д.О. Степаненко, (Україна) – № а201411529; Заявлено 23.10.2014; Опубл. 12.01.2016, Бюл. №1. – 4 с.
9. *Пат. 107387 С2* Україна, МПК (2014.1) С21D 5/00. Спосіб дослідження фазових перетворень розплавів електроліту / Д.О. Степаненко, Д.М. Тогобицька, А.Ф. Хамхотько (Україна) – № а201301986; Заявлено 18.02.2013; Опубл. 25.12.2014, Бюл. № 24. – 3 с.
10. *Тогобицкая Д.Н.* Прогнозирование свойств ферросплавов для экспертной оценки эффективности их использования при доводке стали на УПК / Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптюк, А.Ф. Петров, С.В. Греков. // *Металлург. Россия*. 2018. №11. С. 27-32.
11. *Тогобицкая Д.Н., Снігура І.Р., Козачек А.С.* Методика вибору хімічного складу сталі в рамках діапазонів, регламентованих ГОСТом, який забезпечує стабілізацію механічних властивостей // Авторське право на науковий твір (методика корегування вмісту елементного складу сталі) №70524; Дата реєстрації 20.02.2017.
12. *Тогобицкая Д.Н.* Системный подход к выбору оптимального элементного состава стали, обеспечивающего требуемый уровень механических свойств / Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптюк, И.Н. Логзинский [и др.] / *Системные*

- технологии. Региональный сборник научных трудов. Днепропетровск. – 2015. – Вып. 2 (97). – С.91–97.
13. *Тогобицкая Д.Н.* Микролегирование стали 14X17H2 бором в условиях ПАО «Днепроспецсталь» / Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптюк, О.В. Кукса [и др.] // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. Днепропетровск. – 2016 – №1. – С.40–45.
14. *Бабаченко А.И., Тогобицкая Д.Н., Козачек А.С.* Физико-химические критерии и модели для оценки влияния химического состава на свойства колесной стали // *Наукові вісті. Сучасні проблеми металургії*. Дніпропетровськ. – 2014. – №16. – С. 89.

### References

1. Togobitskaya D.N. & Zhmoydin G.I. (1991). Problema informatsionnogo obespecheniya teoreticheskoy i prikladnoy metallurgii [The problem of information support for theoretical and applied metallurgy]. *Izvestiya AN SSSR. Metallurgiya. Metally* [Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Metallurgy. Metals.]. 1991, 4, 217–220. (In Russian).
2. Prikhod'ko E.V. & Togobitskaya, D.N. (2001). Rol' informatsionnykh tekhnologiy v povyshenii kachestva metalloproduktii [The role of information technologies in improving the quality of metal products]. *Naukovi pratsi «Suchasni problemi metalurgii»*. *Matematicheskii NPK «Problemnyye i perspektivnyye konkurentno-proizvodstvennyye komplekсы v Ukraine»* [Scientific works "Modern problems of metallurgy". Materials of NPK "Problems and prospects of obtaining competitive products in the mining and metallurgical complex of Ukraine]. Dnipropetrovsk, 2001, Vol.3, 450-462. (In Russian).
3. Prikhod'ko E.V., Togobitskaya D.N., Khamkhot'ko A.F. & Stepanenko D.A. (2013). *Prognozirovaniye fiziko-khimicheskikh svoystv oksidnykh sistem. [Prediction of the physical and chemical properties of oxide systems]*. Dnepropetrovsk: Porogi, 2013, 339 p. (In Russian).
4. Togobitskaya D.N., Bel'kova A.Í., Stepanenko D.O., Likhachov Yu.M. & Snigura I.R. (2019). Osnovy upravleniya vlast'yu - informatsionnaya baza model'nykh tekhnologiy metallurgii i protsessov [Base data about the power of materials - information basis for the model of metallurgical systems and processes]. *Materiali MNTK «Informatsionnyye tekhnologii v metallurgii i mashinostroyenii»* [Materials of the ISTC Information Technologies in Metallurgy and Machinery]. Dnipro: NmetAU, 2019, pp. 37. (In Russian).
5. Togobitskaya D.N., Bel'kova, A.I. & Stepanenko D.A. et al. (2016). Vybór sostava domennoy shikhty, obespechivayushchego napravlennoye formirovaniye zhidkikh produktov domennoy plavki [Selection of the composition of the blast-furnace charge, providing the directed formation of liquid products of blast-furnace smelting]. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost'* [Metallurgical and mining industry]. 2016, 3, 11-18. (In Russian).
6. Togobitskaya D. N., Bel'kova A.I., Murav'eva I.G. & Stepanenko D.A. (2018). Experience of Using the Integral Indicator of the Domain Charge in Selecting the Basic Mode of the Domain Melt. *Steel in Translation*, 2018, Vol. 48, 10, 652-658. (In Russian). <https://doi.org/10.3103/S096709121810011X>

7. Togobitskaya D.M., Bêl'kova A.I., Stepanenko D.O., Gladkov M.A. & Skachko O.S. *Sposib vedennya domennoï plavki [Method of blast furnace smelting]*: UA Patent 110435 (2015), 5p. (in Ukrainian).
8. Togobitskaya D.M., Tsivata N.A., Bêl'kova A.I. & Stepanenko D.O. *Sposib domennoï plavki lugovmîsnoï shikhti [Method of blast furnace smelting of alkali charge]*, UA Patent 110572 (2015), 4c. (in Ukrainian).
9. Stepanenko D.O., Togobitskaya D.N. & Khamkhot'ko A.F. *Sposib doslidzhennya fazovykh peretvoren' rozplaviv yelektrolitu [A method for studying the phase transformations of electrolyte melts]*, UA Patent 107387 (2014), 3 p. (in Ukrainian).
10. Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P., Petrov A.F. & Grekov S.V. (2018). Prognozirovaniye svoystv ferrosplavov dlya ekspertnoy otsenki effektivnosti ikh ispol'zovaniya pri dovodke stali na UPK [Prediction of the properties of ferroalloys for an expert assessment of the effectiveness of their use in finishing steel at the UPK]. *Metallurg [Metallurgist]*. 2018, 11, 27-32. (In Russian).
11. Togobitskaya D.N., Snigura I.R. & Kozachek A.S. (2017). *Metodika vibrokhimicheskogo sklada stala v predelakh diapazona, reglamentirovannogo GOSTom, yakoby zablagovremennoy stabilizatsii mekhanichnikh vlastivostey [Methods of choosing the chemical composition of steel within the ranges regulated by GOST, which provides stabilization of mechanical properties]*. Avtorskoye pravo na nauchnyy trud (metodika skladskogo ucheta) No 70524 [Copyright for a scientific work (method of adjusting the content of the elemental composition of steel) No 70524], 2017. (in Ukrainian).
12. Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P. & Logozinskiy I.N. et al. (2015). Sistemnyy podkhod k vyboru optimal'nogo elementnogo sostava stali, obespechivayushchiy trebuyemyy uroven' mekhanicheskikh svoystv [A systematic approach to the choice of the optimal elemental composition of steel, providing the required level of mechanical properties]. *Sistemnyye tekhnologii. Regional'nyy sbornik nauchnykh trudov [System technologies. Regional collection of scientific papers]*. 2015, 2 (97), 91-97. (In Russian).
13. Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P. & Kuksa O.V. et al. (2016). Mikrolegirovaniye stali 14KH17N2 borom v usloviyakh PAO «Dneprospetsstal» [Microalloying steel 14Cr17Ni2 with boron under the conditions of PJSC Dneprospetsstal]. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost' [Metallurgical and mining industry]*. 2016, 1, 40-45. (In Russian).
14. Babachenko A.I., Togobitskaya D.N. & Kozachek A.S. (2014). Fiziko-khimicheskiye kriterii i modeli dlya otsenki vliyaniya khimicheskogo sostava na svoystva kolesnoy stali [Physicochemical criteria and models for assessing the effect of chemical composition on the properties of wheel steel]. *Naukovî vîstî. Suchasní problemi metalurgii [Scientific news. Modern problems of metallurgy]*. Dnipropetrovsk, 2014, 16, 89. (In Russian).

**Д.М. Тогобицкая**, д.т.н., проф., зав.відділом, ORSID 0000-0001-6413-4823

**А.І. Белькова**, к.т.н., с.н.с., ORSID 0000-0001-8519-9351

**Д.О. Степаненко**, к.т.н., с.н.с., ORSID 0000-0002-0184-8295

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

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вип.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

ISSN 2522-9117 *«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

## **Розвиток Бази Знань для моделювання фізико-хімічних властивостей металургійних систем та процесів**

**Анотація.** В Інституті чорної металургії створена База знань «Металургія» (БДМет), яку можна використовувати для моделювання фізико-хімічних властивостей металургійних систем і процесів на базі сучасних інформаційних комп'ютерних технологій. Метою роботи є розвиток фундаментальних основ і виявлення основних напрямків розвитку БДМет, розширення уявлення інформації фундаментальної, технологічної та нормативно-довідкової спрямованості для аналізу і багатокритеріальної оптимізації технологічних процесів. Складовою частиною БДМет є також База моделей металургійних систем і технологічних процесів, прикладне та програмне забезпечення теоретичних досліджень. База даних містить експериментальні дані фізико-хімічних властивостей металевих і шлакових розплавів, що утворюються з відповідних шихтових матеріалів в відновлювальних і окислювальних умовах. Показані результати актуальних наукових і прикладних розробок відділу фізико-хімічних проблем металургійних процесів. Відзначено, що наявність в БДМет фонду моделей по переділах і єдина методологія їх створення за модульним принципом дозволяє забезпечити генерацію моделей в єдину наскрізну модель, виявити оптимальну схему металургійних процесів і забезпечити виробництво металу заданого якості в рамках наскрізної технології. Показано, що використання дозволяє вирішувати завдання оптимізації технологічних процесів виробництва чавуну і сталі. Визначено перспективи розвитку подальших досліджень для системного накопичення в базах документально-фактографічних даних і експериментальної інформації про властивості металевих і шлакових розплавів, а також їх подальшого використання в відновлювальних і окислювальних процесах металургійного виробництва.

**Ключові слова:** база даних, база моделей, база знань, фізико-хімічне і математичне моделювання, фізико-хімічні властивості систем, металургійні процеси.

*D.N. Togobitskaya*, Dr. Sci., professor, Head of Department, ORSID 0000-0001-6413-4823

*A.I. Belkova*, PhD, Senior Researcher, ORSID 0000-0001-8519-9351

*D.A. Stepanenko*, PhD, Senior Researcher, ORSID 0000-0002-0184-8295

*Iron and Steel Institute named after Z.I. Nekrasov of the NAS of Ukraine*

### **Development of a knowledge base for modeling the physicochemical properties of metallurgical systems and processes**

**Summary.** The Institute of Ferrous Metallurgy created the Knowledge Base “Metallurgy” (BDMet). It can be used to model the physicochemical properties of metallurgical systems and processes based on modern computer information technology. The aim of the work is to develop the fundamental foundations and identify the main directions of development of PMD, expand the presentation of fundamental, technological and regulatory reference information for analysis and multi-criteria optimization of technological processes. A component of BDMet is also the Base of models of metallurgical systems and technological processes, applied and theoretical

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2019. - Вип.33*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2019. – Collection 33*

ISSN 2522-9117 *«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2019. – Vypusk 33*

research software. The database contains experimental data on the physicochemical properties of metal and slag melts formed from the corresponding charge materials in reducing and oxidizing conditions. The results of relevant scientific and applied developments of the department of physicochemical problems of metallurgical processes are shown. It is noted that the presence in the BDMet of the stock of models according to redistribution and a unified methodology for their creation on a modular basis allows the generation of models into a single end-to-end model. It also allows you to identify the optimal scheme of metallurgical processes and ensure the production of metal of a given quality in the framework of end-to-end technology. It is shown that the use allows us to solve the problems of optimization of technological processes for the production of iron and steel. The prospects for the development of further studies for systemic accumulation in the databases of documentary factual data and experimental information on the properties of metal and slag melts, as well as their further use in reduction and oxidation processes of metallurgical production, are determined.

**Keywords:** database, model database, knowledge base, physicochemical and mathematical modeling, physicochemical properties of systems, metallurgical processes.

**For citation:** *Togobitskaya D.N., Bel'kova A.I., Stepanenko D.A. Razvitiye bazy znaniy dlya modelirovaniya fiziko-khimicheskikh svoystv metallurgicheskikh sistem i protsessov. [Development of a knowledge base for modeling the physical and chemical properties of metallurgical systems and processes.]. «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii».[Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy J 2020, 34. 193-204. (In Russian). . DOI 10.52150/2522-9117-2019-33-193-204*

*Статья поступила в редакцию сборника 17.10.2019 года, прошла внутреннее и внешнее рецензирование (Протокол заседания редакционной коллегии сборника №2 от 23 декабря 2019 года)*