

**ПРОГНОЗУВАННЯ В'ЯЗКОСТІ ХРОМОВМІСНИХ ШЛАКІВ З
ВИКОРИСТАННЯМ ПАРАМЕТРІВ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В РОЗПЛАВАХ**

Степаненко Д.О.¹ [ORCID], Белькова А.І.² [ORCID],

Тогобицька Д.М.³ [ORCID], Бочаров А.В.⁴ [ORCID]

¹Інститут чорної металургії Національної академії наук України, к.т.н., Україна

²Інститут чорної металургії Національної академії наук України, к.т.н., Україна

³Інститут чорної металургії Національної академії наук України,

д.т.н., професор., Україна

⁴Інститут чорної металургії Національної академії наук України,

провідний інженер., Україна

Анотація. Метою роботи є розробка прогнозних моделей в'язкості багатокомпонентних шлакових систем $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO/Fe}_2\text{O}_3\text{-MnO-Cr}_2\text{O}_3$ з використанням параметрів міжатомної взаємодії СНІР (Системи неполяризованих іонних радіусів). В ході дослідження проведено експертну фільтрацію та систематизацію експериментального масиву даних (понад 490 значень), що дозволило ідентифікувати область стабільних гомогенних розплавів. Виконано кластеризацію даних за методами *K-Means* та *DP-GMM*. Встановлено, що структурний дескриптор *NBO/T* забезпечує найбільш фізично обґрунтований поділ шлаків на три групи залежно від ступеня їх полімеризації. Для кожного кластера побудована математична модель в'язкості з використанням інтегральних параметрів міжатомної взаємодії - електронного хімічного еквівалента Δe і параметра стехіометрії ρ . Доведено, що локальні моделі краще враховують специфічний вплив амфотерного оксиду хрому, який нівелюється у загальному масиві через домінуючий вплив основних компонентів. Отримані результати є підґрунтям для оптимізації складів шлакоутворювальних сумішей при виплавці ферохромистих сталей, що сприяє зниженню витрат легуючих елементів та підвищенню енергоефективності процесу.

Ключові слова: оксид хрому, в'язкість шлаку, система СНІР, методи кластеризації, параметри міжатомної взаємодії в розплавах, показник *NBO/T*, прогнозна модель.

Вступ. Ефективність виробництва ферохромистих сталей безпосередньо залежить від рафінуючої здатності шлакових систем $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-MnO-Cr}_2\text{O}_3$, де вміст оксиду хрому визначає їхній структурно-енергетичний

стан та в'язкість. Створення фундаментальних основ прогнозування реологічних властивостей таких розплавів є необхідною умовою для оптимізації складу шлаків та мінімізації втрат дорогих легуючих елементів. Це дозволяє забезпечити високу якість металу при одночасному підвищенні енергоефективності та екологічності металургійного процесу.

Основний матеріал. Аналіз публікацій досліджень впливу оксиду хрому на властивості шлакових розплавів системи $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO/Fe}_2\text{O}_3\text{-MnO}$, показав, що Cr_2O_3 має амфотерний характер і суттєво змінює реологічні властивості розплавів навіть при незначних концентраціях. З метою вивчення взаємозв'язків в'язкості вказаної системи з хімічним складом шлаків та температурою сформовано представницький масив даних з вмістом оксидів хрому.

Основними факторами впливу на в'язкість є компонентний хімічний склад шлаків (титановмісні, вміст алюмінію, магнію і т.д.) та температура виміру. Для врахування впливу повного компонентного складу шлакової системи на її властивості використано інтегральні параметри міжатомної взаємодії в розплавах: хімічний еквівалент складу Δe і показник стехіометрії ρ [1] та структурні дескриптори: оптична основність шлаку Λ та показник NBO/T [2]. Параметр Δe характеризує зарядовий стан системи та взаємодію у зв'язку катіон-аніон; показник стехіометрії шлакової системи визначається відношенням числа катіонів до числа аніонів. Оптична основність характеризує хімічну активність і реакційну здатність шлаку до десульфурації і дефосфорації. Показник NBO/T характеризує структурний стан, зокрема, ступінь полімеризації структури шлаку/розплаву: низький NBO/T \rightarrow структура більш «зв'язана» (полімеризована), високий NBO/T \rightarrow структура більш «розірвана» (деполімеризована).

Аналіз сформованого масиву даних (понад 490 значень показав значну неоднорідність вибірки, зумовлену різним технологічним призначенням шлаків та суттєвими відмінностями в їхньому хімічному складі (наявність інших оксидів – міді, титану та інш.). Для подолання неоднозначності впливу Cr_2O_3 на в'язкість шлаків реалізовано процедуру авторизованої експертної

систематизації вихідного масиву даних. В результаті було ідентифіковано групу даних, що відповідає термічній стабільності в'язкості шлаків (в'язкість $\eta < 3 \text{ Па}\cdot\text{с}$) з вилученням специфічних даних з вмістом оксиду титану.

Враховуючи значну варіацію хімічного складу, виконано процедуру кластеризації даних для виділення фізико-хімічно однорідних груп, у межах яких залежність «склад – в'язкість» відображає специфіку конкретного структурного стану розплаву. Аналіз використання групи методів кластеризації та критеріїв для визначення оптимальної кількості кластерів показав найкращі результати для методів K-Means та DP-GMM. За допомогою цих методів проведено кластеризацію масиву за двома варіантами: інтегральними параметрами Δe і ρ та структурними дескрипторами Λ та показник NBO/T. Встановлено, що обидва методи корелюють між собою, проте кластеризація за параметром NBO/T забезпечила найбільш чіткий поділ масиву на три відокремлені групи з вираженими фізичними межами (низькотемпературні в'язкі полімеризовані, високоосновні гомогенні та особливі високотемпературні в'язкі шлаки з високим ступенем полімеризації), що підтверджено графічною інтерпретацією у координатах «в'язкість – параметри електронної структури» (рис. 1). При цьому неоднозначність впливу Cr_2O_3 на в'язкість шлаку також виразно розподілилася між кластерами.

З урахуванням виявленої неоднорідності вибірки та відмінностей у структурному стані шлаків, побудовано окремі моделі в'язкості для кожного з виділених кластерів. Оскільки характер впливу хімічного складу на в'язкість не є лінійним та враховуючи логарифмічну залежність в'язкості від оберненої температури, для кожної групи шлаків побудовано аналітичну залежність у вигляді:

$$\ln(\eta) = A + B \cdot \rho + C \cdot \rho^2 + D \cdot \Delta e + E \cdot 1000/T \quad (1)$$

Характеристики рівняння (1) для кожної групи шлаків та всьому масиві даних наведено в таблиці 1.

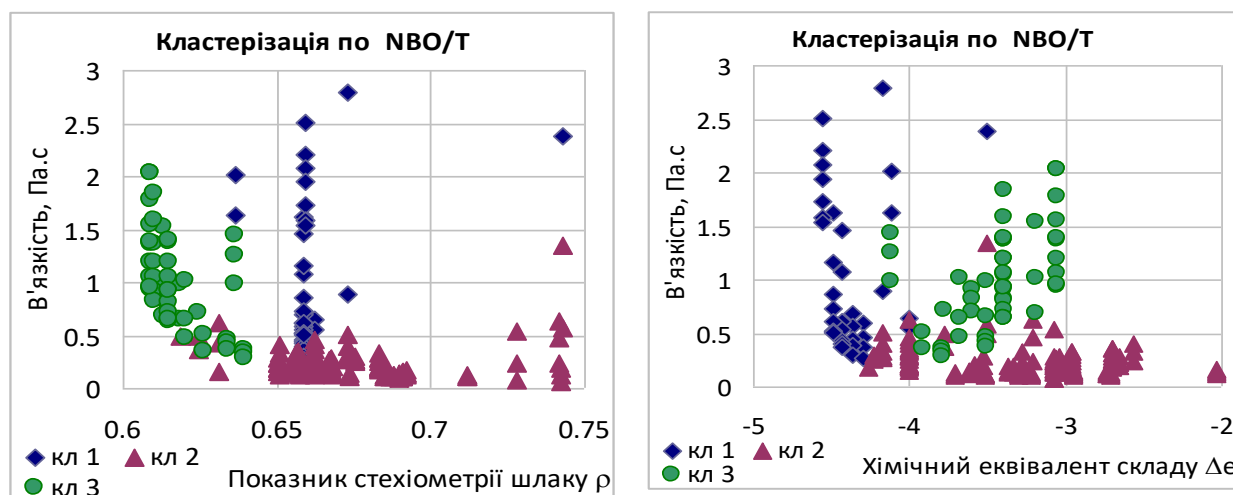


Рисунок 1 – Зв'язок в'язкості з температурою та інтегральними параметрами складу шлаку ρ та Δe по результатам кластеризації масиву даних хромовмісних шлаків

Таблиця

Значення коефіцієнтів регресійного рівняння для розрахунку в'язкості хромовмісних шлаків

Група шлаків (кластер)	Коефіцієнти рівняння					R^2 (точність)
	$\ln(\eta) = A + B \cdot \rho + C \cdot \rho^2 + D \cdot \Delta e + E \cdot 1000/T$					
	A (const)	B (ρ)	C (ρ^2)	D (Δe)	E (1000/T)	
1	258.92	-757.86	548.24	0.3337	4.89	0.56
2	50.77	-161.66	116.65	0.0223	5.75	0.62
3	563.29	-1791.59	1392.50	-0.3252	17.16	0.87
Весь масив	138.76	-424.77	306.25	-0.0417	10.40	0.81

Найкращу точність прогнозу в'язкості отримано для третьої групи шлаків (з коефіцієнтом детермінації $R^2=0,87$). І хоча доволі точною є прогнозна модель на всьому масиві даних, для більш адекватного прогнозування доцільно використовувати модель тієї групи шлаків, до яких буде віднесено досліджуваний шлак. Зниження коефіцієнта детермінації в межах першої та другої групи шлаків порівняно із загальним масивом не свідчить про низьку якість моделей, а є наслідком гомогенізації вибірки. У вузькому діапазоні структурного стану за параметром NBO/T вплив основних факторів (параметрів Δe і ρ) є співмірним із випадковими похибками експерименту, що математично відображається у зменшенні частки загальної дисперсії. Проте, саме локальні моделі враховують специфічний вплив оксиду хрому, який у загальній моделі маскований домінуючим впливом основних компонентів (SiO_2 , CaO).

Висновки

З метою вивчення взаємозв'язків в'язкості шлакових розплавів системи $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO/Fe}_2\text{O}_3\text{-MnO-Cr}_2\text{O}_3$ з хімічним складом хромовмісних шлаків та температурою виконано експертну систематизацію та кластеризацію даних для виділення фізико-хімічно однорідних груп, у межах яких залежність «склад – в'язкість» відображає специфіку конкретного структурного стану розплаву. Встановлено, що використання структурного дескриптора NBO/T дозволяє розділити масив хромовмісних шлаків на три фізико-хімічно однорідні групи з чіткими структурними межами. Розроблено диференційовані моделі на основі параметрів міжатомної взаємодії (Δe і ρ), які забезпечують адекватний прогноз в'язкості, враховуючи специфічний внесок оксиду хрому в кожному структурному стані. Незважаючи на математичну стабільність загальної моделі, саме локальні кластерні рівняння є доцільними для прецизійного керування процесами рафінування легованих розплавів.

ЛІТЕРАТУРА / REFERENCE

1. Togobitska D. and Belkova A. New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the "Metal-Slag" system based on interatomic interaction parameters Lithuanian Journal of Physics. Vol. 64, No. 1, pp. 58-71 (2024). <https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>
2. Mills, KC, Yuan, L, Li, Z, Zhang, GH and Chou, KC. A Review of the Factors Affecting the Thermophysical Properties of Silicate Slags. High Temperature Materials and Processes, vol. 31, no. 4-5, 2012, pp. 301-321. <https://doi.org/10.1515/http-2012-0097>.

PREDICTING THE VISCOSITY OF CHROMIUM-CONTAINING SLAGS USING PARAMETERS OF INTERATOMIC INTERACTIONS IN MELTS

D. Stepanenko, A. Bielkova, D. Togobitska, A. Bocharov

Abstract. *The aim of this work is to develop predictive models of the viscosity of multicomponent $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO/Fe}_2\text{O}_3\text{-MnO-Cr}_2\text{O}_3$ slag systems using SNIR interatomic interaction parameters (System of nonpolar ionic radii). During the study, expert filtering and systematization of the experimental data set (over 490 values) were performed, which allowed the identification of the region of stable homogeneous melts. Data clustering was performed using the K-Means and DP-GMM methods. It was established that the NBO/T structural descriptor provides the most physically sound classification of slags into three groups depending on their degree of polymerization. For*

each cluster, a mathematical model of viscosity was constructed using integral parameters of interatomic interaction—the electronic chemical equivalent Δe and the stoichiometry parameter ρ . It has been proven that local models better account for the specific influence of amphoteric chromium oxide, which is negated in the overall array due to the dominant influence of the main components. The results obtained provide a basis for optimizing the compositions of slag-forming mixtures during the smelting of ferrochromium steels, which contributes to reducing the consumption of alloying elements and increasing the energy efficiency of the process.

Keywords: *chromium oxide, slag viscosity, SNIP system, clustering methods, interatomic interaction parameters in melts, NBO/T ratio, predictive model*