



**Негосударственное частное образовательное учреждение
высшего образования
«Технический университет УГМК»**

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
К ВЫПОЛНЕНИЮ ПРАКТИЧЕСКИХ РАБОТ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ В МЕТАЛ-
ЛУРГИИ**

Направление подготовки	22.03.02 Metallurgy
Профиль подготовки	Metallurgy of non-ferrous metals
Уровень высшего образования	Applied Bachelor

Рассмотрено на заседании кафедры Metallurgy
Одобрено Методическим советом университета 30 июня 2021 г., протокол № 4

г. Верхняя Пышма
2021

Задания и методические указания к выполнению практических работ составлены в соответствии с рабочей программой дисциплины «Использование программного обеспечения в металлургии».

Код направления и уровня подготовки	Название направления	Реквизиты приказа Министерства образования и науки Российской Федерации об утверждении и вводе в действие ФГОС ВО	
		Дата	Номер приказа
22.03.02	Металлургия	04.12.2016	1427

Автор – разработчик /Дата создания/	Агеев Никифор Георгиевич, к.т.н., профессор	
Эксперт	Скопов Геннадий Вениаминович, главный специалист Управления стратегического планирования ООО «УГМК- Холдинг», д-р техн. наук, ст.науч.сотр.	
Заведующий кафедрой «Металлургия» /Дата утверждения/	Мастюгин Сергей Аркадьевич, д-р техн. наук, доцент	
Продолжительность дисциплины	108 часов (3 ЗЕ)	
Место проведения	Учебные аудитории Технического университета УГМК	
Цель дисциплины	<p>По окончании обучения бакалавры будут способны:</p> <ul style="list-style-type: none"> - самостоятельно приобретать знания, используя современные информационные и образовательные технологии; - использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования; - оформлять, представлять и докладывать результаты выполненной работы; - сочетать теорию и практику для решения инженерных задач 	

Практические занятия по дисциплине предусмотрены в объеме 26 часов (очная форма обучения) и в объеме 4 часа закрепление обучающимися, полученных на лекциях теоретических знаний.

Практические занятия для очной формы обучения

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
РЗ	1	Работа с прикладными пакетами	26
Всего			26

Практические занятия для заочной формы обучения

Код раздела, темы	Номер занятия	Тема занятия	Время на проведение занятия (час.)
РЗ	1	Работа с прикладными пакетами	4
Всего:			4

Работа в электронных таблицах Excel

Цель работы: Научить студентов использовать возможности Excel для проведения технологических расчетов, поиска оптимальных условий проведения технологического процесса, представления результатов расчета в наиболее удобной форме.

Задание: Рассчитать материальный и тепловой баланс обжига сульфидного цинкового концентрата. Определить, при какой влажности и составе концентрата возможно проведение обжига на воздушном дутье. Построить зависимость расхода охлаждающей воды от темпа загрузки концентрата, влажности и содержания кислорода в дутье.

Порядок выполнения.

В таблице заданий в соответствии с номером варианта, назначенным преподавателем, взять сведения о составе и влажности концентрата, основных размерах печи КС в которой будет проводиться обжиг, конструкции ее футеровки, теплофизических свойствах материалов, составе подаваемого дутья.

Определить основные реакции. Установить мольные соотношения компонентов в основных реакциях. Вычислить массы компонентов сырья и полученных продуктов (огарка и газов), составить материальный баланс.

Рассчитать тепловые эффекты основных реакций. Вычислить количество тепла, выделяющегося в экзотермических реакциях в течение часа с учетом массы загруженного концентрата. Определить тепловые потери через футеровку и с полученными продуктами. Определить количество тепла, отводимое в холодильники.

Составить тепловой баланс. Изменяя управляющие технологические параметры (темп загрузки, состав и количество дутья) провести вычислительный эксперимент и построить зависимость расхода охлаждающей воды от темпа загрузки концентрата, влажности и содержания кислорода в дутье.

Сформулировать выводы по работе о влиянии управляющих факторов на результат технологического процесса. Определить оптимальные условия проведения процесса.

Используется программа Тренажер оператора печи КС, созданная в среде Excel.

Работа в программном пакете Statistica

Цель работы: Научить студентов использовать возможности пакета Statistica для статистически корректной оценки результатов технологических процессов.

Задание: Имеется две выборки, характеризующие работу технологического отделения завода за базовый период и период внедрения поступившего технологического изменения. Средние значения двух выборок не равны. Требуется корректно оценить, влияет ли на результат процесса внедренное изменение технологии, либо различие средних величин объясняется действием случайных возмущений.

Порядок выполнения.

В таблице заданий в соответствии с номером варианта, назначенным преподавателем, взять исходные данные в виде двух выборок.

Корректная оценка различия средних величин в двух выборках проводится как проверка гипотезы о равенстве средних путем проведения двухвыборочного Z -теста.

Выдвижение гипотез: основная - обе выборки принадлежат одной генеральной совокупности, различие средних обусловлено только случайными причинами, изменение технологии не влияет статистически значимо на результат технологического процесса.

Альтернативная гипотеза - изменение технологии влияет статистически значимо на результат технологического процесса.

Вычислить дисперсии в каждой выборке. Вычислить Z -критерий. Определить табличное значение Z -критерия, сравнить вычисленное и табличное значения. Сделать вывод в отношении основной и альтернативной гипотез.

Сформулировать выводы по работе о влиянии изменения в технологии на результат технологического процесса. Используются программы пакета Statistica.

База данных

Используя базу данных пакета, определите характеристики индивидуального вещества. Определите стандартные значения энтальпии, энтропии этого вещества. Чему равны коэффициенты полинома для расчета мольной теплоемкости? Для какого интервала температур действительны эти значения? Какова температура плавления и кипения этого вещества, имеются ли кристаллографические превращения? Есть ли в базе данных сведения о веществах того же состава, но иного кристаллического строения? Какие еще сведения о данном веществе имеются?

Теоретические основы работы

Пакет содержит термодинамические характеристики более 15000 веществ, как органических, так и неорганических. В базе данных пакета есть характеристики важнейших классов веществ, принимающих участие в реакциях, имеющих практическое значение для металлургических процессов: оксидов, сульфидов, силикатов, ферритов, элементной серы и ее соединений, моно- и диоксида углерода, металлов.

Для каждого вещества приведено стандартное значение энтальпии H_{298} , энтропии S_{298} , и коэффициентов полинома A, B, C, D , по которому рассчитывается значение теплоемкости при произвольно заданной температуре T :

$$C_p = A + B \cdot 10^{-3} \cdot T + C \cdot 10^5 \cdot T^{-2} + D \cdot 10^{-6} \cdot T^2 \quad (1)$$

Границы интервалов температур, в пределах которых действительны соответствующие значения коэффициентов полинома, обозначенные как $T1$ и $T2$, также приводятся в базе данных. Как правило, эти границы обусловлены изменением агрегатных состояний вещества, либо его кристаллографическими превращениями. Указаны температуры плавления (Melting Point) и кипения (Boiling Point).

Информация по каждому веществу приведена в базе данных в виде записи, состоящей из ряда полей. Каждая запись включает следующие поля: состояние, энтропия, энтальпия, коэффициенты полинома для расчета мольной теплоемкости (четыре поля), начальная и конечная температура, определяющие границы интервала, внутри которого действительны коэффициенты полинома.

Агрегатное состояние вещества отмечено в первом поле записи s (solid – твердое), l (liquid – жидкое), или g (газ).

В случае, когда вещество в заданном интервале температур переходит из одного агрегатного состояния в другое, в базе данных информация приведена в виде нескольких записей.

Среди прочей информации указана плотность вещества и его растворимость в воде.

Литературные источники, из которых заимствованы данные, приводятся в базе данных в виде ссылок. Документация к пакету содержит подробный список источников. Следует отметить, что информация заимствована из авторитетных современных публикаций.

Определим термодинамические характеристики заданного в соответствии с одним из вариантов работы вещества, например халькопирита CuFeS_2 .

В меню имеются также и другие кнопки, предназначенные для импортирования данных.

Используя периодическую систему Д.И.Менделеева (рис.2). Укажем элементы, из которых состоит CuFeS_2 . Для этого курсором укажем на кнопку Cu и щелкнем по левой кнопке мыши. В окне ввода появится Cu. Так же укажем и на другие элементы.

Выбираем соответствующее интересующим нас состоянием веществ Gas – газообразные, Condensed – конденсированные (жидкие или твердые), Liquids- жидкости и т.п.

The image shows a software interface for searching a database. At the top, there is a title bar that says "Please select Elements:". Below this is a periodic table of elements. The elements are arranged in rows and columns, with their symbols (e.g., H, He, Li, Be, etc.) displayed in small boxes. A search bar is located at the top left of the periodic table area. Below the periodic table, there is a section labeled "Search Mode:" with several checkboxes and buttons. The checkboxes are: Gases, Condensed, Aqueous ions, Organic (> 2 C). Carbon Limits: (with a text input field), Gas Ions, Liquids, and Aqueous neutral. At the bottom of the interface, there are three buttons: "Exit", "Help", and "OK".

Рис.2. Окно поиска в базе данных

Выбираем подготовленное для исследования химическое соединение (CuFeS_2), и оцениваем информацию о его свойствах (рис.3).

CuFeS2		Copper(II) iron disulfide		1308-56-1				
CuS*FeS		Copper(II) ferrous sulfide		183.513 g/mol				
	H	S	A	B	C	D	T1	T2
	kJ/mol	J/(mol*K)	J/(mol*K)				K	K
s	-190.372	124.976	86.985	53.555	-5.607	0.000	298.150	830.000
s	10.083	12.146	-1441.974	1844.977	0.000	0.000	830.000	930.000
s	0.000	0.000	172.464	0.000	0.000	0.000	930.000	1200.000
	Density	Color	Solubility	Reference			Melting P. K	Boiling P. K
s	4.200	17.000	0.000	Barin 77			1223.000	0.000
s	0.000	17.000	0.000	Barin 77				
s	0.000	17.000	0.000	Barin 77				

Рис.3. Окно просмотра базы данных

Рассмотрим, какая информация содержится в базе данных для выбранного нами вещества. Приведены химическая и структурная формулы, а также общеупотребительное и химическое наименование. Программа рассчитывает и выводит в таблицу мольную массу этого соединения. Значения коэффициентов полинома для расчета мольной теплоемкости даны для трех диапазонов температур: 298-830, 830-930 и 930-1200 К соответственно. Во всем диапазоне температур вещество остается в твердом состоянии. Температура плавления CuFeS_2 равна 1223 К. Приведено также значение плотности (при комнатной температуре), равное 4.2 г/см^3 .

Расчет термодинамических функций для индивидуального вещества

В указанном диапазоне температур рассчитайте C_p , H , S , G заданного по вашему варианту (см. табл. 1) вещества. Постройте графики изменения мольной теплоемкости и энергии Гиббса в зависимости от температуры. Являются ли эти зависимости линейными?

Теоретические основы работы. Используя базу данных рассчитаем термодинамические характеристики индивидуальных веществ: энтальпии H , энтропии S , мольной теплоемкости C_p при произвольных температурах. Для расчета используются, хранящиеся в базе данных стандартные значения энтальпии H_{298} , энтропии S_{298} , и коэффициентов полинома A, B, C, D , по которому рассчитывается значение мольной теплоемкости при произвольно заданной температуре T в соответствии с выражением (1).

Энтальпия вещества при температуре T , отличающейся от стандартной, равной 298 К, рассчитывается по формуле:

$$H_T = H_{298} + \int_{298}^T C_p \cdot dT + \sum H_\phi \quad (2)$$

где H_{298} - значение энтальпии данного вещества в стандартных условиях, C_p -мольная теплоемкость, $\sum H_\phi$ -энтальпия фазовых переходов.

Аналогично определяется величина энтропии:

$$S_T = S_{298} + \int_{298}^T \frac{C_p}{T} \cdot dT + \frac{\sum H_\phi}{T} \quad (3)$$

где S_{298} - значение энтропии данного вещества в стандартных условиях, C_p -мольная теплоемкость, $\frac{\sum H_\phi}{T}$ -энтропия фазовых переходов.

Энергия Гиббса для данного вещества рассчитывается по формуле:

$$G_T = H_T - T \cdot S_T \quad (4).$$

Основной сложностью в расчете термодинамических характеристик вещества при произвольной температуре является вычисление интегралов в выражениях (2) и (3). Для упрощения вычислительных процедур используются методы приближенных вычислений, например метод Тёмкина-Шварцмана. Однако и в этом случае расчет представляет собой довольно длинную рутинную последовательность вычислений и предполагает необходимость обращения к справочным данным.

Определим термодинамические характеристики вещества, заданного в соответствие с одним из вариантов работы, например, фаялита $2\text{FeO} \cdot \text{SiO}_2$.

Варианты написания формул различных веществ приведены ниже в таблице 2.

Таблица 2

Запись формул при использовании пакета программ

Обычная химическая запись	Написание формулы в строке ввода
$2\text{FeO} \cdot \text{SiO}_2$	*2FeO*SiO2
$2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	Ca2SiO4
SO_2	SO2(g)
Cu^{2+}	Cu(+2a)
SO_4^{2-}	SO4(-2a)
$\text{Al}(\text{OH})_3$	Al(OH)3

Далее следует указать диапазон температур, для которого будут рассчитываться термодинамические характеристики вещества и шаг изменения температуры в этом диапазоне. Температура может быть указана как в Кельвинах, так и в градусах Цельсия.

С помощью кнопки **Сору (Копировать)** предварительно выделенную таблицу или ее часть можно копировать в буфер обмена, с помощью которого данные могут быть переданы в другие приложения Windows, например Microsoft Excel, для последующей обработки, построения графиков и т.п. (рис. 4)

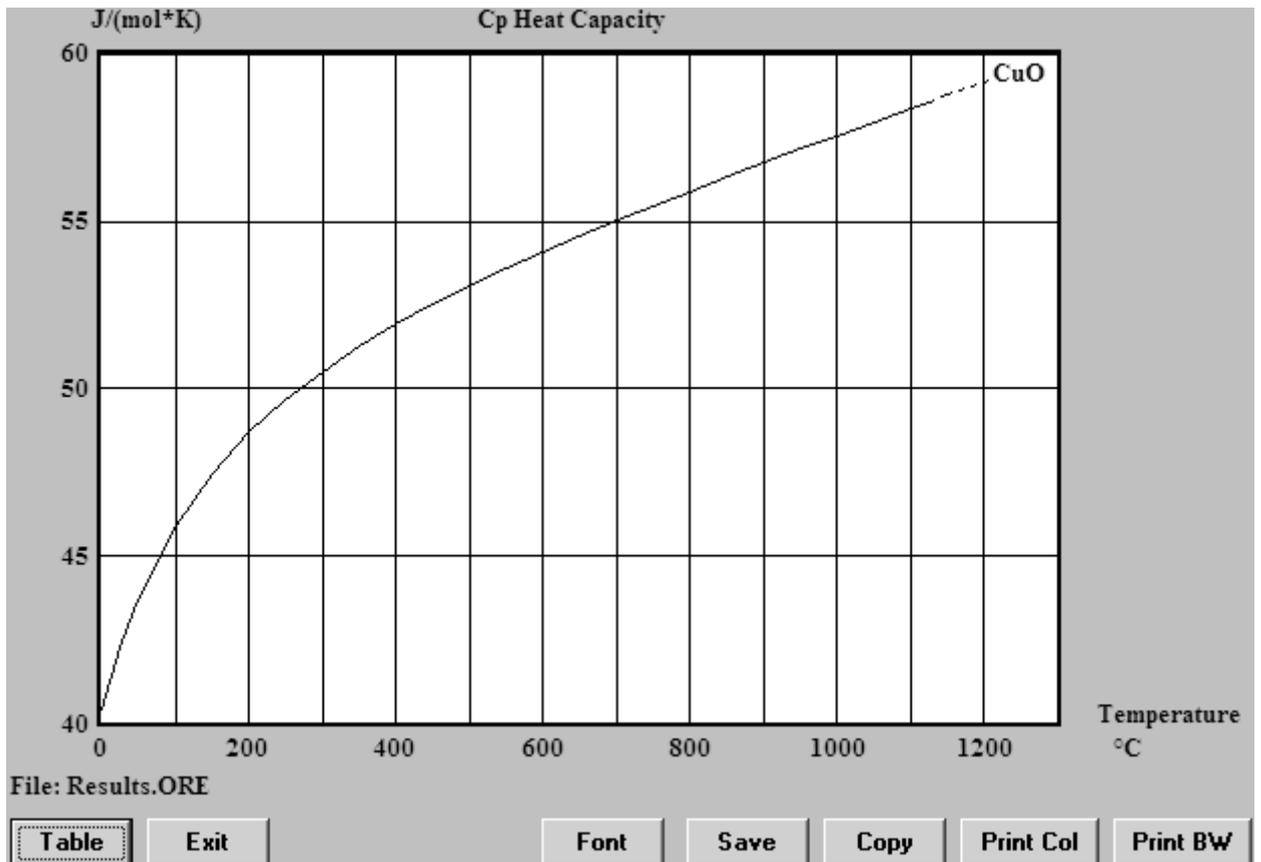


Рис.4. Зависимость мольной теплоемкости вещества от температуры

Термодинамический анализ химических реакций.

Для заданной реакции рассчитайте изменение энтальпии, энтропии, энергии Гиббса и величину константы равновесия. При каких температурах данная реакция термодинамически возможна? Каков тепловой эффект данной реакции? Является ли она экзо- или эндотермической?

Теоретические основы работы. Для исследуемой химической реакции



в которой участвуют исходные вещества A, B и продукты C, D в количествах, соответствующих стехиометрическим коэффициентам a, b, c, d , программа рассчитывает изменение энтальпии ΔH_T , энтропии ΔS_T и величину изменения энергии Гиббса ΔG_T по следующим уравнениям:

$$\Delta H_T = \sum s_i H_{i(\text{продуктов})} - \sum s_i H_{i(\text{исходных})} \quad (6)$$

$$\Delta S_T = \sum s_i S_{i(\text{продуктов})} - \sum s_i S_{i(\text{исходных})} \quad (7)$$

$$\Delta G_T = \sum s_i G_{i(\text{продуктов})} - \sum s_i G_{i(\text{исходных})}, \quad (8)$$

где s_i - стехиометрические коэффициенты. Величина константы равновесия для приведенной химической реакции, равная отношению произведений активностей реагирующих веществ, в степенях, равных стехиометрическим коэффициентам

$$K_p = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (9)$$

связана с изменением энергии Гиббса:

$$\ln K_p = -\frac{\Delta G_T}{RT}, \quad (10)$$

где R - универсальная газовая постоянная, равная 8,31 Дж/(моль К), T - температура.

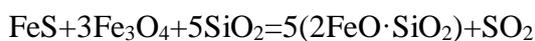
Программа ищет для каждого из веществ-участников химической реакции в базе данных справочные данные: стандартные значения энтальпии и энтропии, коэффициенты полинома для расчета мольной теплоемкости. Используя эти величины, она рассчитывает энтальпию и энтропию веществ и определяет энергию Гиббса при заданной температуре. Далее, в соответствии с приведенными выше формулами, программа рассчитывает термодинамические функции.

Отрицательное значение изменения энергии Гиббса ΔG для данной химической реакции означает возможность ее осуществления в прямом направлении, при положительной величине ΔG реакция невозможна.

Тепловой эффект реакции равен по величине и противоположен по знаку изменению энтальпии ΔH , при $\Delta H > 0$ реакция эндотермическая, идет с поглощением теплоты. При $\Delta H < 0$ реакция экзотермическая, сопровождается выделением теплоты.

Расчеты изменения энтальпии, энтропии и убыли энергии Гиббса выполняются в заданном интервале температур.

Используя правила записи формул, записать уравнение химической реакции. Например, для следующей химической реакции:



следует записать:



Указывать значения стехиометрических коэффициентов необязательно: для того, чтобы их расставить правильно, достаточно записать расчетные значения в виде формулы, коэффициенты при веществах будут вычислены автоматически. Далее в следующем поле ввода Temperature (Температура) указываем начальную, конечную температуру и шаг, предварительно указав, в каких единицах (градусах Цельсия или Кельвинах) она будет задана. Последнее требует установки значка в виде точки против Celsius или Kelvins соответственно, по умолчанию пакет предлагает градусы Цельсия. При записи уравнения реакции следует обратить внимание на состояние (Solid, Liquid или Gas) исходных веществ и продуктов. Газообразные продукты реакции требуют обязательного указания, например $\text{SO}_2(\text{g})$.

Вычисляем в заданном интервале температур с назначенным шагом значения ΔH , ΔS , ΔG , а также константы равновесия и ее логарифма (рис.5).

Как видно на рис.5, значение изменения энергии Гиббса положительно до температуры 1300 °С и становится отрицательным при 1400 °С. Это означает, что исследуемая реакция термодинамически возможна при температурах свыше 1400 °С. Если требуется уточнить температуру начала реакции, то необходимо вернуться в предыдущее окно, изменить границы температурного диапазона, шага по температуре и провести повторный расчет.

Значение ΔH во всем диапазоне температур положительно и достигает приблизительно 700 кДж при наибольшей температуре. Следовательно, реакция идет с поглощением тепла, т.е. является эндотермической.

В нижней части окна программа выводит мольные массы всех участвующих в реакции веществ, количество их молей и массу веществ в граммах. Используя данные о плотностях веществ, программа также рассчитывает объемы реагентов. Последнее актуально для газообразных участников реакции, в данном случае SO_2 .

	A	B	C	D	E	F	G
1	FeS + 3Fe3O4 + 5SiO2 = 5*2FeO*SiO2 + SO2(g)						
2	T	deltaH	deltaS	deltaG	K	Log(K)	
3	C	kJ	J/K	kJ			
4	0.000	314.916	268.573	241.555	6.359E-047	-46.197	
5	100.000	310.934	256.855	215.089	7.740E-031	-30.111	
6	200.000	300.787	232.636	190.716	8.784E-022	-21.056	
7	300.000	291.422	214.749	168.339	4.539E-016	-15.343	
8	400.000	278.595	194.187	147.878	3.343E-012	-11.476	
9	500.000	258.775	166.893	129.742	1.713E-009	-8.766	
10	600.000	229.421	131.134	114.921	1.332E-007	-6.876	
11	700.000	222.527	123.598	102.248	3.246E-006	-5.489	
12	800.000	220.840	121.913	90.009	4.155E-005	-4.381	
13	900.000	212.406	114.023	78.639	3.150E-004	-3.502	
14	1000.000	216.534	117.388	67.081	1.768E-003	-2.752	
15	1100.000	222.487	121.882	55.124	7.996E-003	-2.097	
16	1200.000	197.305	105.489	41.904	3.266E-002	-1.486	
17	1300.000	679.773	428.933	4.997	6.824E-001	-0.166	
18	1400.000	703.006	443.255	-38.625	1.607E+001	1.206	
19							
20	Formula	FM	Conc.	Amount	Amount	Volume	
21		g/mol	wt-%	mol	g	l or ml	
22	FeS	87.907	8.117	1.000	87.907	18.546 ml	
23	Fe3O4	231.539	64.141	3.000	694.616	134.355 ml	
24	SiO2	60.084	27.741	5.000	300.422	115.547 ml	
25		g/mol	wt-%	mol	g	l or ml	
26	*2FeO*SiO2	203.777	94.085	5.000	1018.886	236.950 ml	
27	SO2(g)	64.059	5.915	1.000	64.059	22.414 l	

Рис.5. Результаты расчета термодинамических функций для реакции