

ная и правдивая интонация речи, возникающая вследствие соответствующего изменения высоты тона, определённого темпоритма и умелого применения логических и эмоциональных выразительных средств интонации, делает вещание диктора доходчивым и убедительным [4].

Заключительным этапом создания видеоролика является монтаж. Это довольно трудоёмкий процесс, потому что совсем недостаточно вырезать из отснятого материала кадры и моменты, которые были не очень удачными, а потом склеить всё что осталось. Чтобы добиться качественного видеомонтажа, необходимо соблюдать специальные правила и учитывать физиологические законы человеческого восприятия информации звуковым и слуховым анализаторами [2].

### *Список литературы*

1. Видекер М. А., Заживнова О. А., Романов В.В. Применение технологии скринкастинга в разработке электронных учебных пособий. URL: [http://grouper.ieee.org/groups/ifets/russian/depository/v16\\_i1/pdf/2.pdf](http://grouper.ieee.org/groups/ifets/russian/depository/v16_i1/pdf/2.pdf) (дата обращения: 18.01.2016).

2. Видеомонтаж – искусство или волшебство // Сам Фильм.рф: сайт для творческих людей. 2009 – 2016. URL: [http://www.samfilm.ru/publ/domashnee\\_video/videomontazh\\_iskusstvo\\_ili\\_volshebstvo/1-1-0-21](http://www.samfilm.ru/publ/domashnee_video/videomontazh_iskusstvo_ili_volshebstvo/1-1-0-21) (дата доступа 20.02.2016).

3. Доценко А. 10 полезных советов как записать собственный скринкаст, не переписывая его двести раз // Bizzon.info: Проект «Достоверная информация о бизнесе в Интернет». 2002–2012. URL: <http://bizzon.info/videomarketing/item/694-10-poleznyih-sovetov-kak-zapisat-sobstvennyiy-skrinkast-ne-perepisyivaya-ego-dvesti-raz.html> (дата обращения: 10.04.2014).

4. Техника речи URL: [http://probe.karpekin.de/site/Technika\\_rechi.htm](http://probe.karpekin.de/site/Technika_rechi.htm) (дата доступа 01.02.2016).

5. Choosing a Screencasting Tool. URL: <http://www.indoition.com/screencasting-toolchoosing.htm> (дата обращения: 20.12.2012).

УДК [378.016:669.046]:004

**Э. В. Дюльдина, Б. Р. Гельчинский**

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРЕДСТВ ВИЗУАЛИЗАЦИИ В ПРОЦЕССЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ СПЕЦИАЛИСТОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ**

*Дюльдина Эльвира Владимировна  
e.dyuldina@mail.ru*

*Гельчинский Борис Рафаилович  
brg47@list.ru*

*ФГБОУ ВПО Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова,  
Россия, г. Магнитогорск,*

*ФГБУ Институт металлургии УрО РАН, Россия, г. Екатеринбург*

## **USE OF VISUALIZATION IN THE PHYSICAL AND CHEMICAL TRAINING STUDENTS METALLURGICAL SPECIALTIES**

*Dyuldina Elvira Vladimirovna  
Gelchinski Boris Rafailovich*

*Nosov Magnitogorsk State Technical University, Russia, Magnitogorsk,  
Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia, Ekaterinburg*

**Аннотация.** Представлены результаты использования программного обеспечения для визуализации процессов шлакообразования. Рассмотрено задание по расчету структурных свойств десятикомпонентного расплава производственного шлака методом молекулярно-динамического моделирования. Для расплава были рассчитаны свойства ближнего порядка: парциальные парные корреляционные функции оксидов с разным содержанием в шлаке, расстояния между атомами в зависимости от их сорта и др. Выполнен поиск и рассчитано число ближайших соседей для нескольких пар металлов, металл – кислород. Показано сложное строение шлака, в том числе образование различных структурных элементов, таких как цепочки кремния.

**Annotation.** The results of the use of software for visualization slagging processes. We consider the task of calculating the structural properties of the Ten Point molten slag production by molecular dynamics simulation. Melt properties of low-order have been calculated: the partial correlation functions paired with different contents of oxides in the slag, the distance between the atoms according to their grades, etc. A search is calculated, and the number of nearest neighbors for several pairs of metal, metal - oxygen.. Displaying slag complicated structure, including the formation of various structural elements, such as silicon chain.

**Ключевые слова:** визуализация, преподавание, молекулярная динамика, десятикомпонентный расплав шлака, атомная структура, ближний порядок.

**Keywords:** visualization, teaching, molecular dynamics, molten slag, atomic structure, short-range order.

В настоящее время обучение студентов по направлениям подготовки металлургов требует более глубоких знаний в области теории металлургических процессов. Для современного специалиста необходимо понимание термодинамических и кинетических закономерностей процессов протекающих в сложных металлургических системах, а также механизмов происходящих в них физических процессов и химических реакций. Сложность изучения происходящих явлений связана с тем, что в процессах черной металлургии участвуют две несмешивающиеся фазы: расплав железа и расплав шлака. Процессы с участием расплавов до сих пор наименее изучены. Это связано с недостаточной разработанностью теории жидкого состояния и со значительными экспериментальными трудностями, возникающими при изучении высокотемпературных расплавов.

Опыт ведения образовательной деятельности при изучении физической химии металлургических процессов показывает, что в ходе преподавания прикладных дисциплин требуется более глубокая проработка курсов физики, химии, информатики, компьютерного моделирования.

Для изучения процессов с участием расплавов важно знать их строение, т.е. природу сил взаимодействия атомов и ионов, образующих жидкость и энергию межчастичного взаимодействия. Прогресс в вычислительной технике позволил перейти к моделированию систем, состоящих из многих частиц. Поскольку структура, которой обладает жидкость, реализуется множеством состояний, можно, располагая достаточными вычислительными средствами, непосредственно воспроизвести этот процесс, рассматривая такое число молекул (атомов), чтобы получить средние значения по времени и по фазовому пространству. Студентов необходимо

предварительно ознакомить с методом классической молекулярной динамики где моделируется движение частиц по траекториям в процессе их взаимодействия друг с другом. В настоящее время существует много работ по моделированию однокомпонентных жидкостей, а также ряд исследований двойных систем, обзор которых приведен в [1, 2].

Многочисленные технологические процессы производства черных металлов основаны на активном взаимодействии металла с жидкими шлаками. Поэтому как характер этого взаимодействия, так и строение самого шлака, издавна интересуют металлургов. Для них представляет интерес прогнозное определение свойств доменного или сталеплавильного шлака в том случае, когда химический состав будущего шлака рассчитывается по составу шихтовых материалов, а температура продуктов плавки определяется на выходе из печи по содержанию кремния в чугуне. Знание структуры шлака в жидкой фазе могло бы существенно помочь в решении некоторых проблем, стоящих перед металлургами и в частности, позволило бы получать данные по некоторым важнейшим свойствам шлаков, таким как вязкость, поверхностное натяжение, электропроводность и другие свойства в зависимости от химического состава. Для успешного решения этой задачи необходима информация о зависимости физико-химических свойств и структуры получающегося шлака от химического состава шлакообразующей смеси. Эти данные могут быть получены из экспериментальных исследований, однако для разработки более эффективных технологических процессов зачастую необходимо знать фундаментальные закономерности, лежащие в их основе. Такую информацию может дать микроскопическая теория расплавов и современные методы компьютерного моделирования.

Одним из эффективных способов позволяющих наглядно представлять структурообразование в микрообъектах является визуализация сложных процессов с использованием специализированных программных средств. Сначала проводится исследование структуры и некоторых свойств исследуемого производственного шлака. Моделирование проводится с помощью метода классической молекулярной динамики, а анализ с помощью программ позволяющих произвести визуализацию полученной структур, например, CrystalMaker.

В курсе физическая химия металлургических процессов в разделе «Строение и свойства металлургических расплавов» в рамках практических и лабораторных работ студенты имеют возможность самостоятельно формировать параметры моделирования, наблюдать за процессом моделирования, анализировать графическую информацию, отражающую изменение физических величин, описывающих взаимодействие, и, тем самым, добиваться более глубокого понимания теоретического материала. Для магистрантов первого года обучения идет адаптация пакета программного обеспечения, предназначенного для моделирования и визуализации атомной структуры жидкостей различной природы.

В качестве примера приведем задание по расчету структурных свойств десятикомпонентного расплава производственного шлака методом молекулярно-динамического моделирования. Проведено молекулярно-динамическое моделирование расплава шлакообразующей смеси, состоящего из 10 ионов (Si, Ca, Al, Mg, Mn, K, Na, Fe, F, O), составляющих 10 компонентов ( $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{MgO} - \text{MnO} - \text{CaF}_2 - \text{Na}_2\text{O} - \text{K}_2\text{O} - \text{FeO}$ ), проведено обсуждение результатов и сопоставление с литературными экспериментальными и расчетными данными. Для расплава были рассчитаны свойства ближнего порядка: парциальные парные корреляционные функции оксидов с разным содержанием в шлаке, расстояния между атомами в зависи-

мости от их сорта и др. Выполнен поиск и рассчитано число ближайших соседей для нескольких пар металлов, металл – кислород. Показано сложное строение шлака, в том числе образование различных структурных элементов, таких как цепочки кремния.

После адаптации выходного файла содержащего координаты 2002 частиц была проведена визуализация полученной структуры (рис.1). Визуализация проводилась в программе CrystalMaker. Была получена картина расплава.

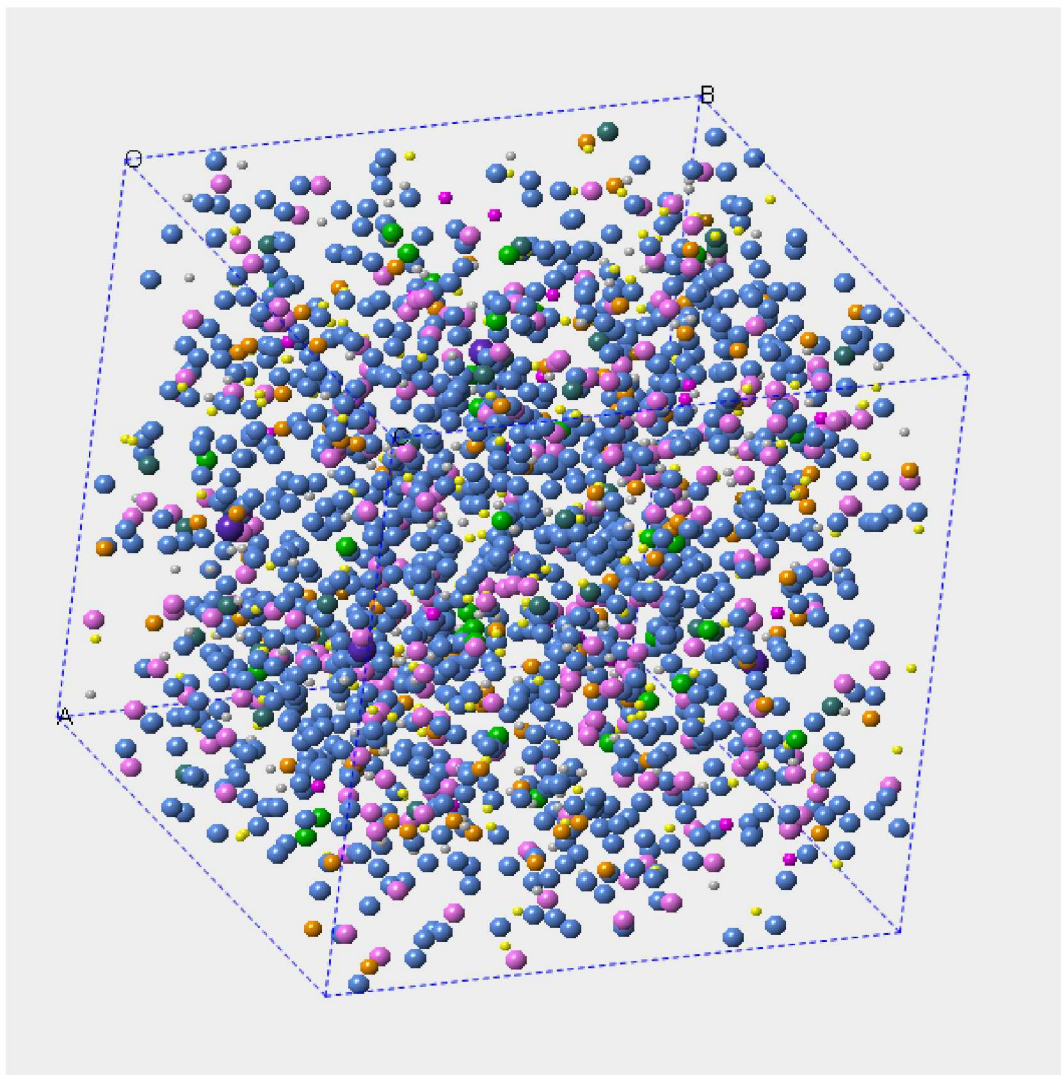
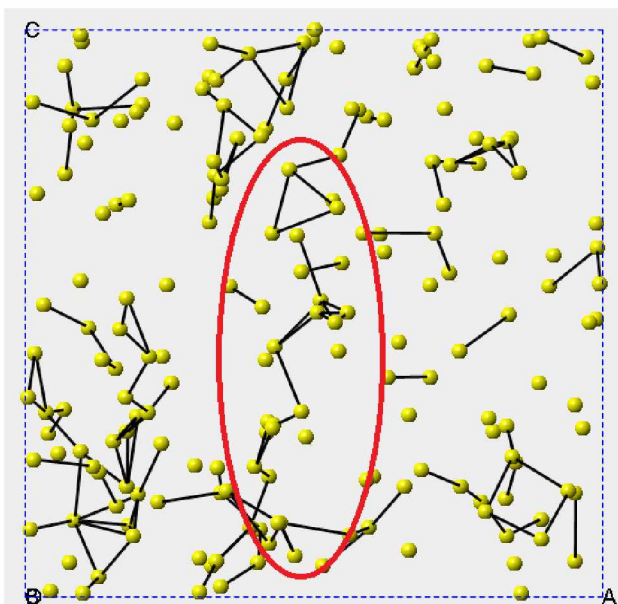
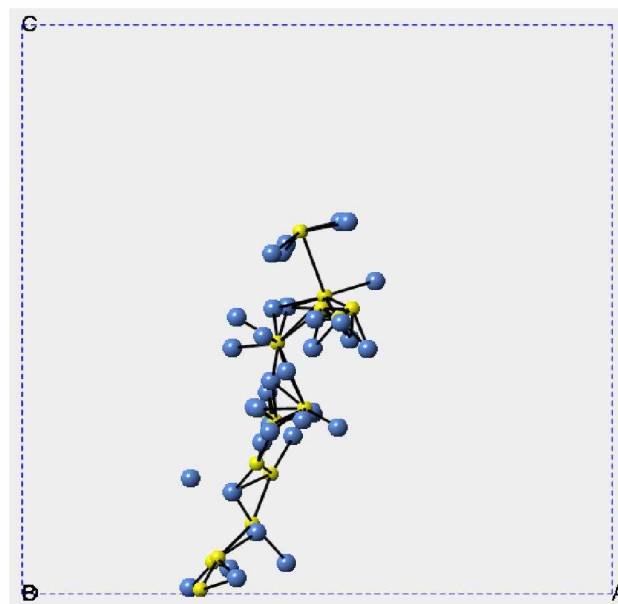


Рисунок 1 – Ячейка 10-компонентного шлака 2002 атома

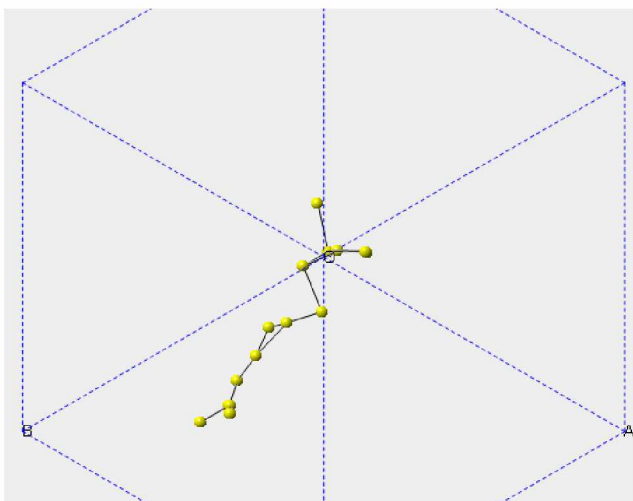
Из следующей модельной картины, ясно, что кремний располагается не равномерно по всему объему шлака, не в виде каких-либо объемных кластеров, а в виде длинных вытянутых цепочек, стоит рассмотреть отдельно выделенную цепочку, которая показана на рисунке 2. На этом рисунке можно заметить, что в окружении кремния непосредственно прибывают четыре и более кислорода, это говорит в пользу теории образования сложных кремнекислородных комплексов и объединения их в цепочки.



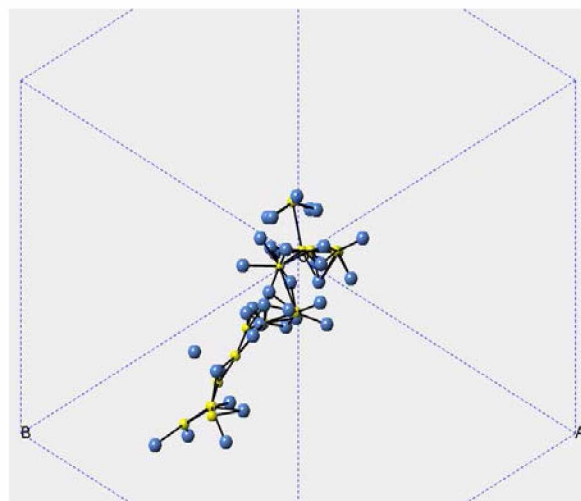
1) Вид Б



2) Si - Цепочка Окружение О



3) Вид В Si - Цепочка



4) Вид В Si - Цепочка – Окружение О

Рисунок 2 – Цепочка кремния в шлаке, Цепочка кремния, окруженная кислородом

### *Список литературы*

1. *Белащенко Д.К.* Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ: Научное издание. - М.: МИСИС, 2005. – 408 с.
2. *Гельчинский Б.Р., Дюльдина Э.В., Селиванов В.Н., Белащенко Д.К.* Физико-химические исследования оксидов и шлаковых систем.- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2016.- 136 с. – ISBN 978-5-9221 – 1700 -5.