

УДК 669.02/09:669-154.083.133 DOI 10.52150/2522-9117-2020-34-150-158

І.Р. Снігура м.н.с., ORCID: 0000-0001-5872-7403**Д.М. Тогобицька** д.т.н., проф., ORCID: 0000-0001-6413-4823**В.П. Піптюк** к.т.н., с.н.с., ORCID: 0000-0002-2915-1756**С.В. Греков** н.с., ORCID: 0000-0003-2849-0999**О.П. Петров** н.с., ORCID: 000-0001-7855-9267**Л.А. Головка** к.х.н., н.с., ORCID: 0000-0002-3872-5950*Інститут чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України*

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ РОЗРОБКИ КОМПЛЕКСНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛУРГІЙНИХ РОЗПЛАВІВ З МЕТОЮ ПРОГНОЗУВАННЯ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ РОЗПОДІЛУ ЕЛЕМЕНТІВ ПРИ ДОВЕДЕННІ СТАЛІ НА УКП

Анотація. Ціль роботи полягає у створенні бази фізико-хімічних знань з блоками оперативних аналітичних виразів, які прогнозують комплекс властивостей металевих, шлакових розплавів та добавок. База призначена для науково-обґрунтованого виробу управляючих дій з метою спрямованого формування якісного металу при доведенні сталі на УКП. В якості основи для опису процесів взаємодії фаз в роботі використано оригінальну методіку фізико-хімічного моделювання складу та властивостей металургійних розплавів, а також накопичений досвід створення інформаційно-аналітичних систем прогнозування та управління процесом плавки. Розроблено моделі для прогнозування властивостей сталей та сплавів спеціального призначення (хромонікелеві, залізовуглецеві сталі широкого сортаментного ряду, алюмінієві, магнієві, жароміцні нікелеві сплави) і феросплавів вітчизняного виробництва. Одержана висока точність прогнозу та стійкість аналітичних виразів, що підтверджено шляхом співставлення з розрахунками на програмному комп'ютерному комплексі. Показано можливість застосування параметрів міжатомної взаємодії для визначення активностей компонентів у бінарних та багатокомпонентних металевих системах. На прикладі сталі 09Г2С проведено генерацію структури моделей для коефіцієнтів розподілу елементів, зокрема Si та Mn, між продуктами плавки при ковшовій обробці. Виявлено структурну подібність моделей для визначення коефіцієнтів розподілу вказаних елементів, що пов'язано з їх близькістю до будовою кластерів однокомпонентних розплавів. Результати роботи доцільно рекомендувати для інтеграції в АСНІ та АСУТП сталеплавильного виробництва з метою формування конкурентоздатного кінцевого продукту.

Ключові слова: металургійні розплави, параметри міжатомної взаємодії, прогнозні моделі, розподіл елементів, УКП

Посилання для цитування: Снігура І.Р., Тогобицька Д.М., Піптюк В.П., Греков С.В., Петров О.П., Головка Л.А. Фізико-хімічні передумови для розробки комплексних співвідношень властивостей металургійних розплавів з метою прогнозування закономірностей розподілу елементів при доведенні сталі на УКП.

Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії. – 2020. – Випуск 34 «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2020. – Vypusk 34 «Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2020. – Collection 34

Стан проблеми. Сучасна світова перевантаженість металургійної галузі низькосортними шихтовими матеріалами та не завжди достатніми за провідним елементом феросплавами призводить до необхідності активного наукового пошуку й розробки інноваційних технологічних рішень спрямованих на максимально можливе використання фізико-хімічної цінності легуючих, рафінуючих, мікролеуючих елементів, що дозволить задовільнити невпинно зростаючі потреби споживачів.

Ефективним важелем для спрямованого формування необхідних властивостей та структурно-фазових складових сплаву, зв'язування шкідливих домішок у комплекси, які термодинамічно легко переходять у шлакову фазу, зниження матеріальних витрат на виробництво є раціональне застосування феросплавів.

Безумовно підбір добавок, що вводять в сталь відноситься до складного багатостадійного фізико-хімічному процесу, який в першу чергу повинен забезпечити максимальний коефіцієнт корисної дії виражений у ступені засвоєння та рівномірності розподілу введеної лігатури з мінімальним сировинно-енергетичними вкладом виробника.

Однак у промисловій практиці часто трапляються витрати феросплавів пов'язані з питаннями екологічного характеру, які знижують їх виробничу значущість при виплавці високочистих марок сталей спеціального призначення, що ймовірно пов'язано не тільки з фізико-хімічними властивостями матеріалу, а й з способом його введення, рівнем технічного оснащення виробництва, та іншими факторами.

Саме тому є важливим створення базисного комплексу оперативних прогнозних моделей розроблених на основі накопичених достовірних експериментальних та технологічних даних про хімічний склад, найважливіші фізико-хімічні, експлуатаційні, теплофізичні властивості металургійних розплавів (сталь, шлак, добавки), які слугують інформаційною основою для теоретичної та прикладної металургії при розробці нових методів направлених на спрямоване формування якісної конкурентоздатної металопродукції.

Актуальність питання оцінки ефективності розподілу добавок підтверджується зростанням кількості досліджень у цій області, серед яких слід відзначити експериментальні та теоретичні дослідження в Національній металургійній академії - школа Гасика М.І.[1]; експериментальні і виробничі дослідження в поєднанні з термодинамічними дослідженнями у Інституті чорної металургії - школа Віхлевшука В.А. [2]; Південно-уральському державному інституті [3], Інституті металургії Уральського відділення РАН – школа Жучкова В.І. [4], на Маріупольському металургійному комбінаті і в ряді інших галузевих інститутах, заводах України та ближнього зарубіжжя.

В ІЧМ розвивається альтернативний підхід до оцінки ступеню засвоєння та вирішення задач моделювання закономірностей розподілу легуючих компонентів, які поєднують склад, структуру, властивості розплавів і особливості технології доведення сталей на УКП.

Ціль роботи – розробка комплексу фізико-хімічних моделей для прогнозування властивостей металевих, шлакових розплавів та добавок на основі фундаментальних положень концепції спрямованого хімічного зв'язку та генерація комплексних показників металургійних розплавів для направленного формування якісного металу.

Основний матеріал досліджень.

Базовою складовою системного підходу до вирішення задач направленного формування сталей заданої якості є розгляд багатокомпонентного розплаву як хімічно єдиної системи, яка враховує вклад кожного компоненту та всі варіативні можливості попарної його взаємодії, у тому числі компонентів в малих концентраційних їх долях.

У той же час хімічна індивідуальність системи, реакційна здатність, структурний стан розплавів виражається за допомогою методу кодування хімічного складу дослідного розплаву на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку [5] в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії: Z^y – параметр зарядового стану системи, e ; d – середньостатистична між'ядерна відстань, 10^{-1} нм; $tg\alpha$ – константа для кожного елемента, яка характеризує градієнт зміни радіусу іона при зміні його заряду; ρ_1 – спрямована зарядова щільність, $e/\text{нм}$.

Ефективність даного методу у вирішенні нагальних питань металургійної галузі підтверджена багатолітнім досвідом та плідною співпрацею ІЧМ з провідними заводами України на яких впроваджено ряд розроблених технологічних управляючих рішень спрямованих на покращення якості сталі, а також новітніми розробками по грантовим напрямкам наукової діяльності [6-9].

В роботі у якості висхідних даних при фізико-хімічному моделюванні використано інформаційний ресурс, створений в ІЧМ НАНУ - репрезентативні бази даних «Банка даних «Металургія» (БДМет) – «Метал», «Шлак», «Феросплави», «Розплави» [9], які знаходяться в стадії постійної експлуатації і активного поповнення сучасними промисловими (ПАТ «ДМК», ПрАТ «Дніпроспецсталь», ПАТ «АрселорМіттал Кривий Ріг» та інші) та літературними (статті, патенти, винаходи, наукові розробки, монографії) даними.

Ґрунтуючись на вказаних напрацюваннях розроблені оперативні прогнозні моделі для визначення температур плавлення та кристалізації, в'язкості та щільності залізобуглецевих та хромонікелевих сталей широкого сортаментного ряду, алюмінієвих, магнієвих, жароміцних нікелевих сплавів з високими показниками детермінованості на рівні $R^2 \geq 0.97$. Працездатність моделей підтверджена їх апробацією шляхом зіставлення з результатами широко відомого зарубіжного спеціалізованого комп'ютерного комплексу JMatPro за сприяння вчених Падерборнського університету (Німеччина) [10], що підтвердило їх адекватність для прийняття рішень з управління температурним режимом плавки (рис.1).

При використанні програми JMatPro для вибірки даних по температурам кристалізації жароміцних нікелевих сплавів спостерігається значна неузгодженість розрахунків з експериментальними значеннями (рис.1б), що відмічено в роботі [11].

З метою формування підґрунтя для виявлення закономірностей розподілу елементів у системі «метал-шлак» розглянуто також феросплавні розплави

вітчизняного виробництва. Аналіз взаємозв'язків першочергових властивостей феросплавів серед яких - температура плавлення (T_n , °C), щільність ($D \times 10^3$, кг/м³), окислюваність та теплофізичні характеристики - теплопровідність λ , Вт/м·К, теплоємність C , Дж/кг·К, теплота плавлення $Q_{пл}$, кДж/кг, коефіцієнт температуропровідності $\alpha \cdot 10^{-3}$, м²/с та інші з параметрами міжатомної взаємодії дозволив встановити найбільш інформативно навантажені та сформувати структуру прогнозних моделей. Наприклад для феросиліцію моделі мають вид: $T_{пл} = f(Z^Y, \rho_i)$ $R^2 = 0.6488$; $D = f(Z^Y)$ $R^2 = 0.9607$; $C_{тв} = f(d)$ $R^2 = 0.7696$; $\lambda = f(\rho_i)$ $R^2 = 0.9843$; $Q = f(\rho_i)$ $R^2 = 0.9537$; $\rho = f(\rho_i)$ $R^2 = 0.9666$; $\sigma = f(\text{tg}\alpha)$ $R^2 = 0.9817$ (рис.2)

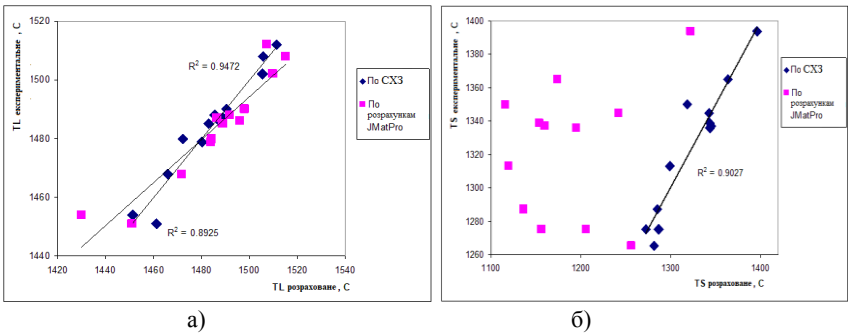


Рисунок 1 – Порівняльний аналіз експериментальних та розрахункових значень: а) – температур лквідус залізвуглецевих сталей; б) – температур солідус жароміцних нікелевих сплавів

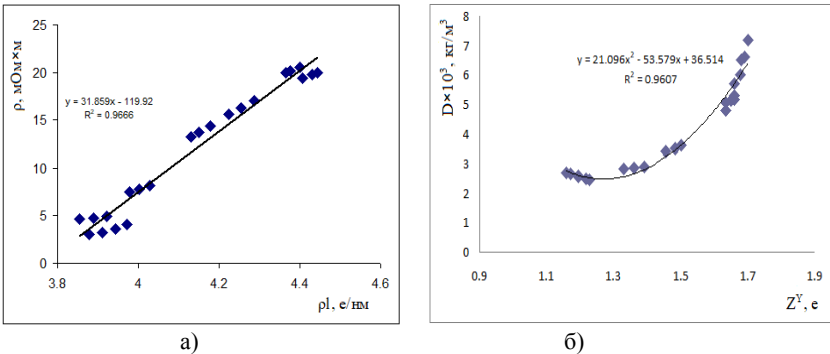


Рисунок 2 – Взаємозв'язок параметрів міжатомної взаємодії з властивостями феросиліцію: а) електроопір; б) щільність.

У більшості моделей, зокрема, прослідковується тісний зв'язок з мікронеоднорідною будовою дослідних розплавів вираженою параметром ρ_i , що свідчить про збереження впливу спадковості та тісні кластерні зв'язки, а отже необхідністю підбору відповідного температурного режиму для досягнення

гомогенності системи без невиправданого перегріву металу. Тому час плавлення феросплаву може носити описовий характер початку руйнування кластерних зв'язків, однак ще не повної гомогенності.

Для визначення часу плавлення комплексних феросплавів розроблені моделі у системах: *Fe-Mn-V*, *Fe-Mn-Nb*, *Fe-Nb-Si*, *Fe-Nb-Al*, *Fe-Si-B*, *Fe-Mn-Si-V*, *Fe-Nb-Si-Al*, *Fe-Si-V-Mn*, *Fe-Mn-Si-V-Ti*, *Fe-Mn-Si-Nb-Al*.

Для марганцевмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho l) \quad R^2 = 0.982 \quad (1)$$

Для ванадійвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho l, tg \alpha) \quad R^2 = 0.692 \quad (2)$$

Для ніобійвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(Z^y, d, \Delta Z^y, \Delta d) \quad R^2 = 0.725 \quad (3)$$

Для борвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho l, d) \quad R^2 = 0.903 \quad (4)$$

Висока точність прогнозу досягнута за рахунок врахування фізико-хімічної індивідуальності кожної із систем та мікронеоднорідності (ρl), (ΔZ^y , Δd).

Однак для спрямованого вибору ходу процесу поряд з базами моделей властивостей металургійних розплавів слід керуватись термодинамічними показниками реакцій взаємодії. Експериментальні дані про активності компонентів у металевій та шлаковій фазах можуть відображати направленість переходу елемента між ними, а отже дозволяють технологічно скорегувати момент та кількість введення добавки у агрегат (рис.3).

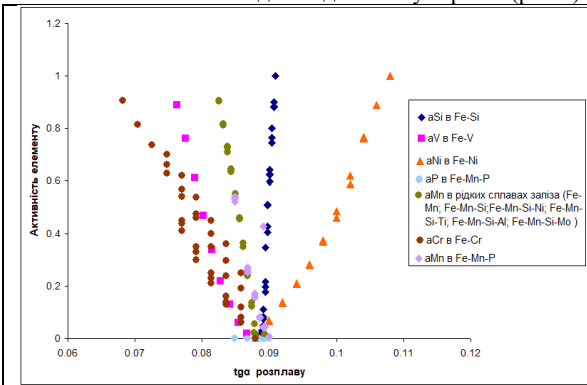


Рисунок 3 – Залежність активностей елементів у металевих розплавах від параметру $tg \alpha$ розплаву

Слід відзначити, цікаву особливість на рис.3, де представлені експериментальні дані активностей різних елементів у бінарних та багатокомпонентних розплавах, а саме таке розгалуження даних, яке пов'язане з вираженням фізико-хімічної індивідуальності систем через градієнт зміни радіуса іона від його заряду, а отже процесу перезарядки (поділу електронів) між взаємодіючими атомами (рис.3).

Як показують наші варіанти генерації структури моделей для коефіцієнтів розподілу елементів між продуктами плавки, значну роль відіграють

співвідношення $K_T = T_{\text{пл.ф}}/T_{\text{сталі}}$, а також щільностей розплавів металу та добавок - $K_D = D_{\text{ф}}/D_{\text{сталі}}$ та інші. При такому підході ступінь ефективності засвоєння добавок оцінюється наближенням системи «метал-шлак» до рівноваги по L_e .

Враховуючи вище згаданий блок моделей для прогнозування властивостей сталей, сплавів та феросплавів, а також активностей компонентів у металевих розплавах створені фізико-хімічні передумови для прогнозування закономірностей розподілу елементів між металевою та шлаковою фазами при доведенні сталі на УКП. Так наприклад для сталі 09Г2С, яка виготовлена в умовах ДМК на основі узгоджених даних методами матеріального балансу виконаний аналіз розподілу елементів Si та Mn при ковшовій її обробці. Виявлена структурна подібність моделей для визначення коефіцієнтів розподілу як кремнію так і марганцю, що пов'язане з їх близькістю по будові кластерів однокомпонентних розплавів – мікронеоднорідністю. В результаті проведеного аналізу отримано адекватні моделі для обчислення коефіцієнтів розподілу Si та Mn в залежності від інтегральних параметрів початкового хімічного складу сталі, шлаку та параметрів технології, які мають вигляд:

$$L_{\text{Si}}, L_{\text{Mn}} = f(d_{\text{поч Me}}, Z_{\text{поч Me}}, d_{\text{поч Шл}}, \Delta e_{\text{поч Шл}}, K_T, K_D, \text{Інтенсивність продуквки}).$$

Висновки.

У зв'язку з нестабільними сировинно-шихтовими умовами та недостатнім промислово-технологічним контролем властивостей металургійних розплавів в ході виплавки високочистої конкурентоздатної сталі виникає необхідність у фізико-хімічному моделюванні властивостей сталей та розробці критеріїв якості, що являється важливою резервною ланкою при вирішенні цільових задач направленої формування складу сталей з урахуванням екологічного фактору.

Сформовані бази експериментальних даних властивостей феросплавів, активностей компонентів у бінарних і багатокомпонентних системах та моделей структури металевих, шлакових розплавів створили передумови для прогнозування першочергових властивостей (температури плавлення та кристалізації, щільність, в'язкість, електропровідність та інші) сталей, сплавів та феросплавів вітчизняного виробництва з урахуванням їх фізико-хімічних особливостей та мікронеоднорідної будови на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку з високою точністю прогнозу.

Одержані закономірності покладені в основу алгоритму прогнозування закономірностей розподілу елементів при доведенні сталі на УКП, що дозволило виконати оцінку ефективності використання добавок та визначити більш придатні умови для повноти протікання процесів легування, рафінування сталі.

Перелік посилань

1. *Гасик М.И., Лякишев Н.П.* Физикохимия и технология электроферросплавов: Учебник. Днепропетровск: Системные технологи, 2008. 453 с.
2. *Вихлевицук В.А., Харахулах В.С., Бродский С.С.* Ковшевая доводка стали. Днепропетровск: Системные технологии, 2000. 190 с.
3. *Никитин М. С., Рябова А. В.* К вопросу об оценке степени усвоения и равномерности распределения олова при легировании стали // Вестник Южно-Уральского государственного университета. 2011. № 36. С.26-29.

4. Жучков В.И., Шешуков О.Ю., Лозовая Е.Ю. Сравнительная оценка эффективности усвоения ферросплавов при выплавке стали // *Электromеталлургия*. 2004. № 5. С. 9 – 11.
 5. Приходько Э.В. *Металлохимия многокомпонентных систем*. Москва: *Металлургия*, 1995. 320 с.
 6. *Оптимизация химического состава стали для железнодорожных колес, обеспечивающего стабилизацию механических и повышение эксплуатационных свойств* // Бабаченко А.И., Тогобицкая Д.Н., Козачек А.С., Кононенко А.А., Кныш А.В., Снигура И.Р. // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. 2016. № 2. С. 67-73.
- Prediction of Ferroalloy Properties for Expert Evaluation of the Efficiency of their Use During Addition to Steel in a Ladle Furnace Unit / Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P., Petrov A.F., Grekov E.V., Mirgorodskaya A.S. // Metallurgist*. 2019. Vol 62. No (11-12). pp. 1115-1122. <https://doi.org/10.1007/s11015-019-00763-5>
7. *Експериментальне дослідження підвищення технологічності брикетів феросиліцію для виробництва сталі* / В.П. Піптюк, Д.М. Тогобицька, К.В. Баюл, І.М. Логозинський, Б.А. Левін, О.П. Петров и др. // *Сучасні проблеми металургії*. Наукові вісті. Дніпро, 2018. №21. Вип. 1. С.50-55. <https://doi.org/10.34185/1991-7848.2018.01.09>
 8. *Базы данных и модели для экспертной оценки эффективности использования ферросплавов при производстве стали* / Тогобицкая Д.Н., Пиптюк В.П., Петров А.Ф., Греков С.В., Снигура И.Р., Лихачев Ю.М. Головки Л.А. // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. 2017. № 31. С. 150-165.
 9. *Тогобицкая Д.Н., Шанер М., Грдин О., Снигура И.Р.* Компьютерное моделирование температур плавления и кристаллизации сплавов специального назначения // *Сталь*. № 6. 2018. С. 11-15.
 10. *Carlson K.D. & Beckermann C.* (2012). Determination of solid fraction–temperature relation and latent heat using full scale casting experiments: application to corrosion resistant steels and nickel based alloys, *International Journal of Cast Metals Research*, 25:2, 75-92, <https://doi.org/10.1179/1743133611Y.0000000023>

References

1. Gasik M.I. & Lyakishev N.P. (2008). *Fizikohimiya i tehnologiya elektroferrosplavov: Uchebnik [Physicochemistry and Technology of Electroferroalloys: Textbook]*. Dnipropetrovsk: Sistemnyie tehnologii, 2008, 453 p. [In Russian].
2. Vihlevschuk V.A., Kharakhulakh V.S. & Brodskiy S.S. (2000). *Kovshevaya dovodka stali [Ladle finishing of steel]*, Dnepropetrovsk: Sistemnyie tehnologii, 2000, 190 p. [In Russian].
3. Nikitin M.S. & Ryabova A.V. (2011). К вопросу об otsenke stepeni usvoeniya i ravnomernosti raspredeleniya olova pri legirovanii stali [On the assessment of the degree of assimilation and uniformity of tin distribution during alloying of steel]. – *Vestnik Yuzhno-Uralskogo gosudarstvennogo universiteta [Bulletin of the South Ural State University]*, 2011, 36, 26-29. [In Russian].

Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії. – 2020. – Випуск 34 «Fundamentalnye i prikladnye problemy chornoj metallurgii». – 2020. – Vypusk 34 «Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2020. – Collection 34

4. Zhuchkov V.I., Sheshukov O.Yu. & Lozovaya E.Yu. (2004). Sravnitel'naya otsenka effektivnosti usvoeniya ferrosplavov pri vyiplavke stali [Comparative assessment of the efficiency of assimilation of ferroalloys in steelmaking]. *Elektrometallurgiya [Electrometallurgy]*, 2004, 5, 9–11. [In Russian].
5. Prihodko E.V. (1995). *Metallohimiya mnogokomponentnykh system [Metal chemistry of multicomponent systems]*. Moskva: Metallurgiya, 1995, 320 p. [In Russian].
6. Babachenko A.I., Togobitskaya D.N., Kozachek A.S., Kononenko A.A., Knyish A.V. & Snigura I.R. (2016). Optimizatsiya himicheskogo sostava stali dlya zheleznodorozhnykh koles, obespechivayushego stabilizatsiyu mekhanicheskikh i povyshenie ekspluatatsionnykh svoystv [Optimization of the chemical composition of steel for railway wheels, ensuring the stabilization of mechanical and improvement of operational properties]. *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost [Metallurgical and mining industry]*, 2016, 2, 67–73. [In Russian].
7. Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P., Petrov A.F., Grekov E.V. & Mirgorodskaya A.S. (2019). Prediction of Ferroalloy Properties for Expert Evaluation of the Efficiency of their Use During Addition to Steel in a Ladle Furnace Unit. *Metallurgist*, 2019, Vol. 62, (11-12), 1115-1122. <https://doi.org/10.1007/s11015-019-00763-5>
8. Piptyuk V.P., Togobitska D.M., Bayul K.V., Logozinskiy I.M., Levin B.A. & Petrov O.P. et al. (2018). Eksperimentalne doslidzhennya pidvischennya tehnologichnosti briketiv ferossilitsiyu dlya virobnitstva stali [Experimental study of increasing the manufacturability of ferrosilicon briquettes for steel production]. *Suchasni problemi metalurgiyi. Naukovi visti [Modern problems of metallurgy. Scientific news]*, Dnipro, 2018, Vol. 1, 21, 50-55. [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.34185/1991-7848.2018.01.09>
9. Togobitskaya D.N., Piptyuk V.P., Petrov A.F., Grekov S.V., Snigura I.R. & Lihachev Yu.M. et al. (2017). Bazyi dannykh i modeli dlya ekspertnoy otsenki effektivnosti ispolzovaniya ferrosplavov pri proizvodstve stali [Databases and models for expert assessment of the efficiency of using ferroalloys in steel production]. *Fundamentalnye i prikladnyye problemy chernoy metallurgii [Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy]*, 2017, 31, 150–165. [In Russian].
10. Togobitskaya D.N., Shaper M., Gridin O. & Snigura I.R. (2018). Kompyuternoe modelirovanie temperatur plavljeniya i kristallizatsii splavov spetsialnogo naznacheniya [Computer modeling of temperature melting and crystallization of special-purpose alloys]. *Stal [Steel]*, 2018, 6, 11–15. [In Russian].
11. Carlson K.D. & Beckermann C. (2012). Determination of solid fraction–temperature relation and latent heat using full scale casting experiments: application to corrosion resistant steels and nickel based alloys. *International Journal of Cast Metals Research*, 25:2, 75-92. <https://doi.org/10.1179/1743133611Y.0000000023>

I.R. Snihura, Junior Researcher, ORCID: 0000-0001-5872-7403

D.N. Togobitskaya, PhD, Professor, ORCID: 0000-0001-6413-4823

V.P. Piptyuk, PhD, Senior Researcher, ORCID: 0000-0002-2915-1756

S.V. Grekov, Researcher, ORCID: 0000-0003-2849-0999

A.F. Petrov, Researcher, ORCID: 000-0001-7855-9267

L.A. Golovko, PhD, Researcher, ORCID: 0000-0002-3872-5950

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

Physicochemical prerequisites for the development of complex relationships between the properties of metallurgical melts in order to predict the regularities of the distribution of elements during the finishing of steel on a ladle furnace

Summary. The aim of the work is to create a base of physical and chemical knowledge with blocks of operational analytical expressions that predict the complex properties of metal, slag melts and additives. The base is designed for a scientifically sound product of control actions for the purpose of directed formation of high-quality metal when bringing steel to the UCP. As a basis for describing the processes of interaction of phases in the work used the original method of physico-chemical modeling of the composition and properties of metallurgical melts, as well as experience in creating information and analytical systems for forecasting and controlling the smelting process. Models for forecasting the properties of steels and alloys for special purposes (chromium-nickel, iron-carbon steels of a wide range, aluminum, magnesium, heat-resistant nickel alloys) and ferroalloys of domestic production have been developed. High accuracy of forecast and stability of analytical expressions is obtained, which is confirmed by comparison with calculations on a software computer complex. The possibility of using interatomic interaction parameters to determine the activities of components in binary and multicomponent metal systems is shown. On the example of steel 09G2C, the structure of models for the distribution coefficients of elements, in particular Si and Mn, between the products of smelting during ladle processing was generated. The structural similarity of the models for determining the distribution coefficients of these elements is revealed, which is due to their proximity to the structure of clusters of one-component melts. The results of the work should be recommended for integration in ASNI and ASUTP of steel production in order to form a competitive end product.

Key words: metallurgical melts, parameters of interatomic interaction, predictive models, distribution of elements, ladle furnace

For citation: *Snihura I.R., Tohobyts'ka D.M., Piptyuk V.P., Hrekov S.V., Petrov O.P., Holovko L.A. Fyzyko-khimichni peredumovy dlya rozrobky kompleksnykh spivvidnoshen' vlastyvostry metalurhiynykh rozplaviv z metoyu prohnouzuvannya zakonomirnostey rozpodilu elementiv pry dovedenni stali na UKP. [Physico-chemical prerequisites for the development of complex relations of properties of metallurgical melts in order to predict the patterns of distribution of elements in the proofing of steel on the Ladle-furnace installation.]. «Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii».[Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy] 2020, 34. 150-158. [in Ukrainian]. DOI 10.52150/2522-9117-2020-34-150-158*

*Стаття надійшла до редакції збірника 10.11.2020 року,
пройшла внутрішнє і зовнішнє рецензування.
(Протокол засідання редакційної колегії №3 від 22 грудня 2020 р.)*