

Д. М. Тогобницька¹, д.т.н., проф., ORCID 0000-0001-6413-4823

І. Р. Поворотня¹, к.т.н., н.с, ORCID 0000-0001-5872-7403

В. П. Піптюк¹, к.т.н., с.н.с, ORCID 0000-0002-2915-1756

О. В. Кукса¹, к.т.н., н.с, ORCID 0000-0002-6268-0692

¹ Інститут чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України

КОМПЛЕКСНА ОЦІНКА ВЛАСТИВОСТЕЙ ДОБАВОК, ЯК НЕОБХІДНА СКЛАДОВА ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ СИСТЕМИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ ПРИ ДОВЕДЕННІ СТАЛІ НА УКП

Анотація. Інформаційною основою для теоретичної та прикладної металургії при розробці рішень спрямованих на удосконалення існуючих та освоєння принципово нових технологічних схем виготовлення високоякісної металопродукції є проблемно-орієнтовані програми в основі яких повинна бути закладена достовірна база даних та моделей. Аналіз сучасних спеціалізованих комп'ютерних програм свідчить про суттєву нестачу таких моделей для багатокомпонентних розплавів, якими є основні учасники металургійних процесів - метал, шлак, добавки. Основна задача роботи полягає у створенні комплексу базових моделей для прогнозування першочергових фізико-хімічних і теплофізичних властивостей металевих розплавів з метою спрямованого формування якісного металу та підвищення його конкурентоздатності. Підрунтам для проведення моделювання обрана оригінальна концепція спрямованого хімічного зв'язку, ядром якої є розгляд металевих розплавів, як хімічно єдиних систем, а не механічної суміші складових елементів та врахування внеску усіх компонентів, навіть у малих концентраціях. В роботі використана важлива інформаційна складова, що представляє собою бази даних про властивості металургійних розплавів, що безперервно поповнюються сучасними даними і містять результати власних й промислових експериментальних досліджень та літературного пошуку (статті, патенти, винаходи, наукові розробки, монографії). Значимість баз даних є беззаперечною та вимагає їх виведення на міжгалузевий та міжвузівський рівень з відкритим доступом, як окремої інстанції по сприянню розвитку наукового рівня та можливостей науковців. Розроблено адекватні математичні моделі на основі інтегральних параметрів міжатомної взаємодії, що забезпечило високу точність оперативного прогнозу ($R^2 \geq 0,9$). Результати досліджень рекомендуються до використання в науково-дослідних та промислових умовах з метою спрямованого формування складу та властивостей продуктів плавки, а також зниження енергетичних витрат,

© Видавець Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН України, 2024



Це стаття відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND 4.0
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/legalcode.uk>

зменшення браку за рахунок прийняття оперативних технологічних рішень за допомогою інтеграції розроблених моделей в АСНД та АСУТП сталеплавильного виробництва.

Ключові слова: метал, добавки, феросплави, параметри міжатомної взаємодії, моделювання, фізико-хімічні властивості, теплофізичні властивості, установка «ківш-піч» (УКП)

Посилання для цитування: Комплексна оцінка властивостей добавок, як необхідна складова інтелектуальної системи прийняття рішень при доведенні сталі на УКП / Д. М. Тогобицька, І. Р. Поворотня, В. П. Піптюк, О. В. Кукса // *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2024. Вип. 38. С. 292-307. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2024-38-292-307>.

Стан проблеми. Наукові ініціативи та їх осучаснення завдяки можливостям комп'ютеризації знань є не лише запорукою формування єдиної спрямованості науки та промисловості у вирішенні нагальних питань сьогодення, а й важливим джерелом розвитку державного економічного потенціалу, що сприяє надходженню іноземних інвестицій, які особливо цінні на даному етапі державотворення. Саме синергія у ланцюзі «наука – промисловість – інвестиції» та їх узгоджена праця здатні виховати обізнану кваліфіковану наукову молодь та забезпечити виготовлення високоякісного конкурентоспроможного металу задля задоволення невпинно зростаючих потреб металоспоживачів у спеціальних сталях, сплавах, чавунах.

Створення інформаційно-інтелектуального ресурсу у металургійній галузі є надзвичайно важливим запитом сьогодення. Спеціалізовані комп'ютерні програми можуть виконувати роль «помічників» на усіх переділах виробничого ланцюгу, що сприятиме не лише підвищенню керованості процесів за рахунок інтеграції останніх відкриттів у фізико-хімічних аспектах поведінки залізобуглецевих розплавів, а й зниженню навантаженості майстрів-сталеварів. Натомість у деяких Європейських країнах та Японії створення спеціалізованих комп'ютерних систем доведено до рівня «цифрового двійника процесу».

Поняття «високоякісний метал», раніше ототожнювали з певними числовими значеннями кінцевого вмісту елементів, однак це не зовсім вірно. Так дійсно існують стандарти у яких вказані межі хімічного складу металу, проте завдяки еволюції поглядів на будову металевих розплавів, розширенню уявлень щодо технологічності процесів виплавки, дане поняття слід інтерпретувати, як злагоджену результуючу роботу усіх переділів з адекватно адаптованими технологічними схемами виробництва в основі яких закладені стійкі

прогнознi моделi фiзико-хiмiчних, теплофiзичних, експлуатацiйних властивостей усiх учасників виплавки залiзовуглецевих сплавiв (метал, чавун, феросплави, шлакоутворюючi сумiшi, рафiнуючi, модифiкуючi добавки), якi саме i забезпечують одержання вiдповiдного рiвня якостi. Функцiональний зв'язок мiж обраною авторами сутнiстю поняття «якiсний метал» та розробленою програмою закладає вiдповiдну похибку у нiй, область застосування, кiлькiсть стадiй розрахункiв, швидкiсть обчислення, а також компонентнiсть, яка стосується, як кiлькостi елементiв хiмiчного складу конкретного розплаву, яку може обрати користувач, так i кiлькостi фiзико – хiмiчних систем взаємодiї, якi може проаналiзувати програма та можливостi врахування технологiчних параметрiв. Таким чином правильний вибiр наукового пiдрунтя є вагомим внеском у точнiсть, стабiльнiсть та надiйнiсть створеного алгоритмiчного та програмного забезпечення.

Алгоритми розрахункiв, що закладенi у програмнi комплекси звичай складнi, iнодi автори нехтують певними факторами впливу, тому виникає необхiднiсть проведення якiсної «згортки» кiлькостi параметрiв з збереженням iх фiзико-хiмiчної, фiзичної чи технологiчної сутностi i правильного визначення факторного навантаження у конкретних умовах виробництва та дiлянки для якої розробляється етап цифровiзацiї. Слiд зазначити, що особливої уваги заслуговує блок добавок, який закладається у програмних продуктах по доведеннi розплаву, оскiльки вони є у значнiй мiрi лiмiтуючими ланками одержання якiсного металу та спрямованого формування його властивостей. Наприклад, у програмi «Оракул», яку розробила школа Пономаренко О.Г. [1, 2] є обмежена кiлькiсть добавок, яку може запропонувати iнтерфейс програми користувачу, а отже зростатиме похибка розрахункiв та викликатимуть сумнiви одержанi результати. По мiрi росту наукового iнтелекту та потенцiалу школи Пономаренко, його дослiдження трансформувались у наступнi пакети прикладних програм «Форвард» [3], «Гiббс», що заснованi на моделi колективiзованих електронiв (МКЕ), яка побудована на методi хiмiчних потенцiалiв Гiббса з урахуванням електронного внеску з метою опису рiвноважного стану в системi «метал-шлак». Серед останнiх напрацювань послiдовникiв цiєї школи слiд зазначити апаратно-програмний комплекс «Майстер» [4, 5], «DesigningMelt» [6], а також навчально-науковий програмний комплекс «Excalibur» [7] у яких використано методи хiмiчних потенцiалiв Гiббса [8] та впроваджено алгоритми диференцiальних коефiцiєнтiв засвоєння [9]. Обмеженiсть фундаментальних експериментальних дослiджень саме у напрямку iонообмiнних процесiв мiж металевою та шлаковою фазами при позапiчнiй обробцi, схиляє науковцiв до використання бiльш

формалізованого запису взаємодій у вигляді термодинамічних реакцій, який відображає наявність певного самоупорядкування між компонентами закладеного законом діючих мас, константами рівноваги і регулюється термодинамічними функціями (ентальпія, ентропія, енергія Гіббса). Саме термодинамічні реакції закладені в основу спеціалізованої програми HSC Chemistry, що має різні версії модифікації та знаходиться у стані активного покращення, однак не про усі хімічні з'єднання є дані в програмі, нажалі вона не може враховувати кінетику реакцій, гідродинаміку, теплофізичні фактори, які впливають на зміну температури, що завжди присутнє у реальних сталеплавильних процесах, тому розрахунки, що у ній проводяться слід розглядати як ймовірні, оскільки програма проводить обчислення для рівноважних складів. Значна заслуга HSC Chemistry у спрощенні термодинамічних розрахунків, що дійсно пришвидшує подальший етап їх аналізу металургіями науковцями, а також можливості побудови діаграм стану.

Однією з активно вживаних металургіями програм також є JMatPro, цільовою установкою якої є моделювання властивостей багатокомпонентних сплавів та сталей, зокрема алюмінієвих, магнієвих, нікелевих, титанових та інших. Як показав наш досвід використання даного програмного забезпечення, то не усі хімічні склади може покрити даний комплекс. Проведені нами дослідження на жароміцних нікелевих сплавах по температурам плавлення та кристалізації показали значну розбіжність у одержаних результатах розрахованих за програмою JMatPro та експерименту, більш точні дані були одержані нами при використанні моделей розроблених на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку, що детально описано у роботі [10]. Порівняльний аналіз прогнозних значень по запропонованій нами моделі (похибка прогнозу - ξ , % = 0,66%) для жароміцних нікелевих сплавів, а при проведенні розрахунків з використанням програмного спеціалізованого комплексу JMatPro спостерігається значна розбіжність та похибка прогнозу зростає до ξ , % = 10,30%, що спричинено виходом за границі діапазону хімічних складів досліджуваних сплавів, для яких був розроблений цей програмний пакет заснований на модифікованому наближенні Шайла [11]. Проте слід зазначити, що для магнієвих і алюмінієвих сплавів одержано адекватні результати, які добре узгоджувались як з експериментальними даними та точністю прогнозу за запропонованими нами моделями.

Наряду з згаданими вище спеціалізованими програмними продуктами на наукових інтернет платформах рекомендують до використання металургам також OpenCalphad, який базується на

розрахунках властивостей однокомпонентних, бінарних і потрійних систем, які можна компанувати для розрахунків багатоконпонентних систем [12]. У роботі [13] згадуються також програми на основі методів скінчених елементів, а саме ABAQUS, ANSYS, THERMOCAL та інші.

Зазвичай більшість програм представлені на англійській мові та не мають україномовного інтерфейсу, тому потребують відповідної бази знань науковця не лише з метою проведення розрахунків, але й у їх інтерпретації. Доступність користування такими програмами здебільшого є платною, іноді розробники надають можливість спробувати демо версію програми з обмеженими можливостями для загального розуміння її працездатності. Розроблення україномовної програми, що буде конкурентоздатною та не поступиться у точності іноземним аналогам, з закладеними стійкими блоками моделей по прогнозуванню властивостей металевих розплавів, розподілу елементів у системі «метал-шлак» та можливістю інтегрування у АСУП та АСНД сталеплавильного виробництва є вельми затребуваним кроком.

Кожна з розглянутих програм, розроблена на певному етапі в процесі розвитку комп'ютерних можливостей, різних способів кодування, в яких використана значна кількість експериментальних даних та є важливою сходинкою пізнання природи металів, їх взаємодій і сприяє подальшому вивченню та ефективному використанню властивостей металевих розплавів. При цьому слід зазначити, що всі вони відрізняються певними припущеннями, що варто враховувати при застосуванні їх до реальних сталеплавильних процесів.

Науковий прорив в області моделювання металургійних процесів на рівні міжатомної взаємодії реалізований в концепції спрямованого хімічного зв'язку розробленої Приходько Е. В. в Інституті чорної металургії ім. З. І. Некрасова [14-18]. Науковий відділ фізико-хімічних проблем металургійних процесів у ІЧМ продовжує справу Приходько Е. В. та розширює сфери застосування концепції, поглиблює і розкриває сутність основних постулатів міжатомної взаємодії з позицій мікронеоднорідності, що свідчить на користь актуалізації даного підходу до опису фізико-хімічних взаємодій в металургійних розплавах.

Мета роботи – оцінка та моделювання властивостей металевих розплавів добавок з позицій фундаментальних положень концепції спрямованого хімічного зв'язку для застосування у якості важеля впливу при подальшому направленому формуванні якісного металу та

оформлення одержаних залежностей у інформаційний блок майбутнього системного забезпечення.

Основний матеріал досліджень. Грунтуючись на проведеному аналізі еволюції уявлень про будову металургійних розплавів їх роль та співставлення з першочерговими питаннями металургії, нами прийнято рішення про створення базисного комплексу оперативних прогностичних моделей розроблених на основі накопичених в базах банку даних «Металургія» (БДМет) достовірних експериментальних та технологічних даних про хімічний склад, найважливіші фізико-хімічні, експлуатаційні, теплофізичні властивості металургійних розплавів. Особливий інтерес представляє саме дослідження етапу доведення сталі за хімічним складом, в тому числі рафінування від шкідливих домішок та неметалевих включень при позапічній обробці сталі, зокрема на установці ківш-піч. За останні роки все більше економічно вигідною та фізико-хімічно обґрунтованою є присадка добавок на стадії позапічної обробки сталі, адже при введених у піч підвищується їх окисленість, відмічаються значні втрати з газовою і шлаковою фазами, а також взаємодія часток добавки з футерівкою печі, що призводить до низького рівня їх засвоєння.

Фізико-хімічну основу для розробки моделей закладено концепцією спрямованого хімічного зв'язку. Головна ідеологія, що робить її унікальним інформаційно-алгоритмічним апаратом оформленим у програмні комплекси «Метал» та «Шлак», заключається у розгляді металургійних розплавів, як хімічно єдиних систем, а не просто механічної суміші складових та вираженню їх зв'язків в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії: Z^Y – параметр зарядового стану системи, e ; d – середньостатистична між'ядерна відстань, 10^{-1}нм ; tga – константа для кожного елемента, яка характеризує градієнт зміни радіусу іона при зміні його заряду; ρ_1 – спрямована зарядова щільність, $e/\text{нм}$. У якості вихідних даних при моделюванні нами використано створені в ІЧМ НАНУ – репрезентативні бази даних банку даних «Металургія» – «Метал», «Шлак», «Феросплави» [19, 20], які знаходяться в стадії постійної експлуатації і активного поповнення сучасними промисловими та літературними даними. Інформаційна потужність таких баз даних дозволяє оперативно генерувати моделі зі зменшенням їх розмірності та забезпеченням відповідної стійкості при зміні вхідних даних.

Завдяки використанню потенціалу концепції спрямованого хімічного зв'язку, виявленню вагомих інформативних параметрів впливу та результатам кореляційно-регресійного аналізу вдалось розробити прогностичні моделі для розрахунку важливих фізико-хімічних

властивостей феросплавів, а саме: температуру плавлення та кристалізації ($T_{пл}$, $T_{ліквідус}$, $T_{солідус}$, °C), щільності (D , кг/м³, ρ , г/см³) і теплофізичних характеристик (теплопровідність - λ , Вт/(м·К); теплоємність - C , Дж/(кг·К); теплота плавлення - $Q_{пл}$, кДж/кг; питомий електроопір - ρ , мОм·м ; тимчасовий опір - σ , МПа) з достатньою точністю прогнозу для інтеграції у АСУТП.

Працездатність розробленого комплексу моделей та адекватність одержаних результатів відпрацьована на сталі 40X та сталей класу SAE. 40X – це вуглецева сталь з підвищеним до 1% вмістом хрому та до 0,04% алюмінію, а вміст марганцю та кремнію в середніх межах по відношенню до 1006 та 1535. SAE - низьковуглецева сталь з незначним до 0,5 і 0,2% відповідно вмістом марганцю та кремнію і незначний кількості вміщує хром, нікель, алюміній та небажані домішки сірку, фосфор. При доведенні їх за хімічним складом на установці «ківш-піч» (УКП) вводили такі добавки: FeCa, FeSi65, FeMn, FeSiMn, SiCa, Al12, FeB, вапно, плавиковий шпат. Мікролегування високоактивними елементами (кальцієм та бором) здійснювалось на останній стадії обробки металу на УКП за рахунок введення порошкового дроту (ферокальцій та сілікокальцій) і кускового феробору при продуванні аргонном на зниженій інтенсивності. Для корегування вмісту алюмінію використовували відповідний дріт.

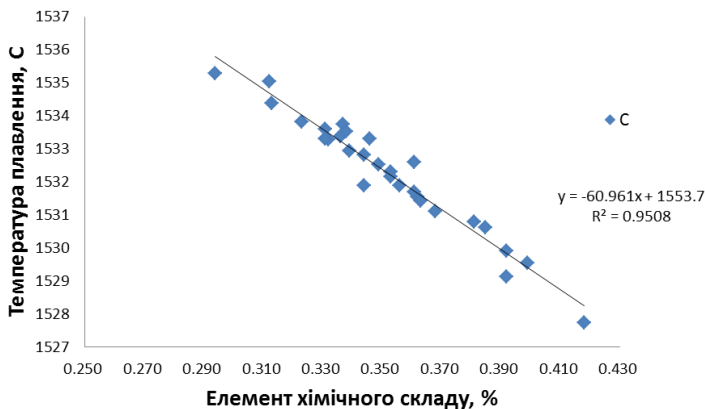
Знання та оперативні методи визначення температури плавлення, що враховують хімічний склад сталі та міжатомну взаємодію між компонентами розплаву, дають можливість уникнути перегріву металу, підвищити його якість та надати рекомендації щодо оптимального температурного режиму плавки. Значимість врахування та визначення температурних умов як лімітуючої ланки в отриманні високоякісного та конкурентоспроможного металопродукту також відзначена у роботах А. А. Howe, G. Allan, A. Kagawa, I. B. Гавриліна, В. Г. Грузіна, І. П. Козачкова, С. Л. Макурова, А. М. Скребцова та багатьох інших вчених.

Температури плавлення та кристалізації сталей визначались по розробленим нами моделям :

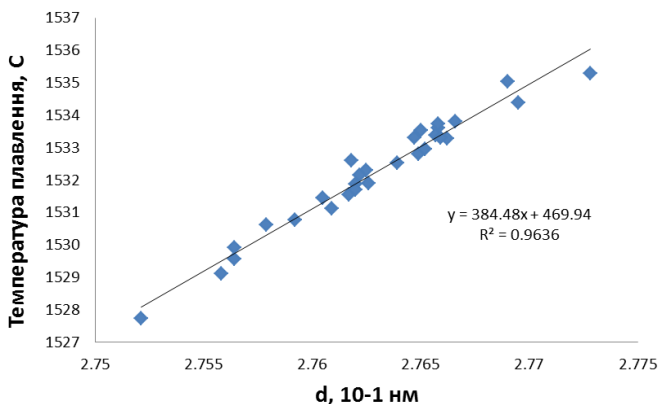
$$T_{солідус}, \text{ } ^\circ\text{C} = 10^3 \times (6,359 + 0,566 Z^Y - 1,571\rho), R^2 = 0,930 \quad (1)$$

$$T_{ліквідус}, \text{ } ^\circ\text{C} = 10^3 \times (2,994 + 0,176 Z^Y - 0,476\rho), R^2 = 0,935 \quad (2)$$

З представлених нижче залежностей помітна суттєва роль на зміну температури плавлення сталі марки 40X вмісту вуглецю (з його збільшенням зменшується температура, рис. 1а). З рештою елементів хімічного складу сталі марки 40X суттєвого впливу не виявлено. Особливо тісний зв'язок відстежується між температурою плавлення та параметром середньозваженої між'ядерної відстані (d), рис. 1б.



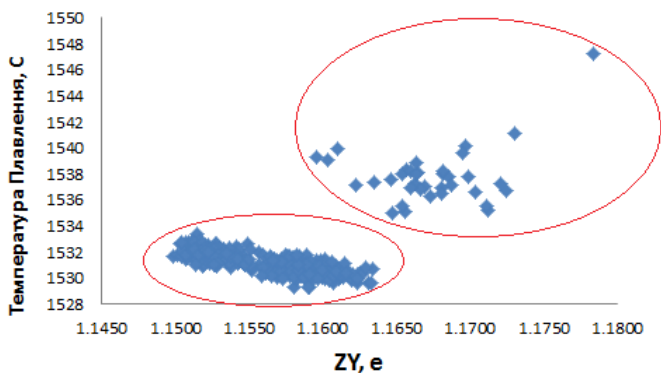
(а)



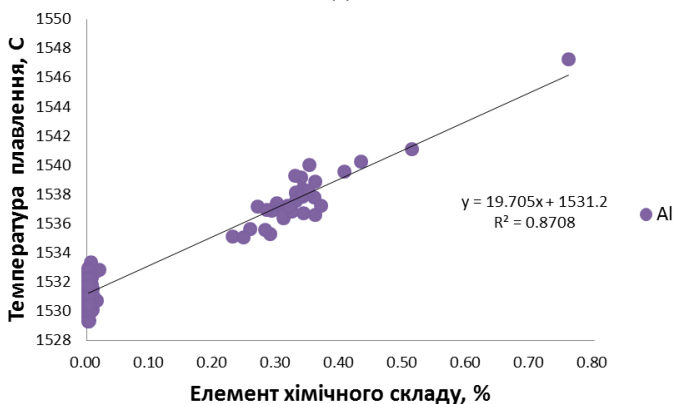
(б)

Рисунок 1 – Фрагмент виявлених взаємозв'язків розрахованої температури плавлення з елементами хімічного складу сталі 40X та параметрами міжатомної взаємодії

У результаті проведеного статистичного аналізу на репрезентативних вибірках даних за визначенням t-критерію Стьюдента для сталі SAE вдалось встановити значимість вмісту алюмінію на зміну температури плавлення сталі, що призвело до утворення двох областей по значенням зарядового стану системи Z^Y (рис. 2.а), що узгоджується з технологічною картою процесу, а саме обробкою на установці «ківш-піч» та додатковим введенням алюмінію (рис. 2б).



(а)



(б)

Рисунок 2 – а) Залежність температури плавлення від зарядового стану системи (Z^Y); б) – Вплив алюмінію на зміну числових значень температури плавлення сталі класу SAE

Прогнозування властивостей феросплавів здійснювалось по моделям, які визначаються високим рівнем точності, а саме:

- для феромарганцю та феросилікомарганцю:

$$T_{пл} = f(Z^Y, \rho_l, \text{tg } \alpha), R^2 = 0,89 \quad (3)$$

$$D = f(Z^Y, \text{tg } \alpha, \Delta d, Zc^{\wedge}Mn), R^2 = 0,958 \quad (4)$$

$$C_{тв} = f(\Delta d, Z^Y, Zc^{\wedge}Mn), R^2 = 0,728 \quad (5)$$

$$\lambda = f(Z^Y, \text{tg } \alpha, d), R^2 = 0,880 \quad (6)$$

$$Q_{пл} = f(Z^Y, \text{tg } \alpha, \Delta d), R^2 = 0,952 \quad (7)$$

$$\rho = f(Z^Y, \text{tg } \alpha, \frac{Zc \wedge Mn}{Zc \wedge C}), R^2 = 0,843 \quad (8)$$

$$\sigma = f(Z^Y, \Delta d, \text{tg } \alpha, Zc \wedge Mn), R^2 = 0,837 \quad (9)$$

- для феросиліцію:

$$T_{пл} = -4781,24 + 931,23Z^Y + 1199,304\rho_l, R^2 = 0,6488; \quad (10)$$

$$D = 21,096(Z^Y)^2 - 53,579 Z^Y + 36,514, R^2 = 0,9607; \quad (11)$$

$$C_{тв} = -2593,4(d)^2 + 11776 d - 12659, R^2 = 0,7696; \quad (12)$$

$$\lambda = -56,512 \rho_l + 252,43, R^2 = 0,9843; \quad (13)$$

$$Q = 14846 \rho_l - 4848,5, R^2 = 0,9537; \quad (14)$$

$$\rho = 31,859 \rho_l - 119,92, R^2 = 0,9666; \quad (15)$$

$$\sigma = -29913\text{tg} \alpha + 2815,4, R^2 = 0,9817. \quad (16)$$

Температури плавлення алюмінієвого дроту визначались по виразу:

$$T_{ліквідус} = -205,25 \cdot (\rho_l) + 1011,5, R^2 = 0,97 \quad (17)$$

Для феробору $R^2 \geq 0,9$:

$$D = -2086 Z^Y + 9902d + 4687,6\Delta Z^Y + 53,36\Delta d - 16809 \quad (18)$$

$$Q = 6243,3 - 164,1 Z^Y - 2041,8d + 175,3\Delta Z^Y + 2136,3\Delta d \quad (19)$$

$$\lambda = 18 + 10,3 Z^Y - 1,46d - 11,1\Delta Z^Y - 5,5\Delta d \quad (20)$$

$$C = 1546,8 - 25,07 Z^Y - 286,2 d - 61,1\Delta Z^Y - 152,4\Delta d \quad (21)$$

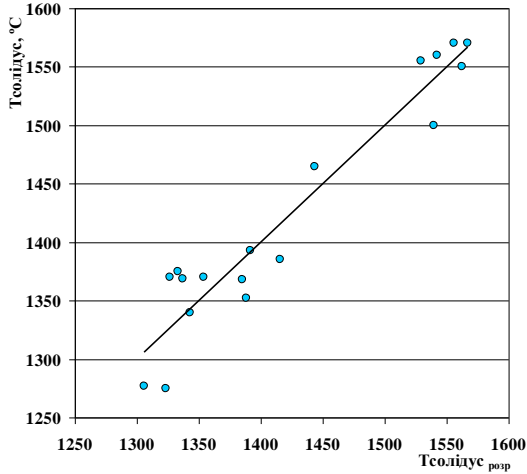
Для хромовмісних феросплавів температури плавлення та кристалізації визначались по моделям (рис. 3) :

$$T_{солідус}, ^\circ\text{C} = 1424,076 + 520,73d - 681,58Z^Y, R^2 = 0,92 \quad (22)$$

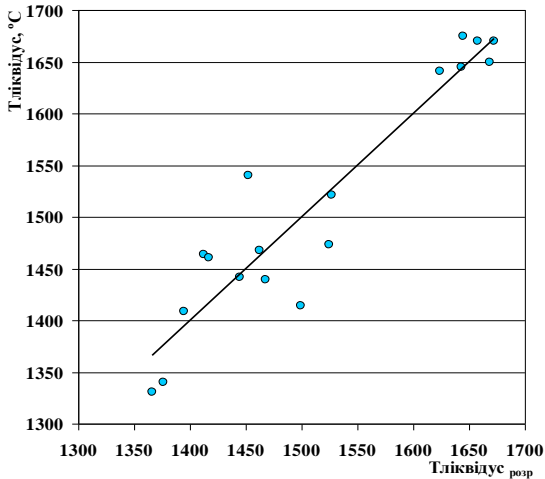
$$T_{ліквідус}, ^\circ\text{C} = 2103,77 + 466,88d - 899,79Z^Y, R^2 = 0,9 \quad (23)$$

Вважаючи на те, що інтегральні параметри міжатомної взаємодії розраховуються з урахуванням впливу всіх присутніх у феросплавах елементів, адекватність прогнозних моделей достатня для практичного використання. Таким чином, органічне поєднання програмних продуктів, що функціонують у виробників з запропонованими блоками розроблених прогнозних моделей дозволить одержати адекватні числові значення ступеню засвоєння добавок, що реально

відображають процес розподілу та взаємодії елементів в системі «метал-шлак» і підвищити ефективність прийнятих оперативних рішень.



(а)



(б)

Рисунок 3 – Порівняльний аналіз розрахункових та експериментальних значень: а) $T_{\text{солідус}}$, б) $T_{\text{ліквідус}}$ хромовмісних феросплавів

Висновки

Сучасні програмні комплекси не можуть працювати уніфіковано на усіх переділах металургійного виробництва адже спрощення, що у них закладені відносяться до конкретних умов експлуатації. Саме тому є така велика кількість програмних модулів для окремих ділянок металургійного циклу. Альтернативним варіантом є розробка наскрізної технології з адекватними блоками моделей.

У результаті виявлених закономірностей впливу параметрів міжатомної взаємодії на фізико-хімічні, теплофізичні властивості сталей та сплавів (залізовуглецевих та хромонікелевих сталей, алюмінієвих, магнієвих, жароміцних нікелевих сплавів) розроблені аналітичні залежності для їх прогнозування з точністю $R^2 \geq 0,9$. Розроблені моделі для металургійних розплавів являються блоковими складовими алгоритмічного і програмного забезпечення для подальшої оцінки ефективності розподілу елементів в системі «метал-шлак-добавка».

Представлений комплекс розроблених аналітичних виразів для прогнозування важливих фізико-хімічних та теплофізичних властивостей дозволив створити засади для ефективного використання добавок та одержання високоякісного металу, що відповідає міжнародним вимогам та є конкурентоздатним не лише на українському металургійному ринку, а також на закордонному.

Перелік посилань

1. Пономаренко А. Г. Вопросы термодинамики фаз переменного состава, имеющих коллективную электронную фазу. I. Свободная энергия фазы. Журнал физической химии. 1974. Т. 48. № 7. С. 1668 –1671.
2. Харченко А. В, Пономаренко А. Г. Экспериментальные основания термодинамической модели коллективизированных электронов. Сб. научных трудов ДонНТУ. Серия : Металлургия. 2003. С. 17 – 24.
3. Харченко А. В., Пономаренко А. Г., Храпок С. А., Иноземцева Е. Н. Разработка информационно-технологической системы «ФОРВАРД» для управления металлургическими процессами в реальном масштабе времени. Известия ВУЗов. Черная металлургия. 1991. № 12. С. 89 – 91.
4. Харченко А. В., Ковалев В. Л., Личконенко Н. В., Ляшенко Р. П. Усовершенствование системы контроля сталеплавильного производства «Мастер». Збірник наукових праць «Металургія». Вип. 2 (42), 2019. С. 11–15.
5. Харченко А. В. Оптимизация процесса раскисления стали с применением аппаратно - программного комплекса «Мастер». Збірник наукових праць «Металургія». Вип. 1 (33), 2015. С. 18–21
6. Синяков Р. В. Разработка технологии выплавки и внепечной обработки стали с использованием программного комплекса «DesigningMelt». Современная электрометаллургия. 2011. № 2. С. 34–37.

7. Харченко А. В., Личконенко Н. В., Мосейко Ю. В. Возможности и перспективы использования программы «Excalibur» в учебном процессе. 36. научных праць ЗДА. Металургія. Вип. 1 (29). 2013. С. 169–175.

8. Харченко А. В., Синяков Р. В., Личконенко Н. В. Применение метода химических потенциалов Гиббса в черной металлургии. Збірник наукових праць «Металургія». Вип. 2 (38). 2017. С. 20–25

9. Харченко О. В. Диференціальні коефіцієнти засвоєння в комп'ютерних системах проєктування і управління плавкою сталі. Метал та лиття України. 2021. №2. С. 30-37.

10. Тогобицкая Д. Н., Шапер М., Гридин О., Снигура И. Р. Компьютерное моделирование температур плавления и кристаллизации сплавов специального назначения. Сталь. 2018. № 6. С. 11 – 15.

11. Carlson K. D., Beckermann C. 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 2012. Vol. 25. No. 2. P. 75-92. <https://doi.org/10.1179/1743133611Y.0000000023>

12. Sundman B., Kattner U. R., Palumbo M. et al. OpenCalphad - a free thermodynamic software. Integr Mater Manuf Innov. 2015. Vol. 4. P. 1–15. <https://doi.org/10.1186/s40192-014-0029-1>

13. Chattopadhyay S. Computer Applications and Simulations in Ferroalloy Production. In: 4th Refresher Course on Ferro Alloys, January 12-14, 1994, Jamshedpur.

14. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования сталей и сплавов. К. : Наукова думка, 1995. 292с.

15. Приходько Э. В. О физико-химической модели структуры металлических расплавов. Изв. АН СССР. Металлы. 1986. № 4. С. 20–26.

16. Приходько Э. В. Металлохимия многокомпонентных систем. М. : Металлургия. 1995. 320 с.

17. Togobitska D., 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. 2024. Vol. 64. No. 1. P. 58-71. <https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>

18. 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. Вип. 31. С. 150 – 165.

19. Банк даних «Металургія» – інформаційна основа прогнозування властивостей фізико-хімічних систем та їх розплавів / Д. М. Тогобицька., Д. О. Степаненко, А. І. Белькова, А. П. Петров, Ю. М. Лихачев // Сучасні проблеми металургії. 2021. Вип.24. С. 140 – 148.

References

1. Ponomarenko, A. G. (1974). Voprosi termodinamiki faz peremennogo sostava, zhemyshchikh kolektivnyuyu elektronnyuyu fazu. I. Svobodnaya energiya fazi // Zhurnal fizicheskoi khimii, 48(7), 1668–1671

2. Kharchenko, A. V., & Ponomarenko, A. G. (2003). Eksperimentalnie osnovaniya termodinamicheskoi modeli kollektivizirovannikh elektronov. *Sb. nauchnikh trudov DonNTU. Seriya: Metallurgiya*, 17 – 24
3. Kharchenko, A. V., Ponomarenko, A. G., Khrapko, S. A., & Inozemtseva, Ye. N. (1991). Razrabotka informatsionno-tehnologicheskoi sistemi «FORWARD» dlya upravleniya metallurgicheskimi protsessami v realnom masshtabe vremeni. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya*, (12), 89 – 91
4. Kharchenko, A. V., Kovalev, V. L., Lichkonenko, N. V., & Lyashenko, R. P. (2019). Uovershenstvovanie sistemi kontrolya staleplavilnogo proizvodstva «Master». *Zbirnik naukovikh prats "Metallurgiya"*, 2, 11–15
5. Kharchenko, A. V. (2015). Optimizatsiya protsesa raskisleniya stali s primeneniem apparatno - programmno kompleksa «Master». *Zbirnik naukovikh prats "Metallurgiya"*, 1, 18–21
6. Sinyakov, R. V. (2011). Razrabotka tekhnologii viplavki i vnepechnoi obrabotki stali s ispolzovaniem programmno kompleksa «DesigningMelt». *Sovremennaya elektrometallurgiya*, 2, 34–37
7. Kharchenko, A. V., Lichkonenko, N. V., & Moseiko, Yu. V. (2013). Vozmozhnosti i perspektivi ispolzovaniya programmi «Excalibur» v uchebnom protsesse. *Zb. naukovikh prats ZDIA. Metallurgiya*, 1, 169–175
8. Kharchenko, A. V., Sinyakov, R. V., & Lichkonenko, N. V. (2017). Primenenie metoda khimicheskikh potentsialov Gibbsa v chernoi metallurgii. *Zbirnik naukovikh prats «Metallurgiya»*, 2, 20–25
9. Kharchenko, O. V. (2021). Dyferentsialni koefitsiienty zasvoiennia v kompiuternykh systemakh proiektuvannia i upravlinnia plavkoiu stali. *Metal ta lyttia Ukrainy*, (2), 30-37
10. Togobitskaia, D. N., Shaper, M., Gridin, O., & Snigura, I. R. (2018). Kompiuternoie modelirovanie temperatur plavlennia i kristallizatsii splavov spetsialnogo naznacheniia. *Stal*, (6), 11 – 15
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>
12. Sundman, B., Kattner, U. R., Palumbo, M. et al. (2015). OpenCalphad - a free thermodynamic software. *Integr Mater Manuf Innov.*, 4, 1–15 <https://doi.org/10.1186/s40192-014-0029-1>
13. Chattopadhyay, S. (1994). Computer Applications and Simulations in Ferroalloy Production. In: *4th Refresher Course on Ferro Alloys*, January 12-14, 1994, Jamedepur
14. Prikhodko, E. V. (1995). *Effektivnost kompleksnogo legirovaniia stalei i splavov*. Naukova dumka. 1995. 292s.
15. Prikhodko, E. V. (1986). O fiziko-khimicheskoi modeli struktury metallicheskih rasplavov. *Izv. AN SSSR Metally*, (4), 20 – 26
16. Prikhodko, E. V. (1995). *Metallokhimiia mnogokomponentnykh system*. Metallurgiiia.
17. Togobitska, D. and Belkova, A. (2024). New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the «Metal-Slag» system based on

interatomic interaction parameters. *Lithuanian Journal of Physics*, 64(1), 58-71.
<https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>

18. Togobitskaia, D. N., Piptiuk, V. P., Petrov, A. F., Grekov, S. V., Snigura, I. R., Likhachev, Iu. M., & Golovko, L. A. (2017). Bazy danykh i modeli dlia ekspertnoi otsenki effektivnosti ispolzovaniia ferrosplavov pri proizvodstve stali. *Fundamentalnye i prikladnye problemy chernoii metallurgii*, 31, 150 – 165

19. Tohobytska, D. M., Stepanenko, D. O., Bielkova, A. I., Petrov, A. P., & Likhachev, Yu. M. (2021). Bank danykh «Metalurhii» – informatsiina osnova prohnozuvannia vlastyvoستي fizyko-khimichnykh system ta yikh rozplaviv. *Suchasni problemy metalurhii*, 24, 140 – 148

D. M. Togobytska¹, D. Sc. (Tech.), Professor, ORCID 0000-0001-6413-4823

I. R. Povorotnia¹, Ph. D. (Tech.), Researcher, ORCID 0000-0001-5872-7403

V.P. Pipyuk¹, Ph. D. (Tech.), Senior Researcher, ORCID 0000-0002-2915-1756

O. V. Kuksa¹, Ph. D. (Tech.), Researcher, ORCID 0000-0002-6268-0692

¹ *Iron and Steel Institute of Z. I. Nekrasov National Academy of Sciences of Ukraine*

COMPREHENSIVE ASSESSMENT OF THE PROPERTIES OF ADDITIVES AS A NECESSARY COMPONENT OF THE INTELLIGENT DECISION- MAKING SYSTEM IN THE PROOFING OF STEEL AT THE LADLE- FURNACE INSTALLATION

Abstract. The information basis for theoretical and applied metallurgy in developing solutions aimed at improving existing and developing fundamentally new technological schemes for the manufacture of high-quality metal products are problem-oriented programs, which should be based on a reliable database and models. Analysis of modern specialized computer programs indicates a significant lack of such models for multi-component melts, which are the main participants in metallurgical processes - metal, slag, additives. The main task of the work is to create a set of basic models for predicting the primary physicochemical and thermophysical properties of metal melts in order to directionally form high-quality metal and increase its competitiveness. The original concept of directional chemical bonding was chosen as the basis for modeling, the core of which is the consideration of metal melts as chemically unified systems, rather than a mechanical mixture of constituent elements and taking into account the contribution of all components, even in small concentrations. The work uses an important information component, which is a database on the properties of metallurgical melts, which is continuously updated with modern data and contains the results of our own and industrial experimental research and literature search (articles, patents, inventions, scientific developments, monographs). The significance of databases is undeniable and requires their introduction to the interdisciplinary and interuniversity level with open access, as a separate instance to promote the development of the scientific level and capabilities of scientists. Adequate mathematical models have been developed based on the integral parameters of interatomic interaction, which ensured high accuracy of the operational forecast ($R^2 \geq 0.9$). The results of the research are recommended for use in scientific research and industrial conditions for the purpose of directed

formation of the composition and properties of smelting products, as well as reducing energy costs, reducing defects by making operational technological decisions by integrating the developed models into automated scientific research systems and automated control systems for the technological process of steelmaking.

Key words: metal, additives, ferroalloys, parameters of interatomic interaction, modeling, physicochemical properties, thermophysical properties, ladle furnace (LF) installation

For citation: Togobytska, D. M., Povorotnia, I. R., Piptyuk, V.P., & Kuksa, O. V. (2024). Comprehensive assessment of the properties of additives as a necessary component of the intelligent decision-making system in the proofing of steel at the ladle-furnace installation. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 38, 292-307. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2024-38-292-307>

*Стаття надійшла до редакції збірника 25.10.2024 р.
Рекомендовано до друку редколегією збірника (Протокол № 12 від 19.12.2024 р.)*