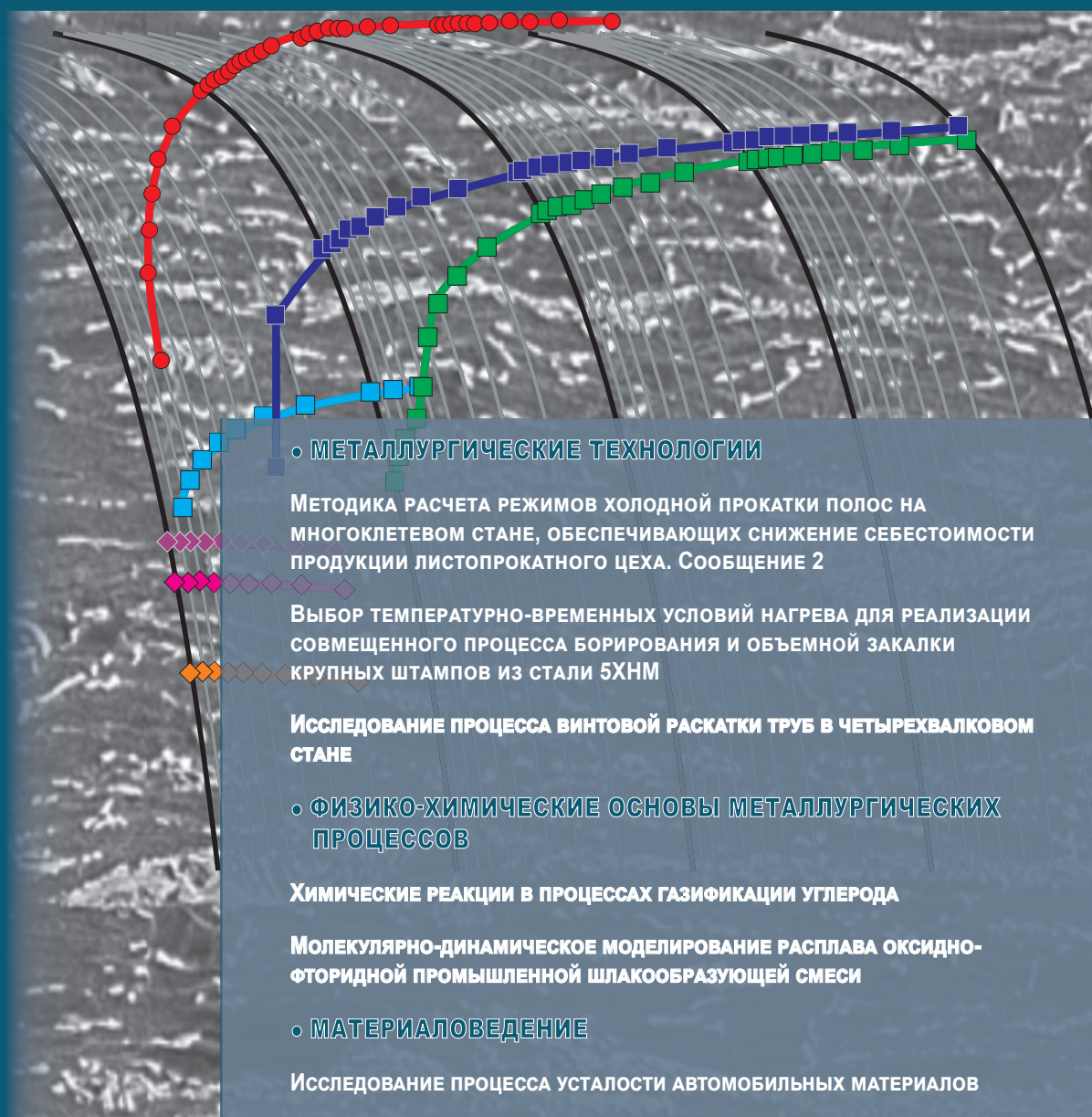


ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Том 62 Номер 9 2019



• МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Методика расчета режимов холодной прокатки полос на многоклетевом стане, обеспечивающих снижение себестоимости продукции листопрокатного цеха. Сообщение 2

Выбор температурно-временных условий нагрева для реализации совмещенного процесса борирования и объемной закалки крупных штампов из стали 5ХНМ

Исследование процесса винтовой раскатки труб в четырехвалковом стане

• ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Химические реакции в процессах газификации углерода

Молекулярно-динамическое моделирование расплава оксидно-фторидной промышленной шлакообразующей смеси

• МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

Исследование процесса усталости автомобильных материалов



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

№ 9, 2019

Издается с января 1958 г. ежемесячно

Том 62

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Главный редактор: ЛЕОНТЬЕВ Л.И.
(Российская Академия Наук, г. Москва)

Заместитель главного редактора: ПРОТОПОПОВ Е.В.
(Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

Члены редакционной коллегии:

АЛЕШИН Н.П. (Российская Академия Наук, г. Москва)

АСТАХОВ М.В. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

АШИХМИН Г.В. (ОАО «Институт Цветмет-обработка», г. Москва)

БАЙСАНОВ С.О. (Химико-металлургический институт им. Ж.Абишева, г. Караганда, Республика Казахстан)

БЕЛОВ В.Д. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

БРОДОВ А.А., редактор раздела «**Экономическая эффективность металлургического производства**» (ФГУП «ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина», г. Москва)

ВОЛЫНКИНА Е.П. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

ГЛЕЗЕР А.М. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ГОРБАТЮК С.М. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ГРИГОРОВИЧ К.В., редактор раздела «**Металлургические технологии**» (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)

ГРОМОВ В.Е. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

ДМИТРИЕВ А.Н. (Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург)

ДУБ А.В. (ЗАО «Наука и инновации», г. Москва)

ЗИНГЕР Р.Ф. (Институт Фридриха-Александра, Германия)

ЗИНИГРАД М. (Институт Ариэля, Израиль)

ЗОЛОТУХИН В.И. (Тульский государственный университет, г. Тула)

КОЛМАКОВ А.Г. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)

КОЛОКОЛЬЦЕВ В.М. (Магнитогорский государственный технический университет, г. Магнитогорск)

КОСТИНА М.В. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)

КОСЫРЕВ К.Л. (АО «НПО «ЦНИИТМаш», г. Москва)

КУРГАНОВА Ю.А. (МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва)

КУРНОСОВ В.В. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ЛАЗУТКИН С.С. (ГК «МетПром», г. Москва)

ЛИНН Х. (ООО «Линн Хай Терм», Германия)

ЛЫСАК В.И. (Волгоградский государственный технический университет, г. Волгоград)

МЫШЛЯЕВ Л.П. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

НИКУЛИН С.А. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ОСТРОВСКИЙ О.И. (Университет Нового Южного Уэльса, Сидней, Австралия)

ПОДГОРОДЕЦКИЙ Г.С., редактор раздела «**Ресурсосбережение в черной металлургии**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ПЫШМИНЦЕВ И.Ю., редактор раздела «**Инновации в металлургическом промышленном и лабораторном оборудовании, технологиях и материалах**» (Российский научно-исследовательский институт трубной промышленности, г. Челябинск)

РАШЕВ Ц.В., редактор раздела «**Стали особого назначения**» (Академия наук Болгарии, Болгария)

РУДСКОЙ А.И. (Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)

СИВАК Б.А. (АО АХК «ВНИИМЕТМАШ», г. Москва)

СИМОНЯН Л.М., редактор раздела «**Экология и рациональное природопользование**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

СМИРНОВ Л.А. (ОАО «Уральский институт металлов», г. Екатеринбург)

СОЛОДОВ С.В., редактор раздела

«**Информационные технологии и автоматизация в черной металлургии**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

СПИРИН Н.А. (Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)

ТАНГ ГУОИ (Институт перспективных материалов университета Циньхуа, г. Шеньжень, Китай)

ТЕМЛЯНЦЕВ М.В. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

ФИЛОНОВ М.Р., редактор раздела «**Материаловедение**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

ШЕШУКОВ О.Ю. (Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)

ШПАЙДЕЛЬ М.О. (Швейцарская академия материаловедения, Швейцария)

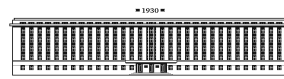
ЮРЬЕВ А.Б. (АО «ЕВРАЗ ЗСМК», г. Новокузнецк)

ЮСУПОВ В.С. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)

Учредители:



Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»



Сибирский государственный индустриальный университет

Настоящий номер журнала подготовлен к печати
Национальным исследовательским технологическим университетом «МИСиС»

Адреса редакции:

119991, Москва, Ленинский пр-т, д. 4
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Тел.: (495) 638-44-11, (499) 236-14-27
E-mail: fermet.misis@mail.ru, ferrous@misiss.ru
www.fermet.misis.ru

654007, Новокузнецк, 7,
Кемеровской обл., ул. Кирова, д. 42
Сибирский государственный индустриальный университет,
Тел.: (3843) 74-86-28
E-mail: redjizvz@sibsiu.ru

Журнал «Известия ВУЗов. Черная металлургия» по решению ВАК входит в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук».

Журнал «Известия ВУЗов. Черная металлургия» индексируется в международной базе данных Scopus.

Журнал «Известия ВУЗов. Черная металлургия» зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи и массовых коммуникаций ПИ № ФС77-35456

IZVESTIYA

VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA

IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY

Editor-in-Chief: LEONT'EV L.I.
(Russian Academy of Sciences, Moscow)

Deputy Editor-in-Chief: PROTOPOPOV E.V.
(Siberian State Industrial University, Novokuznetsk)

Editorial Board:

N.P. ALESHIN (Russian Academy of Sciences, Moscow)

G.V. ASHIKHMIN (JSC "Institute
Tsvetmetobrabotka", Moscow)

M.V. ASTAKHOV (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

S.O. BAISANOV (Abishev Chemical-Metallurgical
Institute, Karaganda, Republic of Kazakhstan)

V.D. BELOV (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

A.A. BRODOV, Editor of the section "**Economic
efficiency of metallurgical production**" (IP Bardin
Central Research Institute for Ferrous Metallurgy,
Moscow)

A.N. DMITRIEV (Institute of Metallurgy, Ural
Branch of the Russian Academy of Sciences, Ural Federal
University, Ekaterinburg)

A.V. DUB (JSC "Science and Innovations", Moscow)

M.R. FILONOV, Editor of the section "**Material
science**" (National Research Technological University
"MISIS", Moscow)

A.M. GLEZER (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

S.M. GORBATYUK (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

K.V. GRIGOROVICH, Editor of the section "**Metallur-
gical Technologies**" (Baikov Institute of Metallurgy and
Materials Science of RAS, Moscow)

V.E. GROMOV (Siberian State Industrial University,
Novokuznetsk)

A.G. KOLMAKOV (Baikov Institute of Metallurgy and
Materials Science of RAS, Moscow)

V.M. KOLOKOL'TSEV (Magnitogorsk State Technical
University, Magnitogorsk)

M.V. KOSTINA (Baikov Institute of Metallurgy and
Materials Science of RAS, Moscow)

K.L. KOSYREV (JSC "NPO "TSNIITMash", Moscow)

YU.A. KURGANOVA (Bauman Moscow State
Technical University, Moscow)

V.V. KURNOSOV (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

S.S. LAZUTKIN (Group of Companies "MetProm",
Moscow)

H. LINN (Linn High Therm GmbH, Hirschbach,
Germany)

V.I. LYSAK (Volgograd State Technical University,
Volgograd)

L.P. MYSHLYAEV (Siberian State Industrial
University, Novokuznetsk)

S.A. NIKULIN (National Research Technological
University "MISIS", Moscow)

O.I. OSTROVSKI (University of New South Wales,
Sydney, Australia)

G.S. PODGORODETSKII, Editor of the section
"**Resources Saving in Ferrous Metallurgy**" (National
Research Technological University "MISIS", Moscow)

I.YU. PYSHMINTSEV, Editor of the section
"**Innovations in metallurgical industrial and
laboratory equipment, technologies and materials**"
(Russian Research Institute of the Pipe Industry,
Chelyabinsk)

TS.V. RASHEV, Editor of the section "**Superduty steel**"
(Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria)

A.I. RUDSKOI (Peter the Great Saint-Petersburg
Polytechnic University, Saint-Petersburg)

O.YU. SHESHUKOV (Ural Federal University,
Ekaterinburg)

L.M. SIMONYAN, Editor of the section "**Ecology
Rational Use of Natural Resources**" (National Research
Technological University "MISIS", Moscow)

R.F. SINGER (Friedrich-Alexander University,
Germany)

B.A. SIVAK (VNIIMETMASH Holding Company,
Moscow)

L.A. SMIRNOV (OJSC "Ural Institute of Metals",
Ekaterinburg)

S.V. SOLODOV, Editor of the section "**Information
Technologies and Automatic Control in Ferrous
Metallurgy**" (National Research Technological University
"MISIS", Moscow)

M. SPEIDEL (Swiss Academy of Materials, Switzerland)

N.A. SPIRIN (Ural Federal University, Ekaterinburg)

TANG GUOI (Institute of Advanced Materials of
Tsinghua University, Shenzhen, China)

M.V. TEMLYANTSEV (Siberian State Industrial
University, Novokuznetsk)

E.P. VOLYNKINA (Siberian State Industrial
University, Novokuznetsk)

A.B. YUR'EV (OJSC "ZSMK", Novokuznetsk)

V.S. YUSUPOV (Baikov Institute of Metallurgy and
Materials Science of RAS, Moscow)

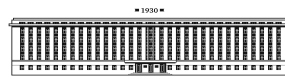
M. ZINIGRAD (Ariel University, Israel)

V.I. ZOLOTUKHIN (Tula State University, Tula)

Founders:



National Research Technological University "MISIS"



Siberian State Industrial University

This issue of the journal was prepared by
National Research Technological University "MISIS"

Editorial Addresses:

119991, Moscow, Leninskii prosp., 4
National Research Technological University "MISIS",
Tel.: +7 (495) 638-44-11, +7 (499) 236-14-27
E-mail: fermet.misis@mail.ru, ferrous@misiss.ru
www.fermet.misis.ru

654007, Novokuznetsk, Kemerovo region,
Kirova str., 42
Siberian State Industrial University,
Tel.: +7 (3843) 74-86-28
E-mail: redjizvz@sibsiu.ru

Journal "Izvestiya VUZov. Chernaya Metallurgiya = Izvestiya. Ferrous metallurgy" is included in the "List of the leading peer-reviewed scientific journals and publications, in which should be published major scientific results of dissertations for the degree of doctor and candidate of sciences" by the decision of the Higher Attestation Commission.

The journal "Izvestiya VUZov. Chernaya Metallurgiya = Izvestiya. Ferrous metallurgy" is indexed in Scopus.

Journal "Izvestiya VUZov. Chernaya Metallurgiya = Izvestiya. Ferrous metallurgy" is registered
in Federal Service for Supervision in the Sphere of Mass Communications **PI number FS77-35456**

СОДЕРЖАНИЕ

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

- Божков А.И., Ковалев Д.А., Потапов В.С., Шульгин Р.И.** Методика расчета режимов холодной прокатки полос на многоклетевом стане, обеспечивающих снижение себестоимости продукции листопрокатного цеха. Сообщение 2 667
- Зайдес С.А., Лэ Хонг Куанг.** Правка маложестких цилиндрических деталей. Часть 2. Напряженное состояние цилиндрических заготовок при поперечной обкатке плоскими плитами 674
- Минков К.А., Минков А.Н., Хлыбов А.А.** Выбор температурно-временных условий нагрева для реализации совмещенного процесса борирования и объемной закалки крупных штампов из стали 5ХНМ 681
- Романцев Б.А., Харитонов Е.А., Будников А.С., Ле Ван Чонг, Чан Ба Хюи.** Исследование процесса винтовой раскатки труб в четырехвалковом стане 686
- Харитонов В.А., Иванцов А.Б., Лаптева Т.А.** Закономерности распределения деформации проволок в многослойной пряжи при круговом калибрующем обжатии 691

РЕСУРСОБЕРЕЖЕНИЕ В ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

- Клименко А.В., Агабабов В.С., Корягин А.В., Петин С.Н., Борисова П.Н.** Использование детандер-генераторного агрегата на ТЭЦ металлургического комбината для производства электроэнергии и повышения эффективности работы компрессорной установки 698

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- Бердников В.И., Гудим Ю.А.** Химические реакции в процессах газификации углерода 705
- Большов Л.А., Корнейчук С.К.** Значения термодинамических параметров взаимодействия в малоконцентрированных жидких бинарных сплавах 713
- Гельчинский Б.Р., Дюльдина Э.В., Леонтьев Л.И.** Молекулярно-динамическое моделирование расплава оксидно-фторидной промышленной шлакообразующей смеси 719
- Маркидонов А.В., Лубяной Д.А., Коваленко В.В., Старостенков М.Д.** Расчет термодинамических характеристик системы Fe–P методом молекулярной динамики 725

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

- Пачурин Г.В., Гончарова Д.А., Филиппов А.А., Нуждина Т.В., Деев В.Б.** Исследование процесса усталости автомобильных материалов 732
- К 100-летию Бориса Петровича Бельгольского** 739

CONTENTS

METALLURGICAL TECHNOLOGIES

- A.I. Bozhkov, D.A. Kovalev, V.S. Potapov, R.I. Shul'gin** Method for calculation the modes of strips cold rolling on multiple-stand rolling mill ensuring cost reduction of sheet rolling shop production. Report 2. An example of the method practical use on four-stand rolling mill 1400 667
- S.A. Zaides, Kuang Le Khong** Straightening of low-rigid cylindrical details. Part 2. Stressed state of cylindrical billets at transverse cheeing by flat plates 674
- K.A. Minkov, A.N. Minkov, A.A. Khlybov** Choice of temperature and time conditions of heating for the combined process of borating and volume training of large stamps of 5KhNM steel 681
- B.A. Romantsev, E.A. Kharitonov, A.S. Budnikov, Le Van Chong, Chan Ba Khyui** Screw rolling of pipes in a four-high rolling mill .. 686
- V.A. Kharitonov, A.B. Ivantsov, T.A. Lapteva** Regularities of distribution of wire deformation in multilayered strand at circular calibration compression 691

RESOURCE SAVING IN FERROUS METALLURGY

- A.V. Klimenko, V.S. Agababov, A.V. Koryagin, S.N. Petin, P.N. Borisova** Use of expander-generator unit at CHP of metallurgical plant for producing electric power and increasing efficiency of compressor 698

PHYSICO-CHEMICAL BASICS OF METALLURGICAL PROCESSES

- V.I. Berdnikov, Yu.A. Gudim** Chemical reactions in processes of carbon gasification 705
- L.A. Bol'shov, S.K. Korneichuk** Thermodynamic interaction coefficients in low-concentrated liquid binary alloys 713
- B.R. Gel'chinskii, E.V. Dyul'dina, L.I. Leont'ev** Molecular dynamic simulation of the melt of oxide-fluoride industrial slag-forming mixture 719
- A.V. Markidonov, D.A. Lubyanoi, V.V. Kovalenko, M.D.** Calculation of the thermodynamic characteristics of Fe–P system by method of molecular dynamics 725

MATERIAL SCIENCE

- G.V. Pachurin, D.A. Goncharova, A.A. Filippov, T.V. Nuzhdina, V.B. Deev** Fatigue process of automobile materials 732
- To the 100th Anniversary of Boris Petrovich Bel'gol'skii** 739

УДК 65.012.122:658.562:65.011.46

МЕТОДИКА РАСЧЕТА РЕЖИМОВ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ ПОЛОС НА МНОГОКЛЕТЕВОМ СТАНЕ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ СНИЖЕНИЕ СЕБЕСТОИМОСТИ ПРОДУКЦИИ ЛИСТОПРОКАТНОГО ЦЕХА. СООБЩЕНИЕ 2

Божков А.И.¹, к.т.н., профессор кафедры «Обработка металлов давлением» (bozhkov_51@mail.ru)

Ковалев Д.А.², начальник управления развития технологий

Потапов В.С.², инженер

Шульгин Р.И.², специалист отдела продаж

¹ Липецкий государственный технический университет
(398600, Россия, Липецк, ул. Московская, 30)

² ОАО «Новолипецкий металлургический комбинат»
(398040, Россия, Липецк, пл. Металлургов, 2)

Аннотация. Представлены результаты практического использования методики расчета режимов прокатки применительно к четырехклетевому стану 1400 холодной прокатки. При прокатке выбранных типоразмеров ставилась задача определения конкретного режима прокатки, который обеспечит минимум суммарного удельного расхода электроэнергии при максимальной скорости прокатки, максимальной стабилизации процесса (минимум обрывов, простоев и пр.) и получении заданного качества прокатанных полос (отсутствие дефектов поверхности, соответствие толщины и плоскостности требованиям регламента). Это достигалось включением вышеуказанных требований в систему ограничений применительно к определяемым режимам прокатки для выбранных типоразмеров полос. К примеру, обеспечение заданной (максимальной) производительности для конкретных размеров и марки полосы равносильно реализации заданной (повышенной) скорости прокатки при отсутствии внеплановых простоев, возникающих при аварийных ситуациях (в частности, при обрывах полосы). Ограничением скорости является мощность двигателей, которая включена в комплекс конструктивных и технологических ограничений. Полученные примеры, приведенные в статье, показали, что использование методики приводит к выполнению всех заданных требований, что, в свою очередь, обеспечивает снижение себестоимости продукции и повышение производительности стана. Расчет режимов холодной прокатки сводился к выбору и распределению обжатий по клетям (проходам – на реверсивном стане) и выбору удельных натяжений полосы в межклетевых промежутках, на разматывателе и моталке, а также в задании клина скоростей в конкретной системе ограничений, накладываемых на входные и выходные переменные процесса в функции принятого критерия оптимальности. Поставленная задача решалась с помощью метода условной оптимизации, через задание критерия оптимизации. В качестве критерия оптимизации использовался суммарный расход энергии, затрачиваемой на процесс прокатки, в качестве условий – технологические и конструктивные ограничения на параметры прокатки и устойчивость полос в отношении обрывов и образования дефектов поверхности валков («навары», «выкрошка» и др.), а также обрывов полосы.

Ключевые слова: стан 1400, эксперимент, проверка, себестоимость, продукция, холоднокатаная полоса, производительность, обжатие, натяжение, расход электроэнергии, скорость прокатки, режим прокатки.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-667-673

В первом сообщении приведено формализованное описание предлагаемой методики и алгоритм расчета оптимальных режимов прокатки на холодном стане. Адекватность предлагаемой методики рассмотрим на конкретном примере, выполненном в соответствии с алгоритмом решения задачи определения режима холодной прокатки полос заданного типоразмера на многоклетевом (реверсивном) стане [1, 2].

Пример расчета приведен для непрерывного четырехклетевого стана 1400 холодной прокатки. Расчетными профилями выбраны: типоразмер № 1 – 08Ю ($h_0 = 2$ мм, $h_k = 0,45$ мм, $B = 1270$ мм), скорость прокатки принята равной 12,5 м/с; типоразмер № 2 – ЭИС 3 группы легирования ($h_0 = 2,2$ мм, $h_k = 0,5$ мм, $B = 1000$ мм), скорость прокатки принята равной 11,5 м/с.

Пример № 1 (типоразмер № 1)

1. Суммарное обжатие:

$$\varepsilon_{\Sigma} = \frac{h_0 - h_k}{h_0} \cdot 100 \% = \frac{2 - 0,45}{2} \cdot 100 \% = 77,5 \%$$

2. Диапазоны изменения относительных обжатий [3]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1 \min} &= 25 \% ; \varepsilon_{1 \max} = 38 \% ; \varepsilon_{2 \min} = 34 \% ; \\ \varepsilon_{2 \max} &= 39 \% ; \varepsilon_{3 \min} = 27 \% ; \varepsilon_{3 \max} = 38 \% ; \\ \varepsilon_{4 \min} &= 16 \% ; \varepsilon_{4 \max} = 30 \% . \end{aligned}$$

3. Диапазоны изменения средних удельных натяжений по участкам [3]:

$$\begin{aligned}\sigma_{0 \min} &= 35 \text{ МПа}; \sigma_{0 \max} = 45 \text{ МПа}; \sigma_{1 \min} = 127,3 \text{ МПа}; \\ \sigma_{1 \max} &= 165,5 \text{ МПа}; \sigma_{2 \min} = 148,7 \text{ МПа}; \\ \sigma_{2 \max} &= 185,6 \text{ МПа}; \sigma_{3 \min} = 160 \text{ МПа}; \sigma_{3 \max} = 216 \text{ МПа}; \\ \sigma_{4 \min} &= 60 \text{ МПа}; \sigma_{4 \max} = 85 \text{ МПа}.\end{aligned}$$

4. Число поддиапазонов n_i в диапазонах изменения относительных обжатий $n_i = 10$ [4, 5].

5. Шаг Δ_{ε_i} изменения относительного обжатия в i -й клетки стана 1400:

$$\begin{aligned}\Delta_{\varepsilon_1} &= 1,3; \Delta_{\varepsilon_1} = 13; \Delta_{\varepsilon_2} = 0,5; \Delta_{\varepsilon_2} = 5; \\ \Delta_{\varepsilon_3} &= 1,1; \Delta_{\varepsilon_3} = 11; \Delta_{\varepsilon_4} = 1,4; \Delta_{\varepsilon_4} = 14.\end{aligned}$$

6. Границы поддиапазонов изменения относительного обжатия ε_i для каждой клетки стана представлены в табл. 1.

7. Число поддиапазонов в диапазонах изменения средних удельных натяжений на i -м участке полосы, расположенном в промежутках и на моталке: $m_i = 10$ [4, 5].

8. Шаг Δ_{σ_j} изменения среднего удельного натяжения на j -м участке полосы:

$$\begin{aligned}\Delta_{\sigma_1} &= 1,0; \Delta_{\sigma_1} = 10; \Delta_{\sigma_2} = 3,82; \Delta_{\sigma_2} = 38,2; \\ \Delta_{\sigma_3} &= 3,69; \Delta_{\sigma_3} = 36,9; \Delta_{\sigma_4} = 5,6; \Delta_{\sigma_4} = 56; \\ \Delta_{\sigma_5} &= 2,5; \Delta_{\sigma_5} = 25.\end{aligned}$$

9. Границы поддиапазонов изменения средних удельных натяжений σ_j на j -м участке полосы, расположенном в промежутках и на моталке представлены в табл. 2.

10. Число возможных альтернативных вариантов сочетаний поддиапазонов относительных обжатий и средних удельных натяжений [6]:

$$W = \prod_{i=1}^I n_i \prod_{j=0}^J m_j = (10^4)(10^5) = 10\,077\,696.$$

11. Соответствие распределения относительных обжатий по клетям суммарному относительному обжатию [7, 8]:

$$\begin{aligned}(1 - 0,775) &= (1 - 0,350)(1 - 0,350)(1 - 0,335) \times \\ &\times (1 - 0,200)0,225 = 0,225.\end{aligned}$$

12. Исключение из общего числа возможных вариантов W вариантов W' , не соответствующих условию:

$$W^* = W - W' = 10\,077\,696 - 9\,859\,898 = 217\,798.$$

13. Задание скорости прокатки в соответствии с условием, где для стана 1400 $V_{\max} = 13,5$ м/с [9, 10]:

$$V_I = 13,5 \text{ м/с} = V_{\max} = 13,5 \text{ м/с}.$$

14. Скорость полосы на выходе i -й клетки:

$$\begin{aligned}V_1 &= 4,67 \text{ м/с}; V_2 = 6,68 \text{ м/с}; \\ V_3 &= 10,3 \text{ м/с}; V_4 = 13,5 \text{ м/с}.\end{aligned}$$

15. Расчет среднего по длине очага деформации давления прокатки $P_{\text{ср}i}^*$ в каждой клетке стана для итогового принятого варианта режима прокатки [10, 11]:

Таблица 1

Границы поддиапазонов изменения относительного обжатия

Table 1. Boundaries of the sub-ranges of changes in percent reduction

i	$\varepsilon_{1i}, \%$	$\varepsilon_{2i}, \%$	$\varepsilon_{3i}, \%$	$\varepsilon_{4i}, \%$
min	25,0	34,0	27,0	16,0
1	26,3	34,5	28,1	17,4
2	27,6	35,0	29,2	18,8
3	28,9	35,5	30,3	20,2
4	30,2	36,0	31,4	21,6
5	31,5	36,5	32,5	23,0
6	32,8	37,0	33,6	24,4
7	34,1	37,5	34,7	25,8
8	35,4	38,0	35,8	27,2
9	36,7	38,5	36,9	28,6
max	38,0	39,0	38,0	30,0

Таблица 2

Границы поддиапазонов изменения средних удельных натяжений

Table 2. Boundaries of the sub-ranges of changes in mean specific tensions

i	$\sigma_{1i}, \text{ МПа}$	$\sigma_{2i}, \text{ МПа}$	$\sigma_{3i}, \text{ МПа}$	$\sigma_{4i}, \text{ МПа}$	$\sigma_{5i}, \text{ МПа}$
min	35	127,30	148,70	160,0	60,0
1	36	131,12	152,39	165,6	62,5
2	37	134,94	156,08	171,2	65,0
3	38	138,76	159,77	176,8	67,5
4	39	142,58	163,46	182,4	70,0
5	40	146,40	167,15	188,0	72,5
6	41	150,22	170,84	193,6	75,0
7	42	154,04	174,53	199,2	77,5
8	43	157,86	178,22	204,8	80,0
9	44	161,68	181,91	210,4	82,5
max	45	165,50	185,60	216,0	85,0

$$P_{ср1}^* = 421,76 \text{ МПа}; P_{ср2}^* = 625,8 \text{ МПа};$$

$$P_{ср3}^* = 658,6 \text{ МПа}; P_{ср4}^* = 665 \text{ МПа}.$$

16. Рассчитанные энергосиловые параметры прокатки P_i^* , M_i^* , N_i^* приведены в табл. 3.

По результатам проверки данных табл. 3 отметим, что полученные результаты не превышают заданных условиями допустимых значений, определяемых технологическими возможностями агрегата [10, 11].

17. Из массива рассчитанных значений $P_{срi}^*$ исключены значения, не удовлетворяющие заданным условиям:

– ограничение по мощности прокатки

$$N_i \leq N_{\text{доп}},$$

где N_i – мощность прокатки в i -й клетки, кВт; $N_{\text{доп}}$ – максимально допустимое значение мощности прокатки, кВт;

– ограничение по максимальному усилию прокатки

$$P_i \leq P_{\text{доп}},$$

где P_i – усилие прокатки в i -й клетки, Н; $P_{\text{доп}}$ – максимально допустимое значение усилия прокатки, Н;

– ограничение по максимальному моменту прокатки

$$M_i \leq M_{\text{доп}},$$

где M_i – момент прокатки в i -й клетки, кН·м; $M_{\text{доп}}$ – максимально допустимое значение момента прокатки, кН·м.

18. Объем металла Q_i для данного типоразмера составил:

$$Q_1 = h_1 B l_1 = 1,3 \cdot 1,27 \cdot 1,97 = 3,25 \text{ м}^3;$$

$$Q_2 = h_2 B l_2 = 0,91 \cdot 1,27 \cdot 2,81 = 3,25 \text{ м}^3;$$

$$Q_3 = h_3 B l_3 = 0,59 \cdot 1,27 \cdot 4,33 = 3,25 \text{ м}^3;$$

$$Q_4 = h_4 B l_4 = 0,45 \cdot 1,27 \cdot 5,68 = 3,25 \text{ м}^3.$$

Таблица 3

Рассчитанные энергосиловые параметры прокатки

Table 3. Calculated energy-power parameters of rolling

i	P_i , МН	$P_{\text{доп } i}$, МН	$M_{\text{дв } i}$, кН·м	$M_{\text{доп } i}$, кН·м	$N_{\text{дв } i}$, кВт	$N_{\text{доп } i}$, кВт
1	7,6	25	23,7	136,7	861,9	4978
2	8,1	25	40,9	93,4	2178,5	4978
3	8,7	25	48,8	83,9	2899,5	4978
4	6,2	25	51,7	80,9	3178,9	4978

Примечание: i – номер клетки; $P_{\text{доп}}$, $M_{\text{доп}}$, $N_{\text{доп}}$ – допустимые значения энергосиловых параметров прокатки.

19. Расчет $\ln\left(\frac{1}{1-\varepsilon_i}\right)$ для каждой клетки стана [12]:

$$\text{клеть № 1: } \ln\left(\frac{1}{1-0,35}\right) = 0,43;$$

$$\text{клеть № 2: } \ln\left(\frac{1}{1-0,3}\right) = 0,36;$$

$$\text{клеть № 3: } \ln\left(\frac{1}{1-0,35}\right) = 0,43;$$

$$\text{клеть № 4: } \ln\left(\frac{1}{1-0,2}\right) = 0,23.$$

20. Произведен расчет суммарного расхода энергии A_{Σ}^{**} для каждого реализуемого варианта, проведено сравнение рассчитанных величин и выбран режим прокатки, соответствующий минимальному расходу энергии. Результаты приведены в табл. 4.

21. Расчет эпюр удельных натяжений в каждом межклетевом промежутке для выбранного режима прокатки [13, 14]. Четвертая клеть оснащена системой автоматического регулирования плоскостности, работающей в автономном режиме, поэтому эпюру на выходе получают в зависимости от заданной в системе. Расчет произведен при установленных станочных профилировках рабочих валков и при усилии гидроизгиба, равном 0.

$$C_{21} = 55,7 \text{ МПа}; C_{22} = 60,7 \text{ МПа}; C_{23} = 69,7 \text{ МПа},$$

где C_2 – коэффициент параболической аппроксимации эпюры удельных натяжений с помощью второго полинома Лежандра [13, 14].

22. Задаем эпюру удельных натяжений, обеспечивающую стабильный процесс прокатки [13, 14].

$$C_{21} = 50 \text{ МПа}; C_{22} = -30 \text{ МПа}; C_{23} = -20 \text{ МПа}.$$

Таблица 4

Общие результаты расчета суммарного расхода энергии

Table 4. Overall results of the calculation of total energy consumption

i	h_i , мм	ε_i , %	σ_i , МПа	V_i , м/с	B , мм	$\varepsilon_{\text{сум}}$, %	$A_{\Sigma \text{min}}$, МДж
0	2,00	–	39	–	1270	77,5	110,46
1	1,30	35,0	164	4,67			
2	0,91	33,5	184	6,68			
3	0,59	35,0	216	10,3			
4	0,45	20,0	84	13,5			

За первой клетью увеличиваем удельное натяжение на кромках полос для обеспечения устойчивости полосы по линии прокатного стана (уменьшение вероятности поперечного смещения). Во втором и третьем промежутке стана удельные натяжения на кромках уменьшаем, тем самым снижаем вероятность обрывов полос из-за возможных концентраторов напряжений на кромках [13, 14].

23. Для получения заданных эпюр рассчитываем необходимое усилие гидроизгиба рабочих валков [13, 14]. Они соответственно равны

$$F_{r1} = 4 \% ; F_{r2} = 40 \% ; F_{r3} = 40 \% ,$$

где F_r – гидроизгиб рабочих валков, % от максимально допустимого значения (–100 % – максимально допустимый противоизгиб; +100 % – максимально допустимый дополнительный изгиб).

Таблица 5

Общие результаты расчета суммарного расхода энергии

Table 5. Overall results of the calculation of total energy consumption

i	h_i , мм	ε_i , %	σ_i , МПа	V_i , м/с	B , мм	$\varepsilon_{\text{сум}}$, %	$A_{\Sigma \text{min}}$, МДж
0	2,20	–	43	–	1000	77,3	193,3
1	1,45	34	189	4,7			
2	0,97	33	206	7,0			
3	0,65	33	226	10,4			
4	0,50	23	94	13,5			

Таблица 6

Режимы обжатий на стане 1400 для типоразмера № 1

Table 6. Crimping modes on the mill 1400 for typical size no. 1

Показатель	Номер клетки			
	1	2	3	4
Относительное обжатие, %:				
режим 1	33,60	32,30	33,00	18,54
режим 2	35,00	33,50	35,00	20,00
δ , %	4	4	6	8

Примечание: режим 1 – режим, выбранный из базы данных системы слежений за металлом (ССМ) для данного типоразмера при измеренном минимальном суммарном расходе электроэнергии; режим 2 – режим, рассчитанный по предлагаемой методике; δ – относительная погрешность значений режима 1 относительно режима 2 по клетям, %.

Пример № 2 (типоразмер № 2)

Все расчеты произведены по алгоритму, аналогичному алгоритму, использованному для расчета примера № 1. Результаты расчета приведены в табл. 5.

В табл. 6 – 9 и на рис. 1 – 4 представлены относительные обжатия по клетям и удельные натяжения по участкам стана 1400, полученные в результате расчета по аналитической методике для выбранных типоразмеров и замеренные значения из базы данных измерений режимов прокатки при фиксированном минимальном суммарном расходе электроэнергии.

Фактический расход электроэнергии ($R_{\text{эл}}$, кВт·ч/т) регистрировали с помощью приборов учета, установленных в каждой клетке стана 1400 [15].

Приведенные примеры подтвердили эффективность предлагаемой методики расчета режимов холодной прокатки. При реализации предлагаемого способа снижение суммарного удельного расхода электроэнергии

Таблица 7

Рассчитанный режим натяжений на стане 1400 для типоразмера № 1

Table 7. Calculated tension mode on the mill 1400 for typical size no. 1

Показатель	Участок				
	разматыватель	(1 – 2)	(2 – 3)	(3 – 4)	моталка
Удельное натяжение, МПа					
режим 1	40,0	153,7	181,3	216,0	81,3
режим 2	39,0	164,0	184,0	216,0	84,0
δ , %	3	7	1	0	3

Примечание: δ – относительная погрешность значений режима 1 относительно режима 2 по участкам, %.

Таблица 8

Режимы обжатий на стане 1400 для типоразмера № 2

Table 8. Crimping modes on mill 1400 for typical size no. 2

Показатель	Номер клетки			
	1	2	3	4
Относительное обжатие, %:				
режим 1	32,2	33,0	32,4	23,9
режим 2	34,0	33,0	33,0	23,0
δ , %	6	0	2	4

Примечание: δ – относительная погрешность значений режима 1 относительно режима 2 по клетям, %.

Таблица 9

**Рассчитанный режим натяжений на стане 1400
для типоразмера № 2**

**Table 9. Calculated tension mode on the mill 1400
for typical size no. 2**

Показатель	Участок				
	разматыватель	(1 – 2)	(2 – 3)	(3 – 4)	моталка
Удельное натяжение, МПа режим 1	42,8	180,6	193,9	220,6	95,3
режим 2	43,0	189,0	206,0	226,0	94,0
$\delta, \%$	0	5	6	2	1

Примечание: δ – относительная погрешность значений режима 1 относительно режима 2 по участкам, %.

для выбранных типоразмеров, по сравнению со средним суммарным удельным расходом электроэнергии, составило порядка 14 % (для типоразмера № 1) и 21 % (для типоразмера № 2). Повышение скорости, по сравнению со средней скоростью для выбранных типораз-

меров полос, составило порядка 15 % (для типоразмера № 1) и 18 % (для типоразмера № 3). Результаты для выбранных типоразмеров получены посредством сравнения рассчитанных по предложенной аналитической методике режимов с аналогичными режимами из базы данных измерений ССМ [16]. Доля влияния непрерывного четырехклетового стана 1400 на формирование себестоимости единицы (тонны) i -го вида продукции можно рассчитать по следующей формуле

$$C_{ij} = C_i^{\text{пер}} \left[C_i^{\text{эн}} \sum_{k=1}^K (C_j^{\text{К}} C_{ij}^{\text{К}}) + C_i^{\text{вс.м}} C_{ij}^{\text{вс.м}} + C_i^{\text{от.м}} C_{ij}^{\text{от.м}} \right] C_i, \quad (18)$$

где C_i – общая себестоимость заданной единицы i -го вида продукции (калькуляция), $i = 1 \dots I$ – количество видов продукции цеха; C_{ij} – доля (весовой коэффициент) в калькуляции i -го вида продукции j -го технологического агрегата цеха, $j = 1 \dots J$ – количество агрегатов цеха; $C_i^{\text{пер}}$ – весовой коэффициент технологического передела (листопрокатного цеха), $C_i^{\text{пер}} = 0,3$ [17]; $C_i^{\text{эн}}$ – весовой коэффициент энергозатрат в калькуляции, $C_i^{\text{эн}} \approx 0,28$ [17]; $C_i^{\text{К}}$ – весовой коэффициент отдельного вида энергозатрат, $k = 1 \dots K$ – количество выбранных для анализа видов энергозатрат [17]; $C_{ij}^{\text{К}}$ – весовой коэффициент доли j -го агрегата в формировании k -го вида

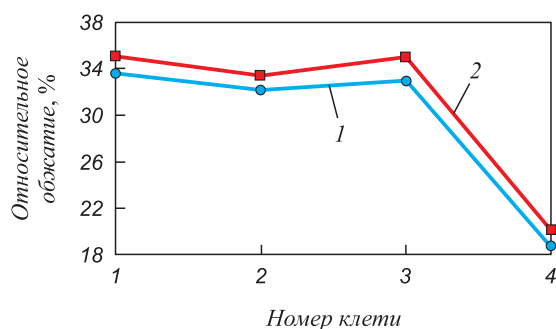


Рис. 1. Режимы обжатия на стане 1400 для типоразмера № 1:
1 – режим 1; 2 – режим 2

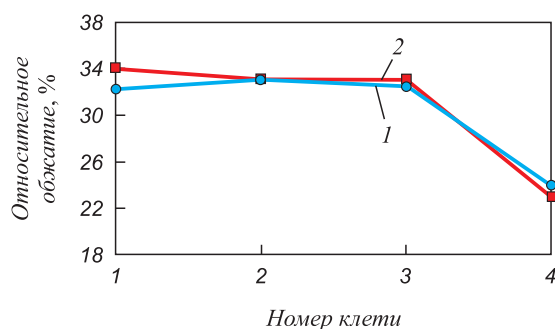


Рис. 3. Режимы обжатия на стане 1400 для типоразмера № 2:
1 – режим 1; 2 – режим 2

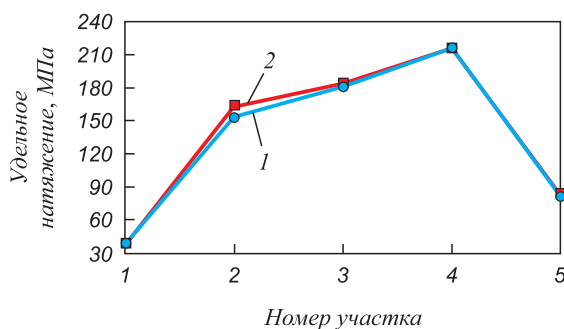


Рис. 2. Режимы натяжений на стане 1400 для типоразмера № 1:
1 – режим 1; 2 – режим 2

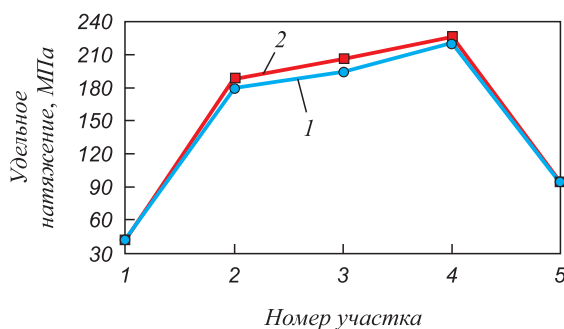


Рис. 4. Режимы натяжений на стане 1400 для типоразмера № 2:
1 – режим 1; 2 – режим 2

Fig. 2. Tension modes on the mill 1400 for typical size no. 1:
1 – mode 1; 2 – mode 2

Fig. 4. Tension modes on the mill 1400 for typical size no. 2:
1 – mode 1; 2 – mode 2

энергозатрат в калькуляции i -го вида продукции; $C_i^{bc.m}$ – весовой коэффициент статьи расходов вспомогательных материалов в формировании калькуляции i -го вида продукции; $C_{ij}^{bc.m}$ – весовой коэффициент влияния j -го агрегата на формирование статьи расходов вспомогательных материалов калькуляции i -го вида продукции; $C_i^{ot.m}$ – весовой коэффициент статьи отходы металла калькуляции i -го вида продукции; $C_{ij}^{ot.m}$ – весовой коэффициент влияния j -го технологического агрегата на формирование статьи отходы металла калькуляции i -го вида продукции листопркатного цеха [18 – 20].

Доля влияния стана 1400 на формирование себестоимости единицы i -го вида продукции (в качестве вида энергозатрат выбрана статья расхода электроэнергии) составила:

$$C_{i4} = 0,3 \cdot [0,28 \cdot (0,66 \cdot 0,202)] = 0,0112.$$

В результате выявлено снижение себестоимости продукции примерно на 0,16 % на тонну (для типоразмера № 1) и примерно на 0,24 % на тонну (для типоразмера № 2).

Выводы. Экспериментальная проверка методики показала ее эффективность и возможность использования на станах холодной прокатки. При этом обеспечивается снижение себестоимости продукции и повышение производительности стана.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Спиридонов А.А. Планирование эксперимента при исследовании технологических процессов. – М.: Машиностроение, 1981. – 184 с.
2. Львовский Е.Н. Статистические методы построения эмпирических формул: Учеб. пособие для вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1988. – 239 с.
3. Benporad A., Bernardini D., Cuzzola F.A. etc. Optimization-based automatic flatness control in cold tandem rolling // Journal of Process Control. 2010. No. 20. P. 396 – 407.
4. Божков А.И., Настич И.В., Чеглов А.Е., Елифанцев А.А. Принятие решений в многокритериальных задачах управления качеством тонколистового проката // Теория и практика производства проката: Сб. науч. тр. – Липецк: ЛГТУ, 2001. С. 377 – 393.
5. Василев Я.Д. Инженерные модели и алгоритмы расчета параметров холодной прокатки. – М.: Металлургия, 1995. – 368 с.
6. Подиновский В. В. Потенциальная оптимальность в многокритериальной оптимизации // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2014. Т. 54. № 3. С. 415 – 424.
7. Гарбер Э.А., Кожевникова И.А. Теория прокатки: Учебник для студентов вузов. – Череповец: ЧГУ; М.: Теплотехник, 2013. – 305 с.
8. Ehrgott M., Gandibleux X. Approximative solution methods for multiobjective combinatorial optimization // Top. 2004. Vol. 12. No. 1. P. 1 – 89.
9. Грудев А.П. Теория прокатки. – М.: Металлургия, 1988. – 240 с.
10. Коновалов Ю.В. Справочник прокатчика. Книга 2: Производство холоднокатаных листов и полос. – М.: Теплотехника, 2010. – 608 с.
11. Waleed I. Hameed, Khearia A. Mohamad. Strip thickness control of cold rolling mill with roll // Engineering. 2014. No. 6. P. 27 – 33.
12. Ginzburg V.B. Flat-rolled steel processes: Advanced technologies. – Boca Raton: CRC Press, 2009. – 372 p.
13. Божков А.И., Настич И.В. Плоскостность тонколистового проката. – М.: Интерметинжиниринг, 1998. – 264 с.
14. Abdelkhalik S., Montmitonnet P., Legrand N. etc. Coupled approach for flatness prediction in cold rolling of thin strip // International Journal of Mechanical Science. 2011. No. 53. P. 661 – 675.
15. Takami K.M., Mahmoudi J., Dahlquist E. Adaptive control of cold rolling system in electrical strips production system with online-offline predictors // Springer International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2010. Vol. 50. No. 9. P. 917 – 930.
16. Groover Mikell P. Fundamental of Modern Manufacturing. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2007. – 1025 p.
17. Божков А.И., Еремин Г.Н., Дегтев С.С., Ковалев Д.А. Научное обоснование и создание систем автоматизации управления качеством продукции листопркатных цехов предприятий черной металлургии. Сообщение 12. Подсистема анализа технико-экономических показателей работы листопркатного цеха // Производство проката. 2016. № 10. С. 39 – 43.
18. Jelali M. Performance assessment of control systems in rolling mills-application to strip thickness and flatness control // Journal of Process Control. 2007. No.17. P. 805 – 816.
19. Gad J. Analiza i ocena sytuacji finansowej przedsiębiorstwa // Ekonomia finanse prawo gospodarcze. Podręcznik dla sędziów i prokuratorów. – Łódź – Lublin: Uniwersytet Łódzki Wydział Zarządzania, 2015. P. 69 – 77.
20. Zakrzewska-Bielawska A. The strategic dilemmas of innovative enterprises: proposals for high-technology sectors // R&D Management. 2012. Vol. 42. No. 5. P. 514 – 514.

Поступила в редакцию 21 мая 2018 г.

После доработки 19 мая 2019 г.

Принята к публикации 28 июля 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 667–673.

METHOD FOR CALCULATION THE MODES OF STRIPS COLD ROLLING ON MULTIPLE-STAND ROLLING MILL ENSURING COST REDUCTION OF SHEET ROLLING SHOP PRODUCTION. REPORT 2. AN EXAMPLE OF THE METHOD PRACTICAL USE ON FOUR-STAND ROLLING MILL 1400

A.I. Bozhkov¹, D.A. Kovalev², V.S. Potapov², R.I. Shul'gin²

¹Lipetsk State Technical University, Lipetsk, Russia

²JSC “Novolipetsk Metallurgical Plant”, Lipetsk, Russia

Abstract. The second part of the paper describes the method practical use on four-stand rolling mill 1400. When rolling the chosen typical sizes, the task was to determine the specific rolling mode, which will ensure

a minimum of the total specific energy consumption at the maximum rolling speed, maximum process stabilization (minimum breaks, idle times, etc.) and obtaining the specified quality of the rolled strips (no surface defects, meeting the thickness and flatness requirements). It was achieved by including the above requirements in the constraint system with respect to the determined rolling modes for the selected strip sizes. For example, ensuring a given (maximum) performance for a specific size and brand of a strip is equivalent to realizing a gi-

ven (increased) rolling speed in the absence of unscheduled downtime occurring in emergency situations (in particular, in strip breaks). The speed limit depends on the power of engines, which is included in the complex of structural and technological limitations. The obtained examples, given in the article, have shown that the use of the method leads to fulfillment of all the specified requirements, which, in turn, ensures a reduction in production cost and an increase in the mill's productivity. The calculation of the cold rolling modes was reduced to selection and distribution of the crimping along the stands (passages – in the reversible mill) and to a choice of specific strip tension in the interstand spaces, on decoiler and coiler, and in setting the wedge of speeds in a particular system of constraints imposed on the input and output process variables as a function of the adopted optimality criterion. The task was solved using the conditional optimization method, through the specification of the optimization criterion. As such criterion, the total energy consumption of the rolling process was used, as requirements – technological and design constraints on the rolling parameters and conditions for strip stability to breaks and to formation of rolls surface defects (“brews”, “chippings”, etc.), as well as to strip breaks.

Keywords: mill 1400, experiment, check, cost, production, cold-rolled strip, productivity, reduction, tension, electricity consumption, rolling speed, rolling mode.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-667-673

REFERENCES

1. Spiridonov A.A. *Planirovanie eksperimenta pri issledovanii tekhnologicheskikh protsessov* [Planning an experiment at research of technological processes]. Moscow: Mashinostroyeniye, 1981, 184 p. (In Russ.).
2. L'vovskii E.N. *Statisticheskie metody postroyeniya empiricheskikh formul: Ucheb. posobie dlya vtuzov* [Statistical methods for constructing empirical formulas]. Moscow: Vyssh. shk., 1988, pp. 23–25. (In Russ.).
3. Benporad A., Bernardini D., Cuzzola F.A. etc. Optimization-based automatic flatness control in cold tandem rolling. *Journal of Process Control*. 2010, no. 20, pp. 396–407.
4. Bozhkov A.I., Nastich I.V., Cheglov A.E., Epifantsev A.A. Decision-making in multicriteria quality control tasks for thin-sheet metal. In: *Teoriya i praktika proizvodstva prokata: sb. tr.* [Theory and practice of rolled metal production: Coll. of sci. papers]. Lipetsk, LGTU, 2001, pp. 377–393. (In Russ.).
5. Vasilev Ya.D. *Inzhenernye modeli i algoritmy rascheta parametrov kholodnoi prokatki* [Engineering models and algorithms for calculating the parameters of cold rolling]. Moscow: Metallurgiya, 1995, 368 p. (In Russ.).
6. Podinovskii V.V. Potential optimality in multicriteria optimization. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*. 2014, vol. 54, no. 3, pp. 415–424. (In Russ.).
7. Garber E.A., Kozhevnikova I.A. *Teoriya prokatki: Ucheb. dlya studentov vuzov* [Theory of rolling: Textbook for universities]. Cherepovets: ChGU; Moscow: Teplotekhnika, 2013, 305 p. (In Russ.).
8. Ehrgott M., Gandibleux X. Approximative solution methods for multiobjective combinatorial optimization. *Top*. 2004, vol. 12, no. 1, pp. 1–89.
9. Grudev A.P. *Teoriya prokatki* [Theory of rolling]. Moscow: Metallurgiya, 1988, 240 p. (In Russ.).
10. Kononov Yu.V. *Spravochnik prokatchika. Kniga 2: Proizvodstvo kholodnokatanykh listov i polos* [Handbook of roller. Book 2: Production of cold-rolled sheets and strips]. Moscow: Teplotekhnika, 2010, 608 p. (In Russ.).
11. Waleed I. Hameed, Khearia A. Mohamad. Strip thickness control of cold rolling mill with roll. *Engineering*. 2014, no. 6, pp. 27–33.
12. Ginzburg V.B. *Flat-rolled steel processes: Advanced technologies*. Boca Raton: CRC Press, 2009, 372 p.
13. Bozhkov A.I., Nastich I.V. *Ploskostnost' tonkolistovogo prokata* [Flatness of sheet metal]. Moscow: Intermet inzhiniring, 1998, 264 p. (In Russ.).
14. Abdelkhalek S., Montmitonnet P., Legrand N. etc. Coupled approach for flatness prediction in cold rolling of thin strip. *International Journal of Mechanical Science*. 2011, no. 53, pp. 661–675.
15. Takami K.M., Mahmoudi J., Dahlquist E. Adaptive control of cold rolling system in electrical strips production system with online-offline predictors. *Springer International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. 2010, vol. 50, no. 9, pp. 917–930.
16. Groover Mikell P. *Fundamental of Modern Manufacturing*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007, 1025 p.
17. Bozhkov A.I., Eremin G.N., Degtev S.S., Kovalev D.A. Scientific substantiation and creation of automation systems for quality management of sheet rolling plants of ferrous metallurgy enterprises. Message 12. Subsystem for analysis of technical and economic performance of sheet rolling plant. *Proizvodstvo prokata*. 2016, no. 10, pp. 39–43. (In Russ.).
18. Jelali M. Performance assessment of control systems in rolling mills-application to strip thickness and flatness control. *Journal of Process Control*. 2007, no. 17, pp. 805–816.
19. Gad J. Analiza i ocena sytuacji finansowej przedsiębiorstwa. In: *Ekonomia finansów prawo gospodarcze. Podręcznik dla sędziów i prokuratorów*. Łódź – Lublin: Uniwersytet Łódzki Wydział Zarządzania, 2015, pp. 69–77. (In Polish).
20. Zakrzewska-Bielawska A. The strategic dilemmas of innovative enterprises: proposals for high-technology sectors. *R&D Management*. 2012, vol. 42, no. 5, pp. 514–514.

Information about the authors:

A.I. Bozhkov, Cand. Sci. (Eng.), Professor of the Chair “Metal Forming” (bozhkov_51@mail.ru)

D.A. Kovalev, Head of the Department of Technology Development

V.S. Potapov, Engineer

R.I. Shul'gin, Sales Office Assistant

Received May 21, 2018

Revised May 19, 2019

Accepted July 28, 2019

УДК 621.982.44

ПРАВКА МАЛОЖЕСТКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ДЕТАЛЕЙ. ЧАСТЬ 2. НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ЗАГОТОВОК ПРИ ПОПЕРЕЧНОЙ ОБКАТКЕ ПЛОСКИМИ ПЛИТАМИ

*Зайдес С.А., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой машиностроительных
технологий и материалов (zsa@istu.edu)*

*Куанг Лэ Хонг, аспирант кафедры машиностроительных технологий
и материалов (mybo91@gmail.com)*

Иркутский национальный исследовательский технический университет
(664074, Россия, Иркутск, ул. Лермонтова, 83)

Аннотация. Для восстановления формы искривленных маложестких цилиндрических деталей типа валов и осей предложена правка изгибом при воздействии распределенной нагрузки с последующим упрочнением заготовки способом поверхностного пластического деформирования, основанном на поперечной обкатке заготовки плоскими плитами. Известно, что после правки поперечным изгибом формируются неравновесные напряжения по всему объему заготовки и с течением времени форма детали может снова исказиться. Поэтому, после выполнения процесса правки изгибом, необходимо дополнительно упрочнять заготовки способом поверхностного пластического деформирования, основанном на поперечной обкатке заготовки плоскими плитами. Целью работы является определение условия захвата и напряженного состояния заготовки при поперечной обкатке цилиндрических деталей плоскими плитами. В работе использован математический аппарат и программный пакет Ansys Workbench. Новизной работы является новый способ управления напряженным состоянием при правке цилиндрических заготовок. В результате получено значение предельного угла захвата α , находящегося в диапазоне $2 - 8^\circ$ и максимальное значение абсолютного обжатия, зависящее от коэффициента трения и диаметра заготовки. Оптимальное значение абсолютного обжатия находится в диапазоне $\Delta H = 0,07 - 0,15$ мм. Результаты расчетов показали, что после поперечной обкатки в центре поперечного сечения заготовки имеет место напряженное состояние всестороннего растяжения, а в периферийных слоях заготовки формируется напряженное состояние сжатия. Способ упрочнения поперечной обкаткой плоскими плитами исключает образование трещин и разрушение материала в центральной области цилиндрических изделий.

Ключевые слова: правка, угол захвата, абсолютное обжатие, коэффициент трения, поперечная обкатка, остаточные напряжения, напряженное состояние.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-674-680

ВВЕДЕНИЕ

Постоянное стремление к повышению прочности конструкционных материалов позволяет создавать изделия с меньшей материалоемкостью [1 – 28]. В частности, среди деталей машин цилиндрической формы сформировался класс маложестких валов, изготовление которых на современном этапе развития техники и технологии представляет определенные трудности. Одной из таких проблем является обеспечение точности на этапах изготовления или ремонта деталей малой жесткости. Поэтому на всех стадиях технологического процесса при изготовлении нежестких деталей с отношением длины к диаметру более 10, в технологические процессы изготовления и сборки обычно включают несколько операций правки [1].

Способы холодной правки на прессах нашли достаточно широкое распространение в производственной практике. Однако они не всегда подходят, так как при этом сложно обеспечить прецизионную точность обработки и необходимое качество поверхностного слоя [1].

Основной недостаток известных способов правки заключается в формировании остаточных напряжений, которые неравномерно распределяются в объеме детали. Малейшие температурно-силовые изменения приводят к новой схеме уравнивания остаточных напряжений за счет искажения формы детали. Поэтому вопросы стабилизации напряженного состояния за счет выравнивания остаточных напряжений по длине заготовки являются актуальными.

Для решения вышеизложенных проблем авторами разработана новая кинематика процесса правки, позволяющая снижать неравномерность напряженного состояния в деталях машин, а также повышать производительность процесса правки. В качестве перспективного направления рассмотрена правка поперечным изгибом при воздействии распределенной нагрузки с последующим упрочнением заготовки способом поверхностного пластического деформирования (ППД), основанном на поперечной обкатке заготовки плоскими плитами [2].

В технологии обработки металлов давлением успешно применяют метод поперечной прокатки, кото-

рый используют для получения заготовок сложной формы, а также для профилообразования различных метизов [3 – 5]. Широкое применение поперечной прокатки объясняется как ее технологическими достоинствами, так и значительной эффективностью обработки [3]. По сравнению, например, со штамповкой, прокатка обеспечивает повышение производительности в 1,5 – 2 раза, уменьшение расхода металлопроката на 10 – 30 %, повышение точности, сокращение трудоемкости последующих операций, повышение стойкости инструмента (60 – 300 тыс. шт.) и значительное сокращение затрат на его изготовление [4].

Поэтому в качестве перспективного направления можно использовать способ поперечной обкатки как один из видов ППД. При разработке технологии поперечной прокатки были обнаружены в центральной зоне заготовки большие растягивающие напряжения [5], благодаря которым формируется зона с наличием трещин и повреждений. Для оценки возможности появления трещин в центральной области цилиндра при упрочнении поперечной обкаткой, необходимо рассчитать интенсивность остаточного напряжения в центральной области цилиндра. Результаты определения остаточных напряжений в деталях, упрочненных поверхностным пластическим деформированием, изложены в работах [6 – 10], а напряжения в очаге деформации при ППД представлены в исследованиях [7, 12].

В первой части настоящей работы [13] исследован процесс выправления цилиндрических заготовок поперечным изгибом. Во второй части продолжено исследование процесса поперечной обкаткой плоскими плитами. Целью данной работы является определение условия захвата заготовки и напряженного состояния цилиндрических деталей при поперечной обкатке плоскими плитами.

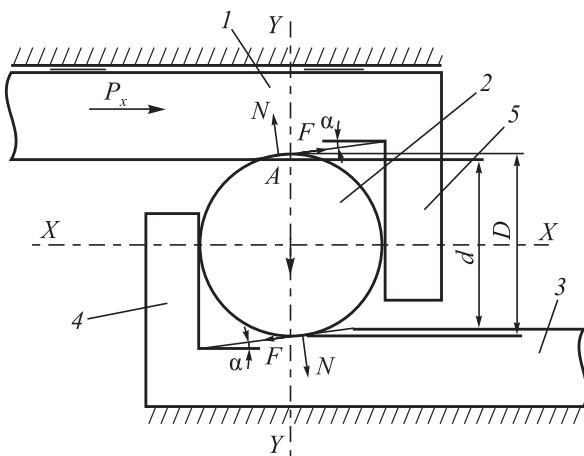


Рис. 1. Схема захвата заготовки плоскими плитами:
1 – подвижная плита; 2 – заготовка; 3 – неподвижная плита;
4 – упоры; 5 – выступ

Fig. 1. Scheme of gripping the billet by flat plates:
1 – movable plate; 2 – billet; 3 – fixed plate; 4 – stops; 5 – protrusion

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЯ ЗАХВАТА ЗАГОТОВКИ ПЛОСКИМИ ПЛИТАМИ

Для осуществления процесса обкатки заготовки плоскими плитами необходимо создать определенные условия. При этом следует отдельно рассматривать условия при неустановившемся процессе обкатки – для начального момента, когда заготовка только подводится к плитам (рис. 1) и при установившемся процессе, когда заготовка уже втянута в плиты (рис. 2).

Рассмотрим схему захвата заготовки плоскими плитами (см. рис. 1). В заходной части главным геометрическим параметром является угол подъема α .

При неустановившемся процессе обкатки в момент соприкосновения заготовки с плитами последние будут оказывать на нее действие в виде сил N , направленных нормально к поверхности валов в точках соприкосновения заготовки с плитами A , и сил трения F , направленных по касательной (см. рис. 1).

Для выявления действия указанных сил N и F на условия захвата заготовки плитами спроектируем их на горизонтальную ось XX (по направлению обкатки) и на вертикальную ось YY .

Для осуществления процесса обкатки (ось XX) горизонтальная сила F_x должно быть больше силы N_x , тогда имеем:

$$F \cos \alpha > N \sin \alpha; \mu N \cos \alpha > N \sin \alpha; \\ \operatorname{tg} \alpha < \mu; \alpha < \operatorname{arctg} \mu, \quad (1)$$

где μ – коэффициент трения между заготовкой и плитами.

Значение коэффициента трения для пары сталь – сталь при холодной обкатке находится в пределах от 0,03 до



Рис. 2. Схема усилий при поперечной обкатке плоскими плитами:
1 – подвижная плита; 2 – заготовка; 3 – неподвижная плита;
 r_k – радиус упругого ядра

Fig. 2. Scheme of forces at transverse cheeing by flat plates:
1 – movable plate; 2 – billet; 3 – fixed plate;
 r_k – radius of the elastic core

0,15 [14 – 17]. По формуле (1) получаем значение угла α , которое находится в диапазоне от 2 до 8°.

Далее рассмотрим схему поперечной обкатки плоскими плитками при установившемся процессе, когда заготовка уже втянута в пространство между плитками [18]. Как видно из рис. 2, направление движения верхней плиты перпендикулярно оси вращения обкатываемого цилиндрического тела. Расстояние между плитками меньше исходного диаметра цилиндра на величину абсолютного обжатия $2y$. К заготовке в направлении центральной оси приложены усилия, которые направлены нормально к контактной площадке. Равнодействующую этих усилий P будем считать приложенной в середине отрезка, соответствующего зоне контакта заготовки с плитками. Нормальные усилия вызывают появление на площадке контакта заготовки с плитками сил трения, равнодействующую которых обозначим через F . Силы трения F приложены в тех же точках, что и нормальные усилия P , и направлены по касательным к площадке контакта.

В работе [2] показано, что для осуществления процесса обкатки, когда заготовка уже втянута плитками, максимальное значение абсолютного обжатия ΔH рассчитывается по формуле

$$\Delta H = D - d - 2y = \frac{2\mu^2 D}{2\mu^2 + 1}, \quad (2)$$

где μ – коэффициент трения; D – диаметр заготовки.

Таким образом, получено значение предельного угла захвата α , находящегося в диапазоне 2 – 8°. Максимальное значение абсолютного обжатия зависит от коэффициента трения и диаметра заготовки. Для определения его оптимального значения выполним моделирование процесса правки поперечной обкаткой плоскими плитками.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРАВКИ ПОПЕРЕЧНОЙ ОБКАТКОЙ ПЛОСКИМИ ПЛИТКАМИ

Для определения напряженно-деформированного состояния в очаге деформации и остаточных напряжений в выправленных деталях построена конечно-элементная модель в виде цилиндра и двух плит в программе Ansys Workbench. Приняты следующие параметры моделирования: цилиндр диаметром 10 мм, длиной 200 мм с максимальным прогибом 0,5 мм, изготовленный из стали Ст45 (предел текучести $\sigma_T = 360$ МПа, модуль упругости $E = 2 \cdot 10^5$ МПа); рабочие плиты размером $5 \times 210 \times 210$ мм считаются абсолютно жесткими.

Параметры моделирования:

- конечно-элементная форма – гексаэдр, сгущение 7030 элемента, 30 620 узлов;
- коэффициент трения между заготовкой и плитками $\mu = 0,15$;

– граничные условия: жесткое фиксирование нижней плиты;

– по формуле (2), для заготовки диаметром $D = 10$ мм, максимальное значение абсолютного обжатия $\Delta H = 0,43$ мм.

Зависимость между исходным $f_{исх}$ и общим $f_{общ}$ прогибом можно представить в виде:

$$f_{общ} = \xi f_{исх},$$

где ξ – коэффициент изгиба.

Точное определение коэффициента изгиба для линейно упрочняющегося тела (например, круглого бруса, трубы и стального листа) крайне сложно [19 – 24]. Поэтому решим эту задачу с помощью программного пакета Ansys Workbench.

По результатам, изложенным в работе [13], получены предельные значения коэффициента изгиба от 5,3 до 5,5 для всех случаев жесткости вала при правке поперечным изгибом. Поэтому для выправления цилиндра с исходным прогибом 0,5 мм, общий прогиб будет равен 2,65 мм.

Режимы обработки: верхняя плита после касания с заготовкой перемещается вправо на 2,65 мм (на величину общего прогиба), далее происходит перемещение плиты в первоначальное положение и выправление заготовки. В работе использованы абсолютные обжатия величиной ΔH , равные: 0,05; 0,07; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3; 0,4 мм. Верхняя плита перемещается влево на 62,83 мм (заготовка поворачивается на 1 оборот) и перемещается вверх на 1 мм (разгрузка).

ДИНАМИКА НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ В ПРОЦЕССЕ ПРАВКИ

Интенсивность рабочих напряжений, возникающих в очаге деформации в процессе правки поперечной обкаткой плоскими плитками, показана на рис. 3 (при $\Delta H = 0,15$ мм). Процесс правки цилиндра поперечной обкаткой плоскими плитками можно разделить на пять этапов (рис. 3): А – правка поперечным изгибом; Б – разгрузка после правки изгибом; В – поперечное сжатие цилиндра; Г – поперечная обкатка за один оборот цилиндра; Д – разгрузка после поперечной обкатки.

При правке цилиндра поперечным изгибом рабочие напряжения монотонно увеличиваются до 380 МПа, достигая предела текучести, и вызывают пластическую деформацию. Затем происходит разгрузка, интенсивность остаточных напряжений составляет 200 МПа. Далее при поперечном сжатии цилиндра рабочие напряжения возрастают до 435 МПа. На этапе поперечной обкатки рабочие напряжения остаются постоянными, равными примерно 440 – 445 МПа. При окончательной разгрузке рабочие напряжения монотонно уменьшаются до уровня интенсивности остаточных напряжений,

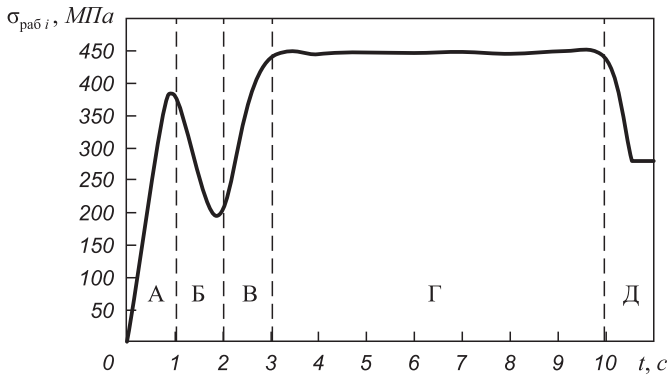


Рис. 3. Изменение интенсивности рабочих напряжений в процессе правки поперечной обкаткой плоскими плитами

Fig. 3. Change in intensity of the working stresses during straightening by transverse cheeing with flat plates

которые остаются в готовых деталях и составляют 279 МПа.

Зависимость интенсивности рабочих напряжений, возникающих при поперечной обкатке, от величины абсолютного обжатия ΔH показана на рис. 4.

В очаге деформации интенсивность рабочих напряжений интенсивно увеличивается при увеличении ΔH до 0,07 мм, достигая значения 410 МПа, а затем незначительно повышается при увеличении ΔH до 0,25 мм. При значении ΔH меньше 0,05 мм рабочие напряжения оказываются меньше предела текучести σ_T (360 МПа) и поэтому в данном случае ожидается только упругая деформация. При значении ΔH больше 0,25 мм, рабочие напряжения оказываются больше предела прочности σ_B (600 МПа) и поэтому при таких режимах обработки возможно разрушение материала.

На рис. 5 показаны некоторые результаты распределения интенсивности остаточных напряжений при раз-

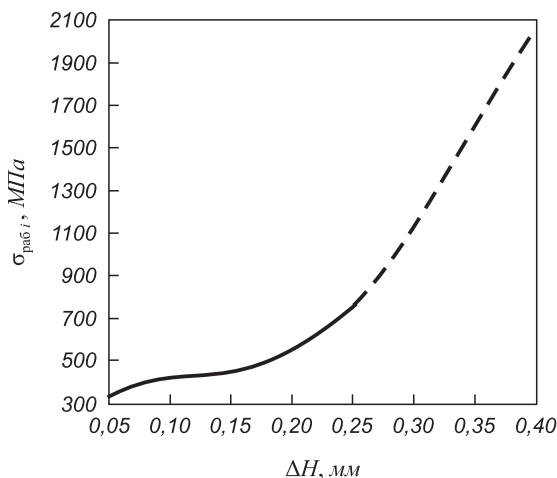


Рис. 4. Зависимость интенсивности рабочих напряжений от абсолютного обжатия

Fig. 4. Dependence of intensity of the working stresses on absolute compression

личных значениях абсолютных обжатий после правки поперечной обкаткой плоскими плитами.

Из рис. 5 видно, что при значении абсолютного обжатия меньше 0,05 мм, получаем неравномерную интенсивность остаточных напряжений после правки (рис. 5, а). При значении абсолютного обжатия, находящегося в диапазоне 0,07 – 0,20 мм, получено равномерное распределение напряжений. При значении обжатия больше 0,25 мм на поверхности заготовки происходит разрушение материала (рис. 5, е, ж, з). На рис. 5, д показано, что после правки интенсивность остаточных напряжений распределена равномерно, но максимальное значение превышает предел текучести материала, поэтому возможно разрушение материала. Таким образом, оптимальное значение абсолютного обжатия находится в диапазоне $\Delta H = 0,07 - 0,15$ мм.

ОСТАТОЧНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ ПОСЛЕ ПОПЕРЕЧНОЙ ОБКАТКИ ПЛОСКИМИ ПЛИТАМИ

Остаточные напряжения после обкатки цилиндрической заготовки рассчитаны аналитически с использованием законов деформирования упругопластического тела.

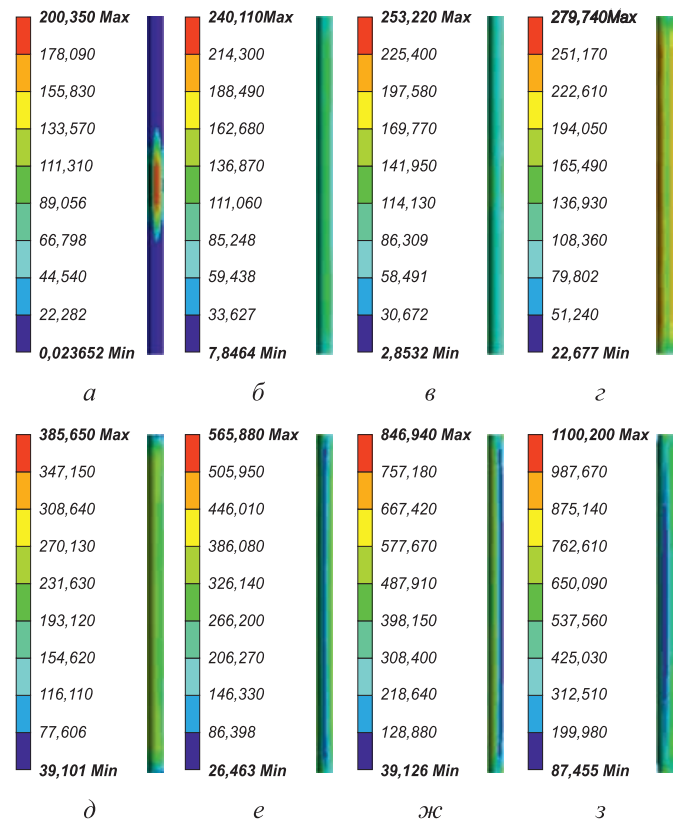


Рис. 5. Распределение интенсивности остаточных напряжений после правки поперечной обкаткой плоскими плитами при ΔH , мм: а – 0,05; б – 0,07; в – 0,1; г – 0,15; д – 0,2; е – 0,25; ж – 0,3; з – 0,4

Fig. 5. Intensity distribution of residual stresses after straightening by transverse cheeing with flat plates ΔH , mm: а – 0,05; б – 0,07; в – 0,1; г – 0,15; д – 0,2; е – 0,25; ж – 0,3; з – 0,4

Главные компоненты тензора остаточных напряжений в пластическом слое цилиндрического тела ($r_k < \rho \leq r$) можно рассчитать по формулам [18]:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_\rho}{K} &= \frac{2 \ln \frac{r}{\rho} - \left[\left(\frac{r_k}{\rho} \right)^2 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2 \right]}{2 \left[1 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2 \right]}, \\ \frac{\sigma_\theta}{K} &= \frac{2 \ln \frac{r}{\rho} - \left[2 - \left(\frac{r_k}{\rho} \right)^2 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2 \right]}{2 \left[1 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2 \right]}, \\ \frac{\sigma_z}{K} &= \eta \left[\frac{\ln \frac{r}{\rho}}{1 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2} - 1 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где $K = \frac{2\sigma_T}{\sqrt{3}}$ для случая энергетической теории предельного состояния; σ_T – предел текучести; σ_z , σ_ρ , σ_θ – соответственно осевые, радиальные и тангенциальные остаточные напряжения; r – радиус пластически деформируемой зоны; r_k – радиус упругого ядра; η – коэффициент Пуассона.

Остаточные напряжения в упругом ядре ($0 \leq \rho \leq r_k$) цилиндрического тела определяются по формулам [18]:

$$\frac{\sigma_\rho}{K} = \frac{\sigma_\theta}{K} = \frac{\ln \frac{r}{r_k}}{1 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2} - \frac{1}{2}; \quad \frac{\sigma_z}{K} = \eta \left[\frac{2 \ln \frac{r}{r_k}}{1 - \left(\frac{r_k}{r} \right)^2} - 1 \right]. \quad (4)$$

С помощью программы Ansys Workbench получены результаты расчетов остаточных напряжений после поперечной обкатки при величине абсолютного обжатия $\Delta H = 0,15$ мм (рис. 6). В результате расчетов установлено, что после поперечной обкатки плоскими плитами формируются равновесные остаточные напряжения как по длине, так и по поперечному сечению заготовки.

Из рис. 6 следует, что в центре поперечного сечения заготовки остаточные напряжения являются растягивающими. Наружные слои заготовки деформируются по толщине в большей мере, чем внутренние. За счет уменьшения толщины периметр наружных слоев стремится возрасти и, следовательно, они испытывают стремление к отрыву от сердцевины вала. Поэтому возникают растягивающие радиальные напряжения, максимальные в центре и равные нулю на периферии.

Для оценки опасности появления трещин в центральной области цилиндра при упрочнении поперечной обкаткой рассчитана интенсивность остаточного напря-

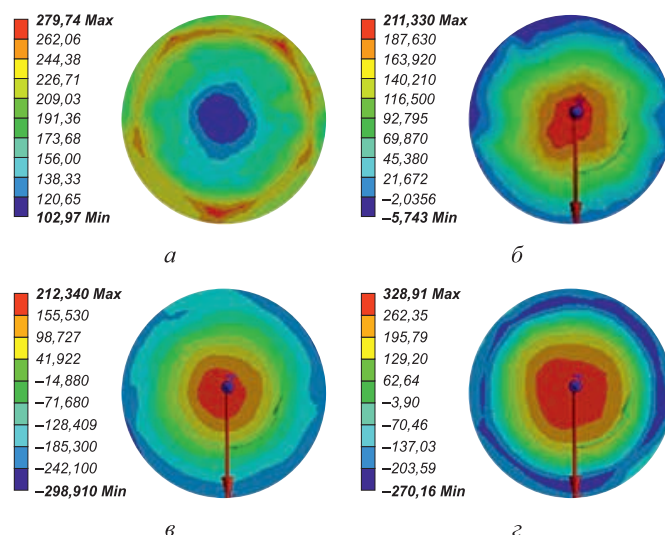


Рис. 6. Поля распределения остаточных напряжений по сечению заготовки после поперечной обкатки плоскими плитами: а – интенсивность остаточных напряжений; б – радиальные остаточные напряжения; в – тангенциальные остаточные напряжения; з – осевые остаточные напряжения

Fig. 6. Fields of residual stresses distribution over the billet's cross section after transverse cheising with flat plates: а – residual stresses intensity; б – radial residual stresses; в – tangential residual stresses; з – axial residual stresses

жения в центральной области цилиндра по формуле Губера-Мизеса [25 – 27]:

$$\sigma_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_\rho - \sigma_\theta)^2 + (\sigma_\theta - \sigma_z)^2 + (\sigma_\rho - \sigma_z)^2}. \quad (5)$$

По формулам (3), (4) и (5) интенсивность остаточных напряжений в центральной области цилиндра равна нулю (при коэффициенте Пуассона $\eta = 0,5$) или весьма мала (рис. 6, а), меньше, чем предел текучести материала ($\sigma_i = 102,97 = 0,29\sigma_T$) при коэффициенте Пуассона $\eta = 0,3$. Таким образом, способ упрочнения поперечной обкаткой плоскими плитами исключает образование трещин и разрушение материала в центральной области цилиндрических изделий.

Выводы

Предложена схема правки маложестких цилиндрических деталей поперечной обкаткой плоскими плитами. Получено значение предельного угла захвата α , находящегося в диапазоне $2 - 8^\circ$. Максимальное значение абсолютного обжатия зависит от коэффициента трения и диаметра заготовки, оптимальные значения абсолютных обжатий находятся в диапазоне $\Delta H = 0,07 - 0,15$ мм.

С помощью программного пакета Ansys Workbench определено напряженное состояние при правке поперечной обкаткой плоскими плитами. Результаты расчетов показали, что после поперечной обкатки в центре

поперечного сечения заготовки имеет место напряженное состояние всестороннего растяжения, а в поверхностных слоях заготовки формируется напряженное состояние сжатия.

В результате упрочнения поперечной обкаткой плоскими плитами, интенсивность остаточных напряжений в центральной области цилиндра весьма мала, меньше, чем предел текучести материала. Это исключает образование трещин и разрушение материала в центральной области цилиндрических изделий.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Avent R.R., Mukai D.J., Robinson P.F. Heat Straightening Rolled Shapes // *Journal of Structural Engineering*. 2000. Vol. 126. No. 7. P. 755 – 763.
2. Зайдес С.А., Куанг Л.Х. Аналитический расчет основных параметров процесса правки маложестких цилиндрических деталей поперечной обкаткой плоскими плитами // *Вестник ИргТУ*. 2018. Т. 22. № 3. С. 24 – 34.
3. Щукин В.Я. Основы поперечно-клиновой прокатки. – Минск: Наука и техника, 1986. – 223 с.
4. Клушин В.А., Рудович А.О. Технология и оборудование поперечно-клиновой прокатки. – Минск: ФТИ НАН Беларуси, 2010. – 300 с.
5. Томленов А.Д. Механика процессов обработки металлов давлением. – М.: Машгиз, 1963. – 235 с.
6. Zaides S.A., Hinh N.V. Influence of oscillatory smoothing on the residual stress in cylindrical components // *Russian Engineering Research*. 2018. Vol. 38. No. 11. P. 859 – 864.
7. Sobolevski E.G. Residual stress analysis of components with real geometries using the incremental hole-drilling technique and a differential evaluation method: Dr. diss. – Kassel: Kassel university press GmbH, 2007. – 202 p.
8. Zaides S.A., Fong F.D. Roughness of cylindrical parts in transverse burnishing by flat plates // *Russian Engineering Research*. 2018. Vol. 38. No. 12. P. 921 – 925.
9. Walton H.W. Deflection methods to estimate residual stress. Handbook of residual stress and deformation of steel // *ASM International*. 2002. P. 89 – 98.
10. Мрочек Ж.А., Макаревич С.С., Кожуро Л.М. и др. Остаточные напряжения. – Минск: УПТехнопринт, 2003. – 352 с.
11. Sjogren S. Choosing the right wire straightener for specific applications // *Euro Wire*. November 2001.
12. Блюменштейн В.Ю., Смелянский В.М. Механика технологического наследования на стадиях обработки и эксплуатации деталей машин. – М.: Машиностроение, 2007. – 400 с.
13. Зайдес С.А., Куанг Л.Х. Правка маложестких цилиндрических деталей. Часть 1. Обоснование вида нагружения и режимов при поперечной правке цилиндрических деталей // *Изв. вуз. Черная металлургия*. 2019. Т. 62. № 7. С. 517 – 524.
14. Грудев А.П. Внешнее трение при прокатке. – М.: Металлургия, 1973. – 288 с.
15. Мураткин Г.В., Котова И.В. Математическая модель процесса правки деталей методом поверхностного пластического деформирования с предварительным изгибом заготовки // *Металлообработка*. 2004. № 6. С. 27 – 31.
16. Королев А.В., Балаев А.Ф., Савран С.А. Математическая модель вибромеханической стабилизации геометрических параметров длинномерных деталей // *Успехи современной науки*. 2016. Т. 2. № 7. С. 73 – 77.
17. Dong J., Epp J., Rocha A.S. etc. Investigation of the influence factors on distortion in induction-hardened steel shafts manufactured from cold-drawn rod // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2016. Vol. 47. No. 2. P. 877 – 888.
18. Куанг Л.Х., Зайдес С.А. Аналитическое определение напряженного состояния цилиндрических деталей при поперечной обкатке плоскими плитами // *Вестник ИргТУ*. 2018. Т. 22. № 9. С. 50 – 66.
19. Shinkin V.N. Calculation of technological parameters of O-forming press for manufacture of large-diameter steel pipes // *CIS Iron and Steel Review*. 2017. Vol. 13. P. 33 – 37.
20. Baier W., Zusset A. Straightening technology and machine. – Germany, 2001.
21. Buchanan D.J., John R. Relaxation of shot-peened residual stresses under creep loading // *Scripta Materialia*. 2008. No. 3. P. 286 – 289.
22. Shinkin V.N. The mathematical model of the thick steel sheet flattening on the twelve-roller sheet-straightening machine. Message 2. Forces and moments // *CIS Iron and Steel Review*. 2016. Vol. 12. P. 40 – 44.
23. Witels A. The Straightening System: an Indispensable Process for the Production of Wire Materials. – Germany: Albert Witels, January, 2003.
24. Shinkin V.N. Springback coefficient of the main pipelines' steel large-diameter pipes under elastoplastic bending // *CIS Iron and Steel Review*. 2017. Vol. 14. P. 28 – 33.
25. Jahromi B.H., Naye-Hashemi H., Vaziri A. Elasto-plastic stresses in a functionally graded rotating disk // *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*. 2012. Vol. 134. No. 2. P. 021004 1 – 11.
26. Басов К.А. ANSYS в примерах и задачах. – М.: Компьютер-Пресс, 2002. – 224 с.
27. Chen X., Liu Y. Finite Element Modeling and Simulation with ANSYS Workbench. – CRC Press, 2014. – 411 p.

Поступила в редакцию 1 февраля 2019 г.

После доработки 4 июня 2019 г.

Принята к публикации 20 июня 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 674–680.

STRAIGHTENING OF LOW-RIGID CYLINDRICAL DETAILS. PART 2. STRESSED STATE OF CYLINDRICAL BILLETS AT TRANSVERSE CHEESING BY FLAT PLATES

S.A. Zaides, Kuang Le Khong

Irkutsk National Research Technical University, Irkutsk, Russia

Abstract. To restore the shape of curved low-rigid cylindrical details such as shafts and axles, bending straightening under distributed loading is proposed, followed by hardening of the billet using surface plastic deformation based on transverse cheesing of it by flat plates. It is known that after straightening by transverse bending, non-equilibrium

stresses are formed over the entire volume of the billet and over time the shape of the detail may again be distorted. Therefore, after performing the straightening process by bending, it is necessary to additionally strengthen the billets by surface plastic deformation based on the transverse cheesing of them by flat plates. The aim of the work was to determine the condition of capture and stress state of the billet during such transverse cheesing. We used the mathematical apparatus and software package Ansys Workbench. The novelty of the work is a new way to manage the stress state when straightening cylindrical

billets. As a result, the value of the capture limiting angle α is in the range of 2–8°. Maximum value of the absolute reduction depends on friction coefficient and diameter of the billet. Optimal value of the absolute compression is in the range of $\Delta H = 0.07 - 0.15$ mm. The calculation results have shown that after transverse cheeing, in the center of the billet's cross section there is a stress state of all-round tension, and a stress state of compression is formed in the billet's shell. The method of hardening by transverse cheeing with flat plates eliminates the cracks formation and material destruction in the central part of cylindrical products.

Keywords: straightening, angle of capture, absolute compression, friction coefficient, transverse cheeing, residual stresses, stress state.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-674-680

REFERENCES

1. Avent R.R., Mukai D.J., Robinson P.F. Heat straightening rolled shapes. *Journal of Structural Engineering*. 2000, vol. 126, no. 7, pp. 755–763.
2. Zaides S.A., Kuang L.Kh. Analytical calculation of the main parameters of small low-rigid cylindrical parts straightening by transverse cheeing with flat plates. *Vestnik IrGTU*. 2018, vol. 22, no. 3, pp. 24–34. (In Russ.).
3. Shchukin V.Ya. *Osnovy poperechno-klinovoi prokatki* [Fundamentals of cross-wedge rolling]. Minsk: Nauka i tekhnika, 1986, 223 p. (In Russ.).
4. Klushin V.A., Rudovich A.O. *Tekhnologiya i oborudovanie poperechno-klinovoi prokatki* [Technology and equipment of cross-wedge rolling]. Minsk: FTI NAN Belarusi, 2010, 300 p. (In Russ.).
5. Tomlenov A.D. *Mekhanika protsessov obrabotki metallov davleniem* [Mechanics of metal forming processes]. Moscow: Mashgiz, 1963, 235 p. (In Russ.).
6. Zaides S.A., Hinh N.V. Influence of oscillatory smoothing on the residual stress in cylindrical components. *Russian Engineering Research*. 2018, vol. 38, no. 11, pp. 859–864.
7. Sobolevski E.G. *Residual stress analysis of components with real geometries using the incremental hole-drilling technique and a differential evaluation method: Dr. diss.* Kassel: Kassel university press GmbH, 2007, 202 p.
8. Zaides S.A., Fong F.D. Roughness of cylindrical parts in transverse burnishing by flat plates. *Russian Engineering Research*. 2018, vol. 38, no. 12, pp. 921–925.
9. Walton H.W. Deflection methods to estimate residual stress. *Handbook of residual stress and deformation of steel*. ASM International, 2002, pp. 89–98.
10. Mrochek Zh.A., Makarevich S.S., Kozhuro L.M., Pashkevich M.F., Il'yushenko A.F. *Ostatochnye napryazheniya* [Residual stresses]. Minsk: UP Tekhnoprint, 2003, 352 p. (In Russ.).
11. Sjogren S. Choosing the right wire straightener for specific applications. *Euro Wire*. November 2001.
12. Blyumenshtein V.Yu., Smelyanskii V.M. *Mekhanika tekhnologicheskogo nasledovaniya na stadiyakh obrabotki i ekspluatatsii detalей mashin* [Mechanics of technological inheritance at processing and operation of machine parts]. Moscow: Mashinostroenie, 2007, 400 p. (In Russ.).
13. Zaides S.A., Quang L.H. Straightening of low-rigid cylindrical details. Part I. Justification of the type of loading and modes at transverse straightening. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2019, vol. 62, no. 7, pp. 517–524. (In Russ.).
14. Grudev A.P. *Vneshnee trenie pri prokatke* [External friction during rolling]. Moscow: Metallurgiya, 1973, 288 p. (In Russ.).
15. Muratkin G.V., Kotova I.V. Mathematical model of the process of details correction by the method of surface plastic deformation with the preliminary bending of the billet. *Metalloobrabotka*. 2004, no. 6, pp. 27–31. (In Russ.).
16. Korolev A.V., Balaev A.F., Savran S.A. Mathematical model of vibromechanical stabilization of geometrical parameters of lengthy details. *Uspekhi sovremennoi nauki*. 2016, vol. 2, no. 7, pp. 73–77. (In Russ.).
17. Dong J., Epp J., Rocha A.S., Nunes R.M., Zoch H.W. Investigation of the influence factors on distortion in induction-hardened steel shafts manufactured from cold-drawn rod. *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2016, vol. 47, no. 2, pp. 877–888.
18. Quang L.H., Zaides S.A. Analytical determination of stressed state of the cylindrical details at transverse cheeing by flat plates. *Vestnik IrGTU*. 2018, vol. 22, no. 9, pp. 50–66. (In Russ.).
19. Shinkin V.N. Calculation of technological parameters of O-forming press for manufacture of large-diameter steel pipes. *CIS Iron and Steel Review*. 2017, vol. 13, pp. 33–37.
20. Baier W., Zusset A. *Straightening technology and machine*. Germany, 2001.
21. Buchanan D. J., John R. Relaxation of shot-peened residual stresses under creep loading. *Scripta Materialia*. 2008, no. 3, pp. 286–289.
22. Shinkin V.N. The mathematical model of the thick steel sheet flattening on the twelve-roller sheet-straightening machine. Message 2. Forces and moments. *CIS Iron and Steel Review*. 2016, vol. 12, pp. 40–44.
23. Witels A. *The Straightening System: an Indispensable Process for the Production of Wire Materials*. Germany: Albert Witels, January, 2003.
24. Shinkin V.N. Springback coefficient of the main pipelines' steel large-diameter pipes under elastoplastic bending. *CIS Iron and Steel Review*. 2017, vol. 14, pp. 28–33.
25. Jahromi B.H., Nayeb-Hashemi H., Vaziri A. Elasto-plastic stresses in a functionally graded rotating disk. *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*. 2012, vol. 134, no. 2, pp. 021004 1–11.
26. Basov K.A. *ANSYS v primerakh i zadachakh* [ANSYS in examples and tasks]. Moscow: Komp'yuterPress, 2002, 224 p. (In Russ.).
27. Chen X., Liu Y. *Finite Element Modeling and Simulation with ANSYS Workbench*. CRC Press, 2014, 411 p.

Information about the authors:

S.A. Zaides, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of the Chair “Engineering Technology and Materials” (zsa@istu.edu)

Kuang Le Khong, Postgraduate of the Chair “Engineering Technology and Materials”

Received February 1, 2019

Revised June 4, 2019

Accepted June 20, 2019

УДК 621,7: 672

ВЫБОР ТЕМПЕРАТУРНО-ВРЕМЕННЫХ УСЛОВИЙ НАГРЕВА ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ СОВМЕЩЕННОГО ПРОЦЕССА БОРИРОВАНИЯ И ОБЪЕМНОЙ ЗАКАЛКИ КРУПНЫХ ШТАМПОВ ИЗ СТАЛИ 5ХНМ

Минков К.А.¹, ведущий инженер (k.minkov@ruspolymet.ru)

Минков А.Н.², к.т.н., доцент кафедры «Металловедение и термическая
обработка металлов» (minkov46@mail.ru)

Хлыбов А.А.³, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Материаловедение, технологии
материалов и термическая обработка металлов» (hlybov_52@mail.ru)

¹ ПАО «Русполимет»

(607010, Россия, Нижегородская обл., Кулебаки, ул. Восстания, 1)

² Донбасская государственная машиностроительная академия
(84313, Украина, Донецкая обл., Краматорск, ул. Академическая, 72)

³ Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
(603022, Россия, Нижний Новгород, ул. Минина, 24)

Аннотация. В промышленности широкое распространение получили штампы для горячего деформирования. В процессе эксплуатации они подвергаются воздействию высоких температур, напряжений, близких к пределу текучести, переменных термических нагрузок. Для производства штампов используются инструментальные стали повышенной прокаливаемости с высокими механическими характеристиками. В данной работе рассматривается возможность применения стали 5ХНМ. Одной из технологических операций при изготовлении штампов является закалка в масле. Для улучшения эксплуатационных характеристик, в том числе для повышения износостойкости штампов, рационально применять объемное и поверхностное упрочнение, в частности химико-термическую обработку. Представлен способ поверхностного упрочнения путем совмещенного нагрева под химико-термическую и термическую обработку. В качестве поверхностного способа упрочнения крупногабаритных штампов горячего деформирования предложено использовать борирование. Выбраны и подтверждены оптимальные температурно-временные параметры нагрева под совмещенную термическую обработку. Предложенный режим химико-термической обработки позволяет получить необходимую толщину борированного слоя, обеспечивающего высокую твердость и коррозионную стойкость в рабочем диапазоне температур штампа. Проведены исследования влияния термической обработки на структуру и размер зерна в образцах. Показано, что с повышением температуры и времени выдержки размер зерна увеличивается. Это приводит к снижению пределов прочности, текучести, твердости, ударной вязкости, что может отрицательно влиять на эксплуатационные свойства штампов. Для определения механических характеристик проведены испытания образцов (в исследуемом диапазоне температур и выдержек) на растяжение и ударную вязкость. Все испытания проводились в соответствии с существующими ГОСТами. На основании этих результатов выбраны температура и время борирования, обеспечивающие высокие механические свойства и толщину борированного слоя. Предложенный подход позволил значительно сократить экономические затраты на изготовление штампов из стали 5ХНМ за счет исключения из технологического процесса повторного нагрева для проведения закалки при сохранении требуемых эксплуатационных характеристик крупногабаритных штампов.

Ключевые слова: борирование, штамп, объемная закалка, отпуск, температура, время, сталь.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-681-685

В процессе эксплуатации штампы горячего деформирования находятся под воздействием высоких температур нагрева и знакопеременных механических и термических нагрузок, значительного уровня напряжений, близкого к пределу текучести штамповых сталей [1, 2]. Такие жесткие условия эксплуатации приводят к выходу из строя штампов из-за пластической деформации (смятия) или хрупкого разрушения, интенсивного износа рабочей поверхности штампов и образования на ней сетки разгарных трещин [3 – 7].

Учитывая высокую стоимость и трудоемкость изготовления крупных штампов для горячего деформирования, проблема повышения их стойкости является одной из актуальных в современном машиностроении.

Наиболее распространенными марками сталей для изготовления штампов и деталей оснастки традиционно являются стали повышенной прокаливаемости 5ХНМ, 5ХНВ и др. [1, 3, 8]. В работе рассмотрим сталь 5ХНМ. Сочетание удовлетворительной твердости и теплоустойчивости, высокой вязкости и низкой себестоимости данной марки делают ее незаменимой в производстве. Сталь используют для изготовления поковок деталей общего машиностроения, цельнокатаных колец различного назначения, молотовых штампов паровоздушных и пневматических молотов массой падающих частей свыше 3 т, прессовых штампов и штампов машинной скоростной штамповки при горячем деформировании легких цветных сплавов и т. д.

Химический состав и назначение основных марок штамповых сталей регламентированы ГОСТ 5950–2000. Химический состав стали 5ХНМ, %: 0,5 – 0,8 Mn; ≤0,3 Cu; 1,4 – 1,8 Ni; ≤0,03 S; 0,15 – 0,3 Mo; 0,5 – 0,6 C; ≤0,03 P; 0,5 – 0,8 Cr; 0,1 – 0,4 Si.

Большое разнообразие условий работы штампов предопределяет не только применение различных сталей, но и необходимость получать в каждом конкретном случае оптимальное для данных условий сочетание свойств за счет правильного выбора режимов термической обработки. Технологический процесс термической обработки штампов и деталей оснастки состоит из закалки для образования мартенсита и отпуска с целью получения структуры сорбита или троостита [2, 3, 6, 7].

При этом в зависимости от назначения штампа возможен выбор разных температур нагрева под закалку, закалочных сред и способов охлаждения, а также температур отпуска. Режимы закалки и отпуска не универсальны, их рекомендуется назначать дифференцированно в соответствии с условиями работы инструмента [3, 7].

Объемное упрочнение крупногабаритных штампов предусматривает проведение следующих технологических операций: нагрев до 840 – 860 °С, выдержку, последующее подстуживание на воздухе до 750 °С (5 – 10 мин) и закалку штампа в минеральном масле. После закалки стали подвергают отпуску при температуре 500 – 600 °С. Дополнительный отпуск хвостовика включает нагрев до температуры 680 – 700 °С и последующее охлаждение на воздухе. Штамповые стали при охлаждении в масле закаляются на мартенситные структуры [9 – 11]. При проведении в дальнейшем отпуска получаем структуры троостита или троостосорбита отпуска [3, 11]. Полученные структуры обеспечивают необходимые прочность, вязкость и разгаростойкость.

Для улучшения эксплуатационных характеристик изделия после закалки и отпуска подвергают операции поверхностного упрочнения.

Поверхностное упрочнение для повышения износостойкости может быть достигнуто химико-термической обработкой штампов [5, 6, 12 – 15]. С этой целью их подвергают азотированию, цианированию, борированию и хромированию. Из указанных способов поверхностного упрочнения борирование является наиболее предпочтительным. Этот процесс обеспечивает получение наиболее высокой твердости поверхностных слоев до 18 – 20 ГПа, которая сохраняется до температуры около 700 °С. Кроме этого, борированные слои характеризуются высокой стойкостью к окислению в воздушной среде при температурах 700 – 850 °С. Борирование способствует также повышению коррозионной стойкости сталей [8, 16 – 19].

Наиболее простым способом термодиффузионного насыщения рабочей поверхности бором является борирование в порошковых смесях. Существующие тех-

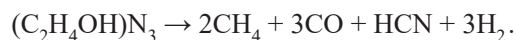
нологии предусматривают проведение борирования при 910 – 930 °С в герметичных контейнерах и последующее охлаждение штампа. В дальнейшем штамп извлекают из контейнера и производят термическую обработку, включающую закалку в масле с температуры 830 – 850 °С и последующий отпуск при 500 – 520 °С.

Необходимость изготовления контейнеров и проведения работ по их герметизации и разгерметизации делает этот процесс сложным и дорогостоящим. Повторный нагрев штампа для проведения закалки также увеличивает стоимость и повышает энергоемкость изготовления штампов.

Целью проведения настоящей работы является получение исходных данных для разработки совмещенного процесса объемного и поверхностного упрочнения, исключающего необходимость применения контейнеров для борирования штампов и проведения повторного нагрева для их закалки.

Для решения поставленной задачи был разработан способ борирования крупных штампов в шахтных печах типа СШЦМ в защитной атмосфере, включающий нагрев и выдержку в печи с защитной атмосферой, создаваемой путем подачи триэтанолamina в печь [20].

Триэтанолamin при нагреве свыше 500 °С разлагается по реакции



Метан и цианистый водород в свою очередь разлагаются по реакциям



В результате указанных реакций образуются активный углерод, водород и азот, что и создает защитную атмосферу.

Проведенные исследования позволили определить оптимальное количество подаваемого в печь триэтанолamina, которое составляет 700 – 800 г/ч на 1 м³ печного пространства. При большем количестве подаваемого триэтанолamina ухудшаются условия диффузионного насыщения поверхности бором и увеличивается его расход. При меньшем количестве защитная атмосфера теряет свои функциональные свойства.

Применение предложенного способа позволяет исключить необходимость использования контейнеров, а закалку штампа проводить непосредственно после борирования, тем самым отпадает необходимость повторного нагрева под закалку. Для достижения поставленной цели необходимо получить и обосновать оптимальные температурно-временные условия нагрева. При этом температура нагрева и длительность выдержки должны обеспечить получение:

– необходимой толщины борированного слоя (0,10 – 0,12 мм), обеспечивающего повышение эксплуатационной стойкости штампа;

– высоких прочностных и пластических свойств и ударной вязкости основного металла, позволяющих противостоять значительным динамическим нагрузкам в процессе штамповки в сочетании с высокой твердостью, исключающей продавливание борированного слоя.

Для исследования зависимости толщины борированного слоя от условий нагрева проводили борирование образцов в порошковой смеси на основе карбида бора с добавлением 0,5 – 1,0 % NH_4Cl в качестве активатора. Толщину борированного слоя определяли на приборе для измерения микротвердости ПМТ-3.

Характеристики режимов для исследования влияния температурно-временных условий нагрева на толщину борированного слоя приведены в табл. 1. В качестве исходного режима принят существующий технологический процесс термической обработки штампов, включающий нагрев до температуры 840 – 860 °С и выдержку 2 ч (режим 1). В результате борирования при таких температурно-временных условиях толщина борированного слоя составляет 0,03 мм и является недостаточной для обеспечения высокой эксплуатационной стойкости. Борированный слой необходимой толщины 0,12 мм формируется лишь при выдержке длительностью 16 ч (режим 3). С повышением температуры до 890 °С процесс насыщения бором интенсифицируется и уже при выдержке длительностью 6 ч распространение сплошного слоя боридов происходит на глубину 0,12 мм (режим 8). При температуре 930 °С слой толщиной 0,12 мм образуется после насыщения бором в течение 4 ч (режим 8).

На взгляд авторов, самым экономичным и технологичным является процесс борирования, осуществляемый по режиму 5 ($t = 890$ °С, $\tau = 6$ ч). Однако повышение температуры и длительности выдержки по сравнению с действующей технологией могут привести к росту аустенитного зерна, и, как следствие, к снижению механических свойств основного металла штампового кубика. Поэтому проведено исследование влияния

температуры и длительности выдержки на величину зерна аустенита и механические свойства стали 5ХНМ. Для этого на заготовках размером 120×20×20 мм проводили термическую обработку в соответствии с режимами, указанными в табл. 1. Заготовки после нагрева и выдержки охлаждали в масле. После термической обработки из них изготавливали образцы для проведения испытаний на растяжение (тип III, ГОСТ 1497-84) и ударную вязкость (тип I, ГОСТ 9454-78).

Зерно аустенита выявляли химическим путем после специальной термической обработки шлифов, обеспечивающей декорирующее выделение карбидов по границам зерен. Травление образцов осуществляли в 4 %-ном спиртовом растворе азотной кислоты. Для определения величины зерна производили подсчет зерен в трех характерных полях и определяли средние значения площади, диаметра и размера зерна аустенита.

В табл. 1 также представлены результаты измерения балла аустенитного зерна. Установлено, что с повышением температуры от 850 до 930 °С и длительности нагрева от 2 до 6 ч размер аустенитного зерна увеличивается от 0,020 мм (балл 8, режим 1) до 0,088 мм (балл 4, режим 9). Однако при температуре 890 °С и длительности выдержки 6 ч (режим 5) размер зерна аустенита практически не изменяется по сравнению с действующим технологическим процессом (режим 1) и составляет 0,028 мм (балл 7).

Результаты испытаний механических свойств образцов, термообработанных по различным режимам, представлены в табл. 2. Твердость измеряли на остатках ударных образцов после испытаний.

Установлено, что при повышении температуры нагрева до 930 °С наблюдается рост аустенитного зерна, что приводит к снижению ударной вязкости (от 40 до 25 Дж/см²) по сравнению с существующей технологией закалки (режим 1). Наблюдается также снижение

Таблица 1

Влияние температурно-временных условий борирования на глубину борированного слоя и балл аустенитного зерна

Table 1. Influence of temperature-time conditions of borating on the depth of borated layer and austenitic grain grade

Номер режима	Температура нагрева, °С	Длительность выдержки, ч	Толщина борированного слоя, мм	Балл аустенитного зерна
1	850	2	0,03	8
2	850	6	0,06	7 – 8
3	850	14	0,12	7
4	890	2	0,06	7 – 8
5	890	6	0,12	7
6	890	10	0,16	5 – 6
7	930	2	0,08	6
8	930	4	0,12	5 – 6
9	930	6	0,14	4 – 5

Влияние температуры закалки и величины аустенитного зерна на механические свойства стали 5ХНМ

Table 2. Influence of quenching temperature and austenitic grain size on hardness and mechanical properties

Номер режима	Механические свойства стали 5ХНМ						Балл аустенитного зерна
	σ_b , МПа	σ_t , МПа	δ , %	ψ , %	KCU, Дж/см ²	HRC	
1	1400	1180	7	14	42	41	8
2	1430	1210	8	21	42	41	7 – 8
3	1450	1240	6	17	39	40	7
4	1400	1230	7	18	39	40	7 – 8
5	1370	1220	8	17	38	40	7
6	1200	1000	7	16	34	37	5 – 6
7	1300	1100	7	14	32	34	6
8	1200	980	6	12	28	33	5 – 6
9	1100	950	5	11	25	32	4 – 5

твердости (от 42 до 32 HRC). Тем не менее, при закалке с температуры нагрева 890 °С и выдержке 6 ч (режим 5) сталь еще обладает достаточно высоким комплексом механических свойств и твердости.

Выводы. Полученные данные свидетельствуют о возможности осуществления совмещения процесса борирования ($t = 890$ °С, $\tau = 6$ ч) и последующей закалки при производстве крупных штампов из стали 5ХНМ. При этом сохраняется высокий комплекс механических свойств основного металла штампа и создаются условия для получения борированных слоев достаточной толщины.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- Околович Г. А. Штамповые стали для холодного деформирования металлов. – 2-е изд., перераб. и доп. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2010. – 202 с.
- Лахтин Ю.М. Материаловедение: Учебник. – М.: Металлургия, 1990. – 528 с.
- Геллер Ю.А. Инструментальные стали. – М.: Металлургия, 1975. – 584 с.
- Mintz B. The influence of composition on the hot ductility of steel and to the problem of transverse cracking // *ISI International*. 1999. Vol. 39. No. 9. P. 833 – 855.
- Fleischer R.L., Hibberd W.R. The relation between the structure and mechanical properties of metals. – Н.М.С.О., 1963. – 203 p.
- Тополянский П.А., Тополянский А.П., Ермаков С.А., Соснин Н.А. Повышение стойкости инструмента для холодной объемной штамповки // *Кузнечно-штамповочное производство. Обработка материалов давлением*. 2014. № 3. С. 22 – 32.
- Гадалов В.Н., Емельянов С.Г., Романенко Д.Н., Розина Т.Н. Износ и повышение стойкости штампов // *Новые решения в области упрочняющих технологий*. Т.1. – Курск: ЗАО «Университетская книга», 2016. С. 46 – 48.
- Гурьев А.М., Лыгденов Б.Д., Власова О.А. Совершенствование технологии химико-термической обработки инструментальных сталей // *Обработка металлов*. 2009. № 1. С. 14 – 15.
- Богданова Т.А., Перебоева А.А., Третьякова Л.П., Окладникова Н.В. Исследование структуры и свойств штамповых инструментальных сталей // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М. Ф. Решетнева*. 2009. № 2. С. 239 – 241.
- Попова Л.Е., Попов А.А. Диаграммы превращения аустенита в сталях и β -раствора в сплавах титана: Справочник термиста. – М.: Металлургия, 1991. – 503 с.
- Sourmail T., Smanio V. Low temperature kinetics zabainite formation in high carbon steels // *Acta Materialia*. 2013. Vol. 61. No. 7. P. 2639 – 2648.
- Yang B., Degischer H.P., Presslinger H. etc. Influence of chemical composition on high temperature tensile properties of carbon steels // *BHM Berg- und Huttenmannische Monatshefte*. 2005. Vol. 150. No. 9. P. 313 – 320.
- The thermochemical Surface Engineering of Steels / Mittemeijer Eric J., Somers Marcel A.J. eds. Woodhead Publishing, 2015. – 827 p.
- Czerwinski Frank. Thermochemical Treatment of Metals. – INTECH Open Access Publisher, 2012. – 418 p.
- Ворошнин Л.Г. Борирование сталей и чугунов: Справ. пособие. – Минск: Изд-во Беларусь, 1981. – 205 с.
- López-Chipresa E., Mejía I., Maldonado C. etc. Hot flow behavior of boron microalloyed steels // *Materials Science and Engineering A*. 2008. Vol. 480. P. 49 – 55.
- Gopalakrishnan P., Shankar P., Palaniappa M., Ramakrishnan S.S. Interrupted boriding of medium-carbon steels // *Metallurgical and Materials Transactions*. 2002. Vol. 33A. No. 5. P. 1475 – 1485.
- Kartal G., Eryilmaz O.L., Krumdick G. etc. Kinetics of electrochemical boriding of low carbon steel // *Applied Surface Science*. 2011. Vol. 257. P. 6928 – 6934.
- Yeh C.L., Wang H.J. Preparation of borides in Nb-B and Cr-B systems by combustion synthesis involving borothermic reduction of Nb₂O₅ and Cr₂O₃ // *Journal of Alloys and Compounds*. 2010. Vol. 490. P. 366 – 371.
- А.с. 1712461 СССР, C23C8/70. Минков А.Н., Колесник Н.М., Гатченко А.Е. Способ борирования стальных изделий; заявл. 09.10.1987; опубл. 15.02.1992. Бюл. № 6.

Поступила в редакцию 4 февраля 2018 г.
После доработки 1 августа 2019 г.
Принята к публикации 3 августа 2019 г.

CHOICE OF TEMPERATURE AND TIME CONDITIONS OF HEATING FOR THE COMBINED PROCESS OF BORATING AND VOLUME TRAINING OF LARGE STAMPS OF 5KhNM STEEL

K.A. Minkov¹, A.N. Minkov², A.A. Khlybov³

¹ JSC “Ruspolimet”, Kulebaki, Nizhny Novgorod Region, Russia

² Donbass State Engineering Academy, Kramatorsk, Donetsk Region, Ukraine

³ Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev, Nizhny Novgorod, Russia

Abstract. The stamps for hot deformation are widely adopted in industry. In use they are affected by high temperatures, tension (close to a fluidity limit) and variable thermal loadings. High-hardenability tool steels with high mechanical characteristics are used for stamps production. In this article, the possibility of use of 5KhNM steel for this goal is considered. One of technological operations at production of stamps is training in oil. It is rational to apply volume and superficial hardening, in particular chemical heat treatment, to improve operational characteristics of stamps, including wear resistance. The way of superficial hardening by the combined heating under chemical and thermal and heat treatment is presented. As a superficial way of hardening of large-size stamps of hot deformation, it is offered to use borating. Optimum temperature and time parameters of heating under the combined heat treatment are chosen and confirmed. The offered mode of chemical heat treatment allows receiving the necessary thickness of the borated layer providing high hardness and corrosion resistance in the working range of temperatures of a stamp. Also the influence of heat treatment on structure and grain size of the samples has been researched. It is shown that with increase in temperature and hold time, the size of grain increases. It leads to decrease in strength, fluidity, hardness and impact strength that can negatively influence operational properties of stamps. For definition of mechanical characteristics, the samples (in the studied range of temperatures and excerpts) have been tested for stretching and impact strength. All tests were carried out according to the existing state standard specifications. On the basis of these results, temperature and time of borating are chosen providing high mechanical properties and thickness of a borated layer. The offered approach has allowed reducing economic costs of stamps production from 5KhNM steel by exception from technological process of repeated heating for training with saving the required operational characteristics of large-size stamps.

Keywords: borating, stamp, volume training, tempering, temperature, time, steel.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-681-685

REFERENCES

- Okolovich G.A. *Shtampovye stali dlya kholodnogo deformirovaniya metallov: Monografiya* [Stamp steels for cold deformation of metals: Monograph]. Barnaul: Izd-vo AltGTU, 2010, 202 p. (In Russ.).
- Lakhtin Yu.M. *Materialovedenie: ucheb.* [Materials science: Textbook]. Moscow: Metallurgiya, 1990, 528 p. (In Russ.).
- Geller Yu.A. *Instrumental'nye stali* [Tool steels]. Moscow: Metallurgiya, 1975, 584 p. (In Russ.).
- Mintz B. The influence of composition on the hot ductility of steel and to the problem of transverse cracking. *ISIJ International*. 1999, vol. 39, no. 9, pp. 833–855.
- Fleischer R.L., Hibberd W.R. *The relation between the structure and mechanical properties of metals*. H.M.S.O., 1963, 203 p.
- Topolyanskii P.A., Topolyanskii A.P., Ermakov S.A., Sosnin N.A. Increase in firmness of the tool for cold volume stamping. *Kuznechno-shtampovochnoe proizvodstvo. Obrabotka materialov davleniem*. 2014, no. 3, pp. 22–32. (In Russ.).
- Gadalov V.N., Emel'yanov S.G., Romanenko D.N., Rozina T.N. Wear and increase in firmness of stamps. In: *Novye resheniya v oblasti uprochnyayushchikh tekhnologii* [New decisions in strengthening technologies]. Vol. 1. Kursk: Universitetskaya kniga, 2016, pp. 46–48. (In Russ.).
- Gur'ev A.M., Lygdenov B.D., Vlasova O.A. Improvement of technology of chemical heat treatment of tool steels. *Obrabotka metallov*. 2009, no. 1, pp. 14–15. (In Russ.).
- Bogdanova T.A., Pereboeva A.A., Tret'yakova L.P., Okladnikova N.V. Research of structure and properties of stamp tool steels. *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta imeni akademika M. F. Reshetneva*. 2009, no. 2, pp. 239–241. (In Russ.).
- Popova L.E., Popov A.A. *Diagrammy prevrashcheniya austenita v stalyakh i β -rastvora v splavakh titana: spravochnik termista* [Transformation diagrams of austenite in steels and β -solution in alloys of the titan: Reference book of heat-treater]. Moscow: Metallurgiya, 1991, 503 p. (In Russ.).
- Sourmail T., Smanio V. Low temperature kinetics of bainite formation in high carbon steels. *Acta Materialia*. 2013, vol. 61, no. 7, pp. 2639–2648.
- Yang B., Degischer H.P., Presslinger H., Xia G., Reisinger P. Influence of chemical composition on high temperature tensile properties of carbon steels. *BHM Berg- und Huttenmannische Monatshefte*. 2005, vol. 150, no. 9, pp. 313–320.
- Thermochemical Surface Engineering of Steels*. Mittemeijer Eric J., Somers Marcel A.J. eds. Woodhead Publishing, 2015, 827 p.
- Czerwinski F. *Thermochemical Treatment of Metals*. INTECH Open Access Publisher, 2012, 418 p.
- Voroshnin L.G. *Borirovanie staley i chugunov: sprav. posobie* [Borating of steel and pig iron: Reference book]. Minsk: Izd-vo Belarus', 1981, 205 p. (In Russ.).
- López-Chipres E., Mejía I., Maldonado C. etc. Hot flow behavior of boron microalloyed steels. *Materials Science and Engineering A*. 2008, vol. 480, pp. 49–55.
- Gopalakrishnan P., Shankar P., Palaniappa M., Ramakrishnan S.S. Interrupted boriding of medium-carbon steels. *Metallurgical and Materials Transactions*. 2002, vol. 33A, no. 5, pp. 1475–1485.
- Kartal G., Eryilmaz O.L., Krundick G., Erdemir A., Timur S. Kinetics of electrochemical boriding of low carbon steel. *Applied Surface Science*. 2011, vol. 257. P. 6928–6934.
- Yeh C.L., Wang H.J. Preparation of borides in Nb-B and Cr-B systems by combustion synthesis involving borothermic reduction of Nb₂O₅ and Cr₂O₃. *Journal of Alloys and Compounds*. 2010, vol. 490, pp. 366–371.
- Minkov A.N., Kolesnik N.M., Gatchenko A.E. *Sposob borirovaniya stal'nykh izdelii* [Method of steel products borating]. Certificate of authorship USSR no. 1712461, S23S8/70. *Byulleten' izobretenii*. 1992, no. 6. (In Russ.).

Information about the authors:

Minkov K.A., Senior Engineer (k.minkov@ruspolymet.ru)

Minkov A.N., Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair “Materials Science and Heat Treatment of Metals” (minkov46@mail.ru)

Khlybov A.A., Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of the Chair “Materials Science, Technology of Materials and Heat Treatment of Metals” (hlybov_52@mail.ru)

Received February 4, 2018

Revised August 1, 2019

Accepted August 3, 2019

УДК 621.774.353

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВИНТОВОЙ РАСКАТКИ ТРУБ В ЧЕТЫРЕХВАЛКОВОМ СТАНЕ

Романцев Б.А., д.т.н., профессор кафедры «Обработка металлов давлением» (boralr@yandex.ru)
Харитонов Е.А., к.т.н. доцент кафедры «Обработка металлов давлением» (haritonov45@mail.ru)
Будников А.С., аспирант кафедры «Обработка металлов давлением» (fiar128@yandex.ru)
Ле Ван Чонг, студент кафедры «Обработка металлов давлением»
Чан Ба Хюи, аспирант кафедры «Обработка металлов давлением» (tbh510@gmail.com)

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
 (119049, Россия, Москва, Ленинский пр., 4)

Аннотация. Разработана и изготовлена, в том числе с помощью аддитивных технологий, модель четырехвалкового стана винтовой прокатки. Рабочие валки установлены: основные – по чашевидной, вспомогательные – по грибовидной схемам с углом раскатки $\pm 7^\circ$ при нерегулируемом угле подачи 15° . Основные и вспомогательные валки имеют длину бочки 70 мм. Диаметр основных валков в пережиме 50 мм, вспомогательных 36 мм. На выходном участке в сечении выхода трубы из валков их диаметры практически одинаковые и составляют 72 мм. Каждый из четырех валков приводится в движение индивидуальным приводом с мотор-редуктором мощностью 100 Вт и частотой вращения 60 об/мин по грибовидной схеме и 83 об/мин по чашевидной. Это позволяет минимизировать расхождение окружных скоростей по очагу деформации при разных диаметрах валков. На разработанной модели четырехвалкового стана проведена раскатка гильз из пластины диаметром 25 мм с толщиной стенки 7,5; 5,5 и 3,5 мм. Соотношение диаметра к толщине стенки трубы составляло 3, 5 и 8. Раскатка труб осуществлялась на плавающих оправках диаметром 9, 13 и 17 мм. После прокатки проведены измерения диаметра и толщины стенки труб в пяти равноудаленных друг от друга поперечных сечениях. В каждом поперечном сечении диаметр измерялся в пяти, а толщина стенки в десяти точках. Конечно-элементным методом осуществлено моделирование процесса раскатки указанных труб в программе QForm. Оценка адекватности модели проводилась путем сравнения размеров труб и их точности после раскатки и по результатам компьютерного моделирования. При раскатке в четырехвалковом стане разностенность значительно уменьшается.

Ключевые слова: четырехвалковый раскатной стан, рабочие валки, пластилин, компьютерное моделирование, отношение диаметра к толщине стенки, модель, разностенность, точность труб.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-686-690

Макет четырехвалкового стана винтовой прокатки (рис. 1) состоит из станины закрытого типа 1 [1]. Рабочие валки, установленные по чашевидной схеме 2, условно обозначены как основные, а валки, установленные по грибовидной схеме 3 – вспомогательные. Угол подачи рабочих валков не регулируется и составляет

15° [2]. Основные и вспомогательные рабочие валки установлены с углом раскатки $\pm 7^\circ$ [3 – 4]. Совмещение чашевидной и грибовидной схем прокатки позволяет разместить привод валков на входной и выходной стороне стана. Основные и вспомогательные валки имеют одинаковую длину бочки 70 мм. Диаметр основных

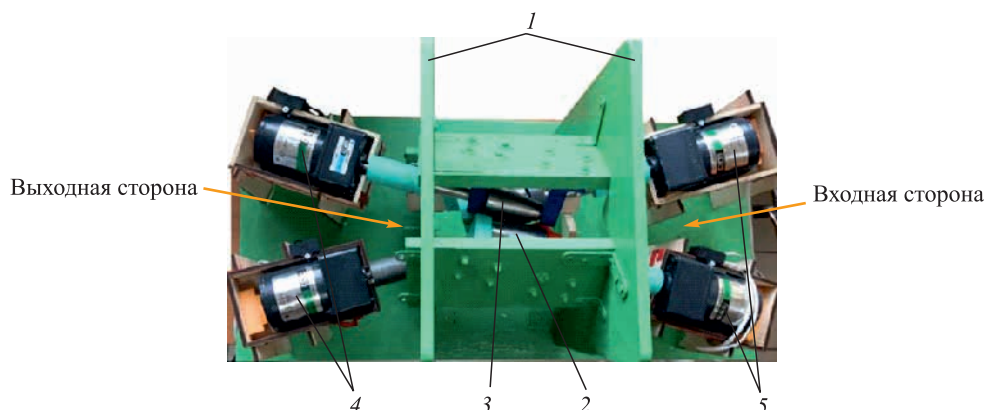


Рис. 1. Макет четырехвалкового стана винтовой раскатки

Fig. 1. Model of a four-high screw rolling mill

валков в пережиме 50 мм, а вспомогательных 36 мм. На выходном участке в сечении выхода трубы из валков их диаметры практически одинаковые и составляют 72 мм. Каждый из четырех валков приводится в движение индивидуальным приводом с мотор-редуктором мощностью 100 Вт и частотой вращения 60 об/мин для основных валков 4 и 83 об/мин для вспомогательных 5. Это позволяет минимизировать расхождение окружных скоростей по очагу деформации, характерное при совмещении чашевидной и грибовидной схем прокатки из-за различия в диаметрах валков [5 – 6].

На рис. 2 представлена схема очага деформации четырехвалкового стана с основными размерами валков и их калибровкой [7 – 8]. Данная калибровка предназначена для исследования процесса прошивки, поэтому углы наклона образующей валка к оси прокатки на входном и выходном участках составляют 2 и 3° соответственно. Диаметр калибра в пережиме 23 мм, наружный диаметр на входе 25 мм, что позволяет осуществлять прокатку с обжатием по диаметру 9 % [9 – 10]. Отсутствие гребня, который применяется при раскатке, не позволяет увеличить обжатие как по диаметру, так и по толщине стенки [2 – 3].

С целью исследования процесса раскатки труб в четырехвалковом стане винтовой прокатки осуществлена деформация гильз из пластилина диаметром 25 мм с толщиной стенки 7,5; 5,5 и 3,5 мм. В виду особенностей реологических свойств пластилина, таких как большая вязкость, склонность к налипанию на валки, низкая механическая прочность, выбраны пониженные значения соотношения диаметра к толщине стенки трубы (D_T/S_T), равные 3, 5 и 8. Раскатка труб осуществлялась на плавающих оправках диаметром 9, 13 и 17 мм [11 – 12]. Оправки изготавливались на 3D прин-

тере из пластика типа ABS. Длина исходных гильз составляла 60 мм. Обжатие по толщине стенки в процессе раскатки 0,5 мм.

Проведены измерения диаметра и толщины стенки в пяти равноудаленных друг от друга поперечных сечениях [13]. В каждом поперечном сечении диаметр измерялся в пяти, а толщина стенки в десяти точках (рис. 3).

Для эффективного анализа геометрических параметров труб, полученных в процессе четырехвалковой раскатки, с помощью программы QForm [13 – 17] осуществлено конечно-элементное [14, 16, 18] моделирование процесса раскатки труб тех же размеров в условиях, приближенных к условиям прокатки в четырехвалковом стане. Реологические свойства пластилина, необходимые для расчета формоизменения заготовки, задавались в соответствии с данными работы [15].

Для осуществления конечно-элементного моделирования, в программе SolidWorks разработана сборка, состоящая из валков, заготовки и оправки. С помощью редактора геометрии QShape на каждом объекте сборки генерировалась сетка конечных элементов. Моделирование осуществлялось без смазки с отсутствием проскальзывания на контактной поверхности заготовки и валка.

В табл. 1 представлены исходные геометрические параметры гильз $D_T \times S_T$ и полученных труб $D_T \times S_T$. Сравнение результатов геометрических параметров труб, полученных на четырехвалковом стане, с их компьютерным моделированием показало, что разностенность труб с соотношением диаметра к толщине стенки 3 и 5 составляет 4 – 4,1 %, а по результатам компьютерного моделирования 3,2 – 4,9 %. Расхождение результатов – не более 20 %. Наименьшее отклонение экспериментальных данных от компьютерных получены на трубах с $D_T/S_T = 8$, а наибольшее расхождение между экспериментальными и компьютерными данными наблюдается при оценке точности по диаметру, что объясняется большой погрешностью измерения диаметра на пластилиновых образцах.

Для исследования изменения разностенности в процессе раскатки на четырехвалковом стане осуществле-

Таблица 1

Геометрические размеры гильз и труб

Table 1. Geometric dimensions of sleeves and tubes

$D_T \times S_T$ мм	$D_T \times S_T$ мм	D_T/S_T	Отклонение по диаметру, %		Разностенность, %	
			эксперимент	моделирование	эксперимент	моделирование
25×7,5	23×7	3	0,6	0,1	4,1	4,9
25×5,5	23×5	5	0,7	0,2	4,0	3,2
25×3,5	23×3	8	0,7	0,7	10,2	10,2

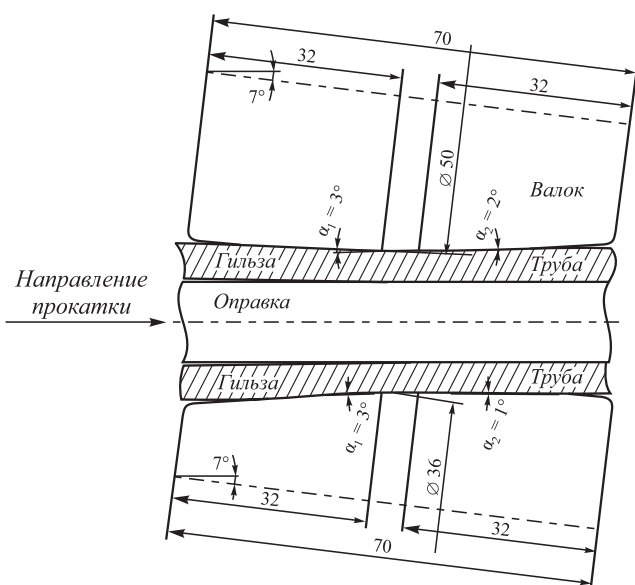


Рис. 2. Схема очага деформации

Fig. 2. Scheme of the deformation region

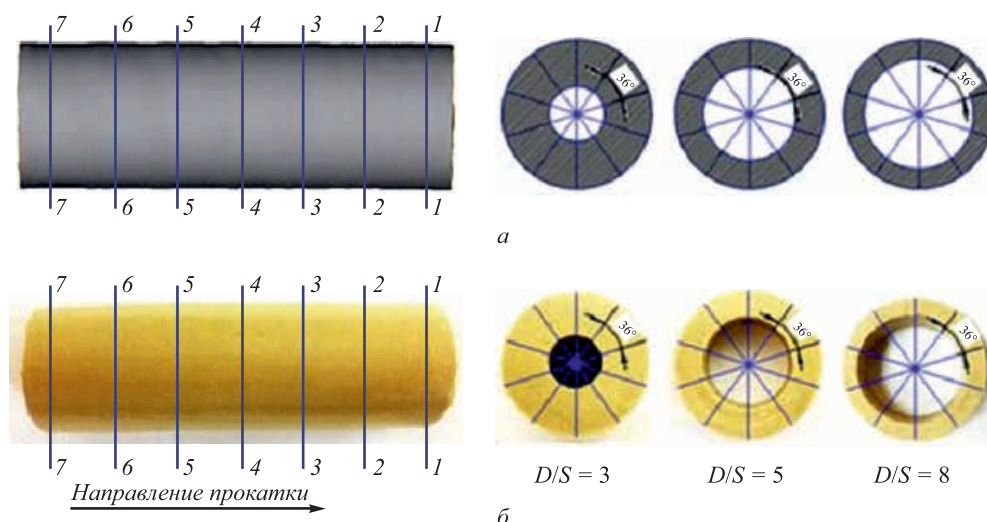


Рис. 3. Схема измерения образцов:
а – моделирование в Qform; б – эксперимент

Fig. 3. Measurement scheme of the samples:
а – Qform simulation; б – experiment

на деформация партии гильз с $D/S = 4$ диаметром 29 мм с минимальной и максимальной толщиной стенки 6 и 8 мм, что соответствует исходной разностенности 26 %. Раскатка осуществлялась на оправке диаметром 13 мм. В результате раскатки получена труба средним диаметром 23 мм и средней толщиной стенки 5 мм. Зазор между внутренней поверхностью гильзы и оправкой равен 1 мм. Результаты измерений представлены в табл. 2.

После раскатки разностенность центральной части трубы, соответствующая установившемуся процессу, уменьшилась до 4 %, в результате чего точность труб повысилась на 80 %. Существенное снижение разностенности объясняется увеличением числа циклов деформации по сравнению с раскаткой труб в двух- и трехвалковых станах [18 – 20]. Число циклов деформации можно определить по формуле

$$N = \frac{\Delta D}{S \operatorname{tg}(\varphi) \left(1 + \frac{1}{\mu_{\Sigma}} \right)},$$

где ΔD – суммарное обжатие по диаметру, мм; S – шаг подачи за $1/t$ – оборота заготовки, мм; t – число рабочих валков; φ – угол наклона образующей вала к оси прокатки; μ_{Σ} – суммарный коэффициент вытяжки.

Согласно данной формуле число циклов деформации для процесса раскатки данных образцов в четырехвалковом стане составляет 15. Если раскатку производить в трехвалковом стане, то число циклов уменьшается до 11, а в двухвалковом – до 7,5 [18]. Число циклов деформации в четырехвалковом стане по сравнению с двухвалковым увеличивается в два раза, а с трехвалковым – в 1,3 раза. Увеличение числа циклов деформации за счет добавления валков делает равномерным обжатие толщины стенки раската по его периметру, а так же способствует лучшей проработки толщины стенки раската, что приводит к существенному снижению разностенности.

Выводы. Проведен анализ раскатки образцов из пластилина и сравнение результатов геометрических параметров труб с D_t/S_t , равным 3; 5 и 8, полученных на четырехвалковом стане, с их компьютерным моделиро-

Таблица 2

Измерения толщины стенки и разностенности труб

Table 2. Measurements of wall thickness, mm and wall variation, % of pipes

Образец	Передний конец			Установившийся режим			Задний конец		
	макс., мм	мин, мм	разностенность, %	макс., мм	мин, мм	разностенность, %	макс., мм	мин, мм	разностенность, %
1	5,1	4,8	6,1	5,0	4,8	4,1	5,1	4,7	8,2
2	5,1	4,9	4,0	5,1	4,9	4,0	5,1	4,8	6,1
3	5,2	4,7	10,1	5,1	4,9	4,0	5,1	4,8	6,1

ванием. Разностенность труб с D_t/S_t , равным 3 и 5, полученных на стане, составляет 4,0–4,1 %, а с помощью компьютерного моделирования равна 3,2–4,9 %. Расхождение результатов составляет не более 20 %.

Исследование изменения разностенности в процессе четырехвалковой раскатки показало, что точность труб при раскатке увеличивается. В проведенном эксперименте разностенность труб уменьшилась с 26 % у гильз до 4 % у труб в установившемся режиме прокатки. В целом можно отметить, что процесс раскатки труб в четырехвалковом стане, благодаря особенностям геометрии очага деформации и формоизменению, благоприятно воздействует на конечные геометрические параметры получаемых труб.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Романцев Б.А., Гамин Ю.В., Гончарук А.В., Алещенко А.С. Инновационное оборудование для производства экономичных полых заготовок деталей машиностроения малого диаметра // *Металлург*. 2017. № 3. С. 53 – 57.
2. Никулин А.Н. Винтовая прокатка. Напряжения и деформации. – М.: Металлургиздат, 2015. – 380 с.
3. Пат. 2635685 РФ. Романцев Б.А., Скрипаленко М.М., Чан Ба Хюи // Способ прошивки в стане винтовой прокатки; заявл. 02.12.2016; опубл. 15.11.2017. Бюл. № 32.
4. Chiluveru S. Computational Modeling of Crack Initiation in Crossroll Piercing: PhD thesis. Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 2007. – 89 p.
5. Bartnicki J., Pater Z. Numerical simulation of three-rolls cross-wedge rolling of hollowed shaft // *Journal of Materials Processing Technology*. May 2005. Vols. 164 – 165. P. 1154 – 1159.
6. Романенко В.П., Степанов П.П., Гончарук А.В. и др. Перспективная технология производства полых вагонных осей из полых заготовки // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2016. № 2. С. 27 – 34.
7. Бретшнайдер Э., Мюллер Г., Фрикке Ю. Планетарный стан с коническими валками // *Черные металлы*. 1973. № 22. С. 29 – 35.
8. Man-sooJoun, Jangho Lee, Jae-min Cho etc. Quantitative study on Mannesmann effect in roll piercing of hollow shaft // *Procedia Engineering*. 2014. No. 81. P. 197 – 202.
9. Vaidyanathan P.V., Blazynski T.Z. Deformation and its rate as two concepts of design of tools for the secondary tube-piercing operation // *Proceedings of the 13th Int. Machine Tool Design and Research Conf.* – Palgrave, London, 1973. P. 509 – 514.
10. Jiang Y., Tang H. Method for improving transverse wall thickness precision of seamless steel tube based on tube rotation // *Journal of Iron and Steel Research International*. 2015. Vol. 22. No. 10. P. 924 – 930.
11. Pater Z., Bartnicki J., Kazanecki J. 3d finite elements method (fem) analysis of basic process parameters in rotary piercing mill // *Metallurgija*. 2012. Vol. 51. No. 4. P. 501 – 504.
12. Buchely M., Maranon A., Silberschmidt V. Material model for modeling clay at high strain rates // *International Journal of Impact Engineering*. 2016. Vol. 90. P. 1 – 11.
13. Berazategui D.A., Cavaliere M.A., Montelatini L., Dvorkin E.N. On the modelling of complex 3D bulk metal forming processes via the pseudo-concentrations technique. Application to the simulation of the Mannesmann piercing process // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2006. Vol. 65. No. 7. P. 1113 – 1144.
14. Романцев Б.А., Скрипаленко М.М., Скрипаленко М.Н. и др. Компьютерное моделирование прошивки заготовок в четырехвалковом стане винтовой прошивки // *Металлург*. 2017. № 9. С. 19 – 24.
15. Ammerling W.-J., Surmund J. The KOCKS Rotation Mill (KRM): The Ideal Planetary Cross Rolling Process for Copper Tube Production. Germany presented 29.10.2007 at the “DANIELI ECT™ Forum” in Buttrio, Italy.
16. Fu-jie Wang, Yuan-hua Shuang, Jiab-hua Hu etc. Explorative study of tandem skew rolling process for producing seamless steel tubes // *Journal of Materials Processing Technology*. 2014. Vol. 214. No. 8. P. 1597 – 1604.
17. Романенко В.П., Золотарев А.А. Моделирование технологического процесса формовки заготовок для железнодорожного колеса методом конечных элементов // *Изв. вуз. Черная металлургия*. 2013. № 5. С. 63 – 66.
18. Романенко В.П., Фомин А.В., Никулин А.Н. Влияние предварительной деформации литой заготовки на служебные свойства колесной стали // *Металлург*. 2013. № 4. С. 63 – 68.
19. Akopyan T.K., Aleshchenko A.S., Belov N.A. Effect of radial-shear rolling on the formation of structure and mechanical properties of Al-Ni and Al-Ca aluminum-matrix composite alloys of eutectic type // *Physics of metals and metallography*. 2018. Vol. 119. No. 3. P. 241 – 250.
20. Gorbatyuk S.M. Screw-rolling mill design based on kinematic analysis // *Steel in Translation*. 2000. Vol. 30. No. 9. P. 52 – 55.

Поступила в редакцию 17 июля 2018 г.

После доработки 28 июля 2019 г.

Принята к публикации 1 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 686–690.

SCREW ROLLING OF PIPES IN A FOUR-HIGH ROLLING MILL

**B.A. Romantsev, E.A. Kharitonov, A.S. Budnikov,
Le Van Chong, Chan Ba Khyui**

**National University of Science and Technology “MISIS” (MISIS),
Moscow, Russia**

Abstract. A model of four-high screw rolling mill was developed and manufactured with the help of additive technologies. The work rolls are installed: the main ones – by cup-shaped scheme and auxiliary – by mushroom scheme with an angle of rolling of ± 7 degrees, with an unregulated feed angle of 15 degrees. The main and auxiliary rolls have a barrel length of 70 mm. Diameter of the main rolls in pinching is 50 mm, of auxiliary rolls – 36 mm. At the exit in cross section of the tube outlet from the rolls, their diameters are almost the same and are

72 mm. Each of the four rolls is driven by an individual drive with a 100 W motor-reducer and a rotational speed of 60 rpm by a mushroom scheme and of 83 rpm by a cup-shaped one, which minimizes the divergence of peripheral speeds in the deformation zone at different roll diameters. On the developed model of four-high rolling mill, rolling of liners from plasticine with a diameter of 25 mm with a wall thickness of 7.5 was carried out; 5.5 and 3.5 mm, corresponding to the ratio of diameter to wall thickness 3; 5 and 8. Pipe rolling was carried out on floating mandrels with diameters of 9, 13 and 17 mm. After rolling, measurements of the diameter and wall thickness of the pipes were carried out in 5 cross sections that were equally spaced from each other. In each cross section, the diameter was measured at 5, and the wall thickness at 10 points. The finite element method has been used to simulate the process of rolling these pipes in the QForm program. As-

assessment of the model adequacy was carried out by comparing the size of pipes and their accuracy after rolling with the results of computer simulation. When rolling at a four-high rolling mill, the wall thickness is significantly reduced.

Keywords: four-roll rolling mill, work rolls, plasticine, computer simulation, diameter-to-wall thickness ratio, model, difference, pipe accuracy.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-686-690

REFERENCES

1. Romantsev B.A., Gamin Y.V., Goncharuk A.V., Aleshchenko A.S. Innovative equipment for producing cost-effective hollow billets for mechanical-engineering parts of small diameter. *Metallurgist*. 2017, vol. 61, no. 3-4, pp. 217–222.
2. Nikulin A.N. *Vintovaya prokatka. Napryazheniya i deformatsii* [Screw rolling. Stresses and strains]. Moscow: Metallurgizdat, 2015, 380 p. (In Russ.).
3. Romantsev B.A., Skripalenko M.M., Chan Ba Khyui. *Sposob proshivki v stane vintovoi prokatki* [The method of piercing in a screw rolling mill]. Patent RF no 2635685 MPK B21B 19/04. *Bulleten' izobretenii*. 2017, no 32. (In Russ.).
4. Chiluveru S. *Computational Modeling of Crack Initiation in Cross-roll Piercing: PhD thesis*. Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 2007, 89 p.
5. Bartnicki J., Pater Z. Numerical simulation of three-rolls cross-wedge rolling of hollowed shaft. *Journal of Materials Processing Technology*. May 2005, vols. 164-165, pp. 1154–1159.
6. Romanenko V.P., Stepanov P.P., Goncharuk A.V., Kriskovich S.M., Illarionov G.P., Nikulin A.N., Filippov G.A. Perspective technology of hollow car axle production from hollow billet. *Problemy chernoi metallurgii i materialovedeniya*. 2016, no. 2, pp. 27–34. (In Russ.).
7. Bretshneider E., Myuller G., Frikke Yu. Planetary mill with conical rollers. *Chernye metally*. 1973, no. 22, pp. 29–35. (In Russ.).
8. Man-soo Joun, Jangho Lee, Jae-min Cho, Seung-won Jeong, Ho-keun Moon. Quantitative study on Mannesmann effect in roll piercing of hollow shaft. *Procedia Engineering*. 2014, no. 81, pp. 197–202.
9. Vaidyanathan P.V., Blazynski T. Z. Deformation and its rate as two concepts of design of tools for the secondary tube-piercing operation. In: *Proceedings of the 13th Int. Machine Tool Design and Research Conf. Palgrave, London*, 1973, pp. 509–514.
10. Jiang Y., Tang H. Method for improving transverse wall thickness precision of seamless steel tube based on tube rotation. *Journal of Iron and Steel Research International*. 2015, vol. 22, no. 10, pp. 924–930.
11. Pater Z., Bartnicki J., Kazanecki J. 3d finite elements method (fem) analysis of basic process parameters in rotary piercing mill. *Metallurgija*. 2012, vol. 51, no. 4, pp. 501–504.
12. Buchely M., Maranon A., Silberschmidt V. Material model for modeling clay at high strain rates. *International Journal of Impact Engineering*. 2016, vol. 90, pp. 1–11.
13. Berazategui D.A., Cavaliere M.A., Montelatici L., Dvorkin E.N. On the modelling of complex 3D bulk metal forming processes via the pseudo-concentrations technique. Application to the simulation of the Mannesmann piercing process. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2006, vol. 65, no. 7, pp. 1113–1144.
14. Romantsev B.A., Skripalenko M.M., Skripalenko M.N., Chan Ba Khyui, Gladkov Yu.A., Gartvig A.A. Computer simulation of piercing in a four-high screw rolling mill. *Metallurgist*. 2018, vol. 61, no. 9-10, pp. 729–735.
15. Ammerling W.-J., Surmund J. *The KOCKS Rotation Mill (KRM): The Ideal Planetary Cross Rolling Process for Copper Tube Production*. Germany presented 29.10.2007 at the “DANIELI ECT™ Forum” in Buttrio, Italy.
16. Fu-jie Wang, Yuan-hua Shuang, Jiab-hua Hu, Qing-hua Wang, Jing-chao Sun. Explorative study of tandem skew rolling process for producing seamless steel tubes. *Journal of Materials Processing Technology*. 2014, vol. 214, no. 8, pp. 1597–1604.
17. Romanenko V.P., Zolotarev A.A., Sizov D.V. Romanenko V.P., Zolotarev A.A. Screw piercing of large-diameter billet in a two-roller mill. *Steel in Translation*. 2013, vol. 43, no. 5, pp. 249–253.
18. Romanenko V.P., Fomin A.V., Nikulin A.N. Effect of preliminary deformation of the cast semifinished product on the service properties of wheel steel. *Metallurgist*. 2013, vol. 57, no. 3-4, pp. 303–309.
19. Akopyan T.K., Aleshchenko A.S., Belov N.A. effect of radial-shear rolling on the formation of structure and mechanical properties of Al-Ni and Al-Ca aluminum-matrix composite alloys of eutectic type. *Physics of metals and metallography*. 2018, vol. 119, no. 3, pp. 241–250.
20. Gorbatyuk S.M. Screw-rolling mill design based on kinematic analysis. *Steel in Translation*. 2000, vol. 30, no. 9, pp. 52–55.

Information about the authors:

B.A. Romantsev, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair “Metal Forming” (boralr@yandex.ru)

E.A. Kharitonov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair “Metal Forming” (haritonov45@mail.ru)

A.S. Budnikov, Postgraduate of the Chair “Metal Forming” (fiar128@yandex.ru)

Le Van Chong, Student of the Chair “Metal Forming”

Chan Ba Khyui, Postgraduate of the Chair “Metal Forming” (tbh510@gmail.com)

Received July 17, 2018

Revised July 28, 2019

Accepted August 1, 2019

УДК 621.778.5:677.721

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИИ ПРОВОЛОК В МНОГОСЛОЙНОЙ ПРЯДИ ПРИ КРУГОВОМ КАЛИБРУЮЩЕМ ОБЖАТИИ

Харитонов В.А., к.т.н., профессор кафедры технологий обработки материалов
Иванцов А.Б., к.т.н., доцент кафедры металлургии и стандартизации (art.belor@yandex.ru)
Лантева Т.А., к.т.н., старший преподаватель кафедры метизного производства
и электроэнергетики

Магнитогорский государственный технический университет имени Г.И. Носова
(455000, Россия, Челябинская обл., Магнитогорск, пр. Ленина, 38)

Аннотация. Выявлен и обоснован механизм пластического обжатия пряди, как процесс образования арок: прочного свода проволок, появление каждого из которых приводит к смене напряженного состояния пряди на этапах обжатия. Установлено, что до появления первой арки наиболее приоритетными для деформирования, при исходном отсутствии боковых контактов, являются проволоки внешнего слоя и центральная проволока. После появления каждой арки напряжения в проволоках арочного слоя становятся преимущественно сжимающими, что временно, вплоть до образования арок во всех других слоях пряди, не позволяет данному слою активно деформироваться. После формирования всех арок проволоки верхнего слоя снова становятся наиболее приоритетными для деформирования. Центральная проволока пряди перенапряжена по отношению ко всем иным на всех этапах обжатия. Разработанная методика позволяет анализировать степень проработки каждой проволоки пряди при определенной величине обжатия, отображает особенности деформации многослойной пряди: резкий рост ширины вновь появившегося контакта при почти неизменной величине обжатия; образование арок; неодновременное появление новых контактов в слоях пряди, обусловленное ее геометрией и направлением смещения проволок. Применение предложенной методики позволяет проектировать рациональные конструкции прядей и канатов, подвергаемых малому и среднему круговому пластическому обжатию, а также определять необходимую величину обжатия пряди и канатов конкретной конструкции, исходя из условий сохранения гибкости каната и формирования требуемой геометрии контакта проволок. Установлено, что для пряди диаметром 7,68 мм конструкции 1 + 5 + 5/5 + 10 наиболее равномерная ее проработка и развитость контактов обеспечивается при обжатиях в диапазоне $3,74 < Q < 7,06 \%$. Интенсивное заполнение зазоров в пряди начинается при $Q = 7,06 \%$, что определяет последующую деформацию как предельную для канатов, работающих на изгиб, как по эксплуатационным характеристикам, так и по условиям работы круглого калибра роликовой волоки.

Ключевые слова: многослойная прядь, арочный слой, проволока, межпроволочный контакт, калибрующее обжатие, деформация, напряжение.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-691-697

Стальной канат – витое изделие, состоящее из большого количества проволок, работающих самостоятельно [1]. Начиная с середины прошлого века к технологии производства стальных круглопроволочных канатов, включающей свивку и силовую обработку проволоки, прядей и каната в целом (рихтовка, преформация, механико-термическая обработка и пр.), добавляется операция глубокого радиального пластического обжатия прядей, выполняемая способами волочения, обкатки, прокатки, или, что реже, ротационной ковкой [2 – 5]. Малое пластическое обжатие прядей обеспечивает контролируемое уплотнение свивки с получением конечного изделия высокой точности по диаметру, формированием межпроволочного полосового контакта, нейтрализацией свивочных напряжений.

Наибольшее распространение получил способ пластической деформации пряди в монолитной волоке. Использование данного инструмента позволяет производить глубокое деформирование прядей с коэффициентом заполнения сечения больше или равным единицы. Однако глубокое обжатие устраняет межпроволочный

зазор, ограничивая способность пряди к изгибу, увеличивает силу трения между контактирующими проволоками, усложняет их взаимное проскальзывание, уменьшает количество смазки в сокращающемся межпроволочном пространстве, что снижает эксплуатационную стойкость канатов из пластически обжатых прядей.

В конце XX в. руководителем Одесского научно-исследовательского отделения стальных канатов В.А. Малиновским предложен метод калибрующего обжатия, при котором одновременно формируются равномерное напряженное состояние прядей, благоприятная форма контакта проволок, высокая точность геометрии и плотная структура прядей с сохранением межпроволочного зазора [1].

Применению этого способа сегодня способствует наличие промышленно изготавливаемых роликовых волок, обеспечивающих возможность реализации режимов калибрующего обжатия и простую их установку на действующих канатных машинах.

В настоящее время проводятся исследования процесса калибрующего обжатия, связанные с поиском

рациональной степени деформации пряди в зависимости от условий эксплуатации каната [6 – 12], анализом напряженно-деформированного состояния прядей, оценкой и прогнозом эксплуатационных характеристик каната, в том числе с применением программного моделирования [13 – 21].

Оценка процесса обжатия пряди предполагает расчет энергосиловых параметров, в частности, передаваемого внутрь пряди давления (полного и удельного). Данный вопрос достаточно широко изучен в работах [22] (для процесса волочения пряди) и [23] (для процесса протяжки пряди в роликовых волокнах). Однако эти методики расчета не учитывают давление, передаваемое в тангенциальном направлении, изменение угла наклона контактных площадок при деформации, смещение контактных площадок и оказываются неприменимы для анализа промежуточных этапов формоизменения проволок при малых и средних обжатиях (коэффициент заполнения сечения пряди меньше 1,0). В связи с этим необходимо создание методики, позволяющей учитывать диапазон степеней обжатия, конструкцию пряди, расположение проволок в конкретном слое и др.

Целью данной работы является определение закономерностей протекания пластической деформации проволок в многослойной пряди при круговом калибрующем обжатии.

Реализация механизма рассмотрена на примере деформации многослойной пряди диаметром 7,68 мм конструкции 1 + 5 + 5/5 + 10 в сдвоенной трехроликовой волоке. Диаметры проволок по слоям пряди приведены ниже (в числителе указан номер слоя проволок в пряди, считая от центра; в знаменателе приведены диаметры проволок; проволоки диаметром 0,95 мм и 1,2 мм тех-

нологически относятся к одному слою, однако для удобства расчетов они выделены в два отдельных слоя):

$$\frac{1}{0,85} + \frac{2}{1,00} + \frac{3}{0,95} + \frac{4}{1,20} + \frac{5}{1,70}.$$

Данная прядь предназначена для дальнейшего пластического обжатия, поэтому у проволок слоев конструктивно заложено отсутствие боковых контактов в тангенциальном направлении, что определяет минимальное количество контактов и облегчает глубокую проработку пряди.

С применением программы Компас-3D в программном комплексе Deform осуществлено моделирование [20] процесса обжатия пряди конструкции 1 + 5 + 5/5 + 10 в трехроликовой волоке (рис. 1).

При обжатии пряди (рис. 1, а) на определенном этапе сближения проволок слоев происходит образование дополнительных боковых контактов (рис. 1, б) с получением из каждого слоя проволок свода в виде круговой замыкающейся на себя арочной конструкции.

Круговое обжатие в роликовой волоке формирует сжимающие усилия на всех контактах проволок пряди, что при образовании дополнительных контактов смещает картину напряжений в сечении проволоки к сжимающей «схеме главных нормальных напряжений».

До образования первого дополнительного контакта в слоях проволок наиболее нагруженной является центральная проволока (рис. 1, а). Всестороннее сжатие пятью контактами центральной проволоки повышает в сечении величину σ_i , что препятствует ее дальнейшей активной деформации до образования арок в других слоях пряди (рис. 1, б) с соответствующим возрастанием в их сечениях σ_i .

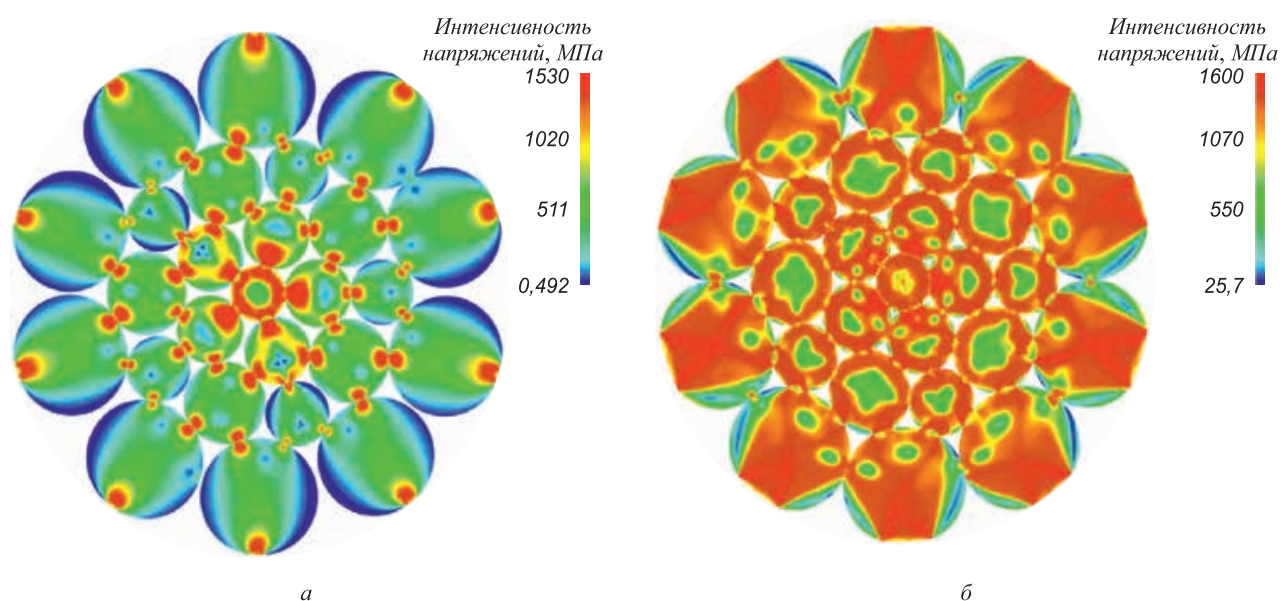


Рис. 1. Распределение интенсивности напряжений σ_i по слоям проволок пряди 1 ÷ 5 в начале (а) и в конце (б) обжатия

Fig. 1. Distribution of the stress intensity σ_i “Stress effective” on the layers of wire strands 1 ÷ 5 at the beginning (а) and at the end (б) of crimping

С применением уточненной методики расчета передачи давления внутрь пряди, с учетом ширины контакта проволок [24] и тангенциальной доли давления [25] при обжатии с коэффициентом заполнения сечения менее единицы, проведены расчеты радиального обжатия проволок и изменение ширины их контактных площадок. На основе расчетов получена диаграмма, отображающая механизм деформации пряди (рис. 2).

На рис. 2 кривая OK , соответствующая суммарной ширине контактной поверхности проволок верхнего слоя пряди, имеет продолжение в точках E (0,0761; 4,26) и Q (0,0955; 5,33).

Местный перегиб какой-либо кривой (например, точка B на рис. 2) соответствует образованию у проволоки новых контактов, что вызывает интенсивный рост ширины контактной поверхности проволоки при почти неизменной величине обжатия. Наличие двойного перегиба (подъема), который наиболее явно наблюдается на кривой изменения суммарной ширины контакта проволоки диаметром 1,70 мм (точки A и A_1 на рис. 2), определяется несимметричностью боковых контактов, неодновременностью их образования и кручением проволок.

Каждая «изолиния» (линия равного уровня) (см. рис. 2) представляет собой кривую зависимости суммарной ширины контактной поверхности отдельной проволоки от величины радиального обжатия пряди в данном слое проволок. Поэтому сумма значений координат всех точек, лежащих на «изолинии», проецированных на ось абсцисс, соответствует радиальному обжатию пряди в данный момент.

Форма кривой изолинии определяется приоритетностью деформации определенного слоя проволок по отношению к другим проволокам пряди, принципиально меняющейся при образовании новой арки. Характер изолинии в промежутке между образованием арок принципиально не меняется и подобен предшествующей форме, показанной на рис. 2. Заметим, что при постепенном заполнении межпроволочных пустот, интенсивность развития контактов в определенном слое начинает снижаться, несмотря на имеющуюся в нем приоритетность деформации. Это явление характерно, например, для центральной проволоки при обжатии $Q \leq 1,51$ %, несмотря на отсутствие боковых контактов проволок в верхних слоях пряди.

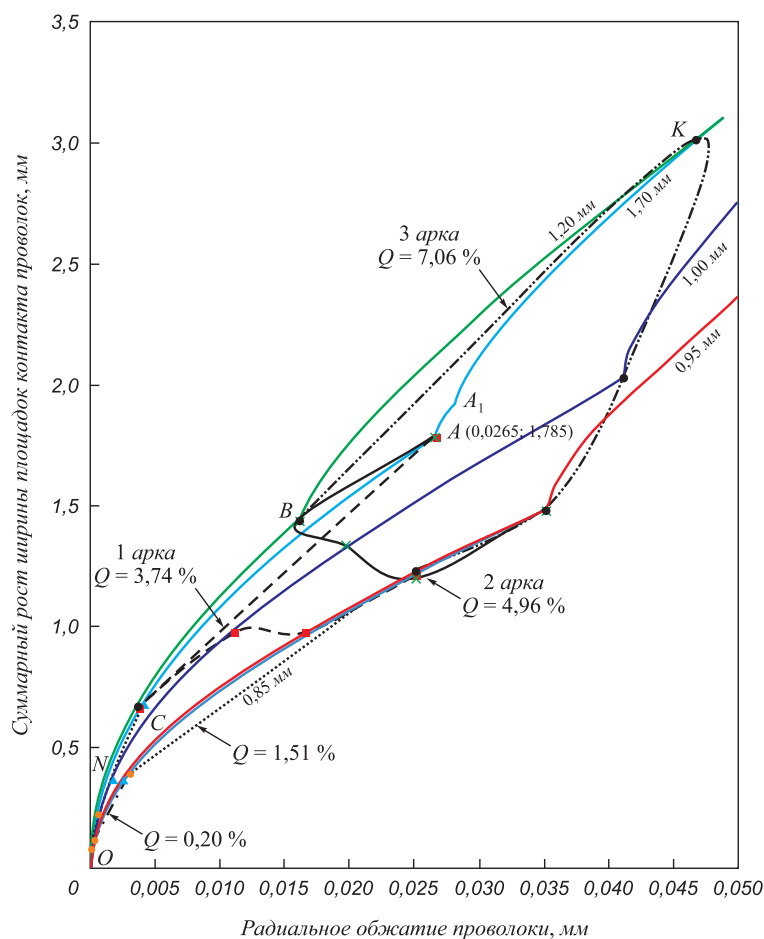


Рис. 2. Изолинии величин суммарной ширины контактов проволок в переходные стадии деформации и моменты формирования первой и второй арок

Fig. 2. Isolines of the values total width of the wire's contacts in transitional stages of deformation and at the moments of formation of the first and second arches

По данным диаграммы построено два графика, показывающих послойное изменение суммарной ширины межпроволочного контакта (рис. 3) и радиальное смещение проволок к центру пряди (рис. 4).

На рис. 3 и 4 цифрами от 2 до 5 отмечены характерные этапы деформации:

- 2а – снижение интенсивности роста ширины контактной поверхности центральной проволоки ($Q = 1,51\%$);
- 2б – образование арки во внешнем слое пряди ($Q = 3,74\%$);
- 3 – образование арок проволоками четвертого и третьего слоев ($Q = 4,96\%$);
- 4а – образование арки проволоками второго слоя ($Q = 7,06\%$);
- 4б – продолжение активной деформации всего сечения пряди ($Q = 11,01\%$);
- 5 – снижение интенсивности заполнения межпроволочных зазоров, начало объемной деформации пряди ($Q = 13,93\%$).

Анализ представленных графиков показывает, что первоначально при отсутствии боковых контактов проволок деформация пряди протекает по схеме осадки. Появление арки в каком-либо слое пряди блокирует деформацию проволок данного слоя до момента образования арок в других слоях пряди. На основе выявленного характера течения металла, процесс пластического обжатия пряди можно разделить на пять этапов, отличающихся особенностями формирования площадок и, соответственно, формами «изолиний», фиксирующих суммарную ширину всех площадок контакта каждой проволоки пряди при определенной степени деформации.

Первый этап деформации описывается участком кривой ON (см. рис. 2, $Q \leq 0,20\%$). Для этого этапа характерна изолиния в зоне пластических деформаций,

близкая к вертикальной. Формы кривых для всех проволок пряди на участке ON аналогичны. Данный этап деформации частично реализуется уже в обжимных плашках и в первом (калибрующем) проходе роликовой волоки. На начальном этапе деформации можно принять, что контакты между проволоками точечные. С увеличением обжатия все слои пряди активно деформируются, что приводит к резкому увеличению ширины межпроволочного контакта. Деформация по сечению пряди здесь практически равномерна, вне зависимости от размера и положения проволок.

Второй этап обжатия протекает с более интенсивным контактообразованием во внешнем и центральном слоях пряди, описывается участком кривой NCA (см. рис. 2) и диаграммами 2а, 2б (см. рис. 3 и 4) при $0,20 < Q \leq 4,96\%$. При наличии боковых контактов у проволок исходной пряди изолиния принимает форму наклоненной вперед кривой, определяющей преимущественную проработку внешних проволок. Этап отличается значительной неравномерностью деформации по сечению пряди. При интенсивном развитии площадок контакта центральной проволоки, определяемом отсутствием на данном этапе боковых контактов во всех вышележащих слоях, происходит быстрое заполнение межпроволочного зазора с проволоками второго слоя. При степени относительного обжатия $Q = 1,51\%$ рост контактных площадок центральной проволоки замедляется (см. рис. 4, диаграммы 2а и 3б) и в последующем будут изменяться только форма и кривизна контакта. Прекращение деформации пряди на данном этапе обжатия нецелесообразно в связи с наличием неблагоприятного напряженного состояния (пониженного уровня σ_i) в сечении проволок второго, третьего и четвертого слоев [20].

Третий этап деформации описывается участком кривой AK (см. рис. 2) ($4,96 < Q \leq 7,06\%$) и диаграм-

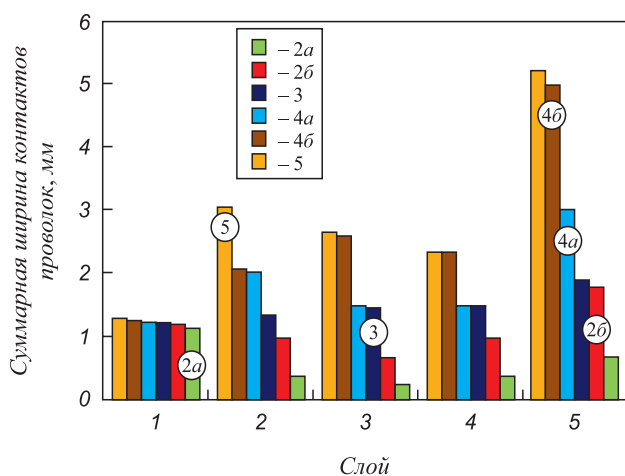


Рис. 3. Изменение суммарной ширины межпроволочного контакта по слоям пряди при обжатии

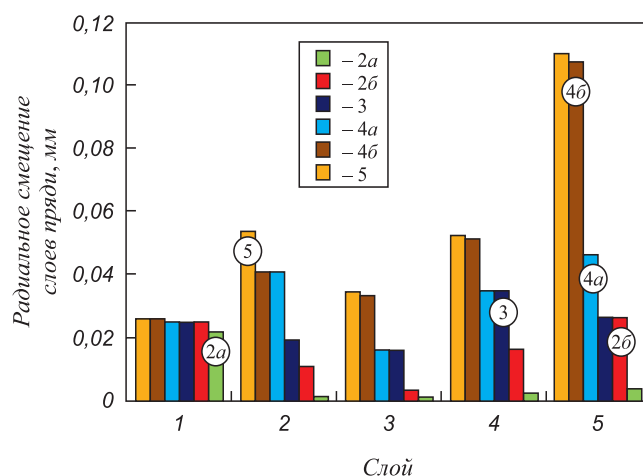


Рис. 4. Радиальное смещение слоев проволок к центру пряди при обжатии

Fig. 3. Change in total width of the interwire contact of strands during crimping

Fig. 4. Radial displacement of wires layers to the center of the strand during crimping

мами 3 (см. рис. 3, 4) и ограничивается появлением первой и последней арок. Для этапа характерна интенсивно и неравномерно меняющаяся по форме изолиния (см. рис. 2). Изолиния $Q = 3,74\%$ соединяет точки на кривых в момент образования арки в первом слое. Точка $A(0,0265; 1,785)$ соответствует условию образования первого контакта (первой арки) с последующим интенсивным ростом суммарной ширины контактов в пятом слое. Из-за изменения схемы главных нормальных напряжений в сторону всестороннего сжатия, проработка внешнего слоя пряди почти прекращается до реализации приоритета деформации в остальных слоях при достижении относительного обжатия $Q = 5,50\%$ (см. рис. 2).

Развитие контактной поверхности проволок внутренних слоев при $Q = 4,96\%$ (см. см. рис. 2) формирует арки между проволоками в четвертом и третьем слоях (см. рис. 3 и 4, диаграммы 3) еще до реализации деформации во внутренних слоях пряди. Таким образом, происходит приостановка интенсивной проработки уже трех внешних слоев пряди.

При $Q = 7,06\%$ (см. рис. 2) происходит образование последней арки во втором слое, что замедляет развитие контактной поверхности в данном слое. Одновременно проработка происходит в третьем – пятом слоях до реализации в них приоритета деформации при $Q = 11,01\%$.

Таким образом, формирование каждой арки временно блокирует активное развитие данного слоя до реализации деформации в других слоях пряди. По мере образования новых контактов деформация по сечению пряди распределяется все более равномерно.

Четвертый этап деформации начинается после образования арок во всех слоях пряди и описывается участком кривой KE (см. рис. 2) ($7,06 < Q \leq 13,93\%$) и диаграммами 4а и 4б (см. рис. 3 и 4). Для этого этапа характерно пересечение изолинией аналогичных участков кривых, что определяет монотонно убывающую по сечению пряди величину деформации. Деформация всех контактов проволок на данном этапе протекает до степени полного заполнения межпроволочных пустот, когда уже становится приоритетной деформация удлинения.

При обжатии $Q = 7,06\%$ межпроволочные зазоры четвертого слоя заполнены в среднем на 58 %, третьего – на 41 %, второго – на 56 % при критическом уровне заполнения $70 \div 75\%$ (переход к деформации удлинения пряди). При достижении стадии реализации приоритета деформации проволоками третьего – пятого слоев, при обжатии $Q = 11,01\%$ (см. рис. 3 и 4, диаграммы 4б) и начале деформации всех проволок пряди (за исключением центральной) достаточно прорабатываются только проволоки внешнего и второго слоев. Так, межпроволочные пустоты вокруг проволок пятого слоя заполнены в среднем уже на 60 %, второго – на 56 %, зазоры третьего и четвертого слоев заполнены на 86 %.

Пятый этап является верхней границей малых деформаций пряди и описывается участком кривой EQ (см. рис. 2) ($Q \geq 13,93\%$) и диаграммами 5 (см. рис. 3 и 4). По причине почти заверщенного заполнения межпроволочных пустот деформация из преимущественно плоской переходит в объемную. Далее характер деформации пряди по слоям уже не претерпевает принципиальных изменений. Прядь начинает деформироваться как монолит, что определяет переход к средним и глубоким обжатиям.

Из рис. 2 видно, что наиболее равномерная проработка пряди данной конструкции и развитость контактов обеспечивается при обжатиях в диапазоне $3,74 < Q < 7,06\%$. При меньшей степени деформации слабо проработаны центральные слои, при больших деформациях обжатие получает в основном внешний слой и, в меньшей степени, второй слой.

Данные расчета выявили последовательный порядок образования арок для данной конструкции пряди, начиная с верхнего слоя вглубь пряди. Этап образования арок для рассмотренной пряди происходил в достаточно узком диапазоне $3,74 < Q < 7,06\%$, что было обеспечено сближением проволок в каждом слое до начала бокового контактообразования.

Интенсивное заполнение зазоров в пряди начинается при $Q = 7,06\%$, что определяет последующую деформацию как предельную для канатов, работающих на изгиб, как по эксплуатационным характеристикам, так и по условиям работы круглого калибра роликовой волоки.

Выводы. Выявлен и обоснован механизм пластического обжатия пряди, представляющий собой многоэтапный процесс формирования замыкающихся на себя арочных сводов – несущих проволочных слоев, где образование каждого нового замкнутого контура проволок на этапах обжатия последовательно изменяет распределение напряженного состояния по радиусу пряди.

При условии изначального отсутствия боковых межпроволочных контактов в слоях пряди приоритетной является деформация центральной проволоки и внешнего повива, вплоть до образования первого арочного слоя. Во вновь образованных арочных слоях пряди, по причине увеличения количества контактов, формируются преимущественно сжимающие напряжения, что препятствует активной деформации проволок данного слоя, вплоть до окончания процесса смыкания арочных слоев всей пряди. При завершении процесса образования всех арочных слоев, верхний повив для деформирования вновь определяется как наиболее приоритетный. Относительно проволок, составляющих слои пряди, центральная проволока по параметру σ_i перенапряжена на всех этапах обжатия.

Разработана методика, позволяющая анализировать степень проработки каждой проволоки пряди при определенной величине обжатия. Методика выявляет особенности формоизменения проволок пряди: быстрое

увеличение ширины вновь образовавшегося межпроволочного контакта при незначительной пластической деформации; последующее формирование арочных сводов; возможность одновременного образования новых контактов между проволоками в одном слое, определяемое геометрией контакта с инструментом, конструкцией каната и вектором смещения центров проволок.

Применение предложенной методики позволяет проектировать рациональные конструкции прядей и канатов, подвергаемых малому и среднему круговому пластическому обжатию, а также определять необходимую величину обжатия пряди и канатов конкретной конструкции, исходя из условий сохранения гибкости каната и формирования требуемой геометрии контакта проволок.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Малиновский В.А. Стальные канаты. Ч. 1. – Одесса: Астропринт, 2001. – 188 с.
2. Wehking K., Ziegler S. Berechnung eines einfachen Seils mit FEM // Draht Magazine. 2003. No. 5. P. 32 – 36.
3. Haritonov V.A., Zaretsky L.M. Rolling for the production of plastically strained ropes and strands // Eurowire Magazine. 2004. No. 1. P. 100 – 101.
4. Пышняк О.А., Чаюн И.М. Влияние технологических напряжений на граничные состояния каната // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 8. – Одесса: Астропринт, 2010. С. 120 – 126.
5. Чаюн И.М., Пышняк О.А., Непомнящий А.В. Предварительное деформированное состояние спиральных канатов // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 8. – Одесса: Астропринт, 2013. С. 141 – 155.
6. Харитонов В.А., Лаптева Т.А. Выбор режимов деформации при обжатии многослойных канатов в трехроликовых волоках // Производство проката. 2013. № 8. С. 18 – 25.
7. Даненко В.Ф., Гуревич Л.М., Шаталин С.Ю., Кишечникова И.С. Повышение физико-механических и служебных свойств пластически обжатых стальных прядей и изготовленных из них канатов // Изв. ВолГТУ. 2015. № 8. С. 72 – 76.
8. Гуревич Л.М., Даненко В.Ф. Оптимизация параметров пластического обжатия стальных канатов с целью повышения физико-механических и служебных свойств // Изв. ВолГТУ. 2016. № 2. С. 78 – 83.
9. Даненко В.Ф., Гуревич Л.М. Влияние кругового пластического обжатия на напряженно-деформированное состояние стального каната одинарной свивки // Сталь. 2016. № 12. С. 58 – 62.
10. Даненко В.Ф., Гуревич Л.М., Кушкина Е.Ю., Гладских Э.Б. О расширении области применения пластически обжатых спиральных прядей и изготовленных из них канатов // Изв. вуз. Черная металлургия. 2016. Т. 59. № 11. С. 764 – 772.
11. Zhang Min, Kou Zi-ming. Duo chuan xin gangsi sheng yingli yingbian fenbu yanjiu // Meitan jishu = Coal Technol. 2016. Vol. 35. No. 1. P. 255 – 258.
12. Скалацкий В.К., Емельянов В.Г. Определение оптимальных условий процесса пластического обжатия прядей // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 8. – Киев: Техника, 1971. С. 104 – 113.
13. Чаюн И.М., Чаюн М.И. Метод конечных элементов в исследовании деформированного и напряженного состояния канатов // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 2. – Одесса: Астропринт, 2001. С. 24 – 34.
14. Vilceanu Lucia, Babeu Tiberiu Dimitrie, Ghita Eugen. Численный анализ расчета срока службы проволочных канатов методом конечных элементов // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 3. – Одесса: Астропринт, 2003. С. 95 – 100.
15. Патарая Д., Нозадзе Г. и др. Компьютерное моделирование и расчет канатной системы кольцевых канатных дорог // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 7. – Одесса: Астропринт, 2009. С. 153 – 161.
16. Патарая Д., Нозадзе Г. О моделировании передачи усилия в системе приводной шкив – канат // Стальные канаты: Сб. науч. тр. Вып. 7. – Одесса: Астропринт, 2009. С. 217 – 222.
17. Даненко В.Ф., Гуревич Л.М., Проничев Д.В., Трунов М.Д. Компьютерное моделирование при проектировании процесса кругового обжатия грозозащитного троса с оптическим модулем // Изв. ВолГТУ. 2015. № 8. С. 97 – 102.
18. Ren Zhiqian, Yu Zongyue, Chen Xun. Model for taking into account the effect of elastoplastic damages on the strength of a wire rope // Jixie gongcheng xuebao = J. Mech. Eng. 2017. 53. No. 1. P. 121 – 129.
19. Jiao Ai-sheng, Liu Li-mei, Yan Hui-ping. Modeling the choice of parameters of steel ropes Warrington // Meikuang jixie = Coal Mine Mach. 2016. Vol. 37. No. 1. P. 236 – 238.
20. Харитонов В.А., Иванцов А.Б., Лаптева Т.А. Моделирование напряженного состояния пряди при калибрующем обжатии в роликовой волоке // Черная металлургия. Бюл. ин-та «Черметинформация». 2016. № 9. С. 90 – 94.
21. Малиновский В.А. Стальные канаты. Ч. 2. – Одесса: Астропринт, 2002. – 180 с.
22. Глушко М.Ф. Стальные подъемные канаты. – Киев: Техника, 1966. – 328 с.
23. Бирюков Б.А. Исследование и разработка технологии пластического деформирования проволочных прядей в роликовой волоке: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. – Магнитогорск, 1974. – 20 с.
24. Харитонов В.А., Лаптева Т.А. Методика определения контактных площадок при малом обжатии прядей // Изв. вуз. Черная металлургия. 2012. № 4. С. 66 – 67.
25. Харитонов В.А., Лаптева Т.А. Расчет распределения деформаций по сечению пряди при круговом обжатии // Вестник МГТУ им. Носова. 2012. № 4. С. 47 – 51.

Поступила в редакцию 9 июля 2018 г.

После доработки 15 августа 2019 г.

Принята к публикации 2 сентября 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 691–697.

REGULARITIES OF DISTRIBUTION OF WIRE DEFORMATION IN MULTILAYERED STRAND AT CIRCULAR CALIBRATION COMPRESSION

V.A. Kharitonov, A.B. Ivantsov, T.A. Lapteva

Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Chelyabinsk Region, Russia

Abstract. The mechanism of plastic crimping of the strand has been identified and justified, as the process of formation of arches: a strong arch

of wires, the appearance of each leads to a change in stressed state of the strand at reduction stages. It was established that before appearance of the first arch, wires of the outer layer and the central wire are the most priority to deformation, with the initial absence of side contacts. After appearance of each arch, stresses in wires of the arch layer become predominantly compressive, which temporarily prevents the given layer from actively deforming, up to the formation of arches in

all other layers of the strand. After formation of all arches, wires of the upper layer again become the most priority to deformation. Central wire of the strand is overstrained in relation to all other wire strands at all stages of compression. The developed technique allows analyzing the degree of working out of each wire of a lock at a certain amount of reduction. It reflects the features of a multilayered strand deformation: sharp increase in width of the newly appeared contact at almost constant reduction; arches formation; non-simultaneous occurrence of new contacts in layers of strands due to the geometry of the strand and direction of the wires displacement. Application of the proposed technique allows to make rational designs of strands and ropes subjected to small and medium circular plastic crimping, as well as to determine the necessary amount of compression of strands and ropes of a particular design, proceeding from the conditions for retaining the flexibility of the rope and forming the required contact geometry of the wires. It was found that for strands with a diameter of 7.68 mm in the construction of 1 + 5 + 5/5 + 10, the most uniform development of the strand and the contacts is ensured during the reduction in the range of $3.74 < Q < 7.06$ %. Intensive filling of the gaps in the strand begins at $Q = 7.06$ %, which determines the subsequent deformation as the limiting for the ropes working on bending both for performance characteristics and for the conditions of operation of the round caliber of a roller die.

Keywords: multilayer strand, arched layer, wire, interwire contact, calibrating compression, deformation, stress.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-691-697

REFERENCES

1. Malinovskii V.A. *Stal'nye kanaty. Ch. 1* [Steel ropes. Part 1]. Odessa: Astroprint, 2001, 188 p. (In Russ.).
2. Wehking K., Ziegler S. Berechnung eines einfachen Seils mit FEM. *Draht Magazine*. 2003, no. 5, pp. 32–36.
3. Haritonov V.A., Zaretsky L.M. Rolling for the production of plastically strained ropes and strands. *Eurowire Magazine*. 2004, no. 1, pp. 100–101.
4. Pyshnyak O.A., Chayun I.M. Influence of technological stresses on boundary conditions of the rope. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 8* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 8]. Odessa: Astroprint, 2010, pp. 120–126. (In Russ.).
5. Chayun I.M., Pyshnyak O.A., Nepomnyashchii A.V. Preliminary deformed state of spiral ropes. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 8* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 8]. Odessa: Astroprint, 2013, pp. 141–155. (In Russ.).
6. Kharitonov V.A., Lapteva T.A. Choice of deformation modes during crimping of multilayer ropes in three-roll drawing dies. *Proizvodstvo prokata*. 2013, no. 8, pp. 18–25. (In Russ.).
7. Danenko V.F., Gurevich L.M., Shatalin S.Yu., Kischechnikova I.S. Increase of physico-mechanical and service properties of plastically crimped steel strands and ropes made of them. *Izv. VolGTU*. 2015, no. 8, pp. 72–76. (In Russ.).
8. Gurevich L.M., Danenko V.F. Optimization of the parameters of plastic crimping of steel ropes for the purpose of increasing the physico-mechanical and service properties. *Izv. VolGTU*. 2016, no. 2, pp. 78–83. (In Russ.).
9. Danenko V.F., Gurevich L.M. Effect of circular plastic crimping on the stress-strain state of a single rope steel rope. *Stal'*. 2016, no. 12, pp. 58–62. (In Russ.).
10. Danenko V.F., Gurevich L.M., Kushkina E.Yu., Gladskikh E.B. Extension of the scope of steel compacted strands and ropes made of them. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2016, vol. 59, no. 11, pp. 764–772. (In Russ.).
11. Zhang Min, Kou Zi-ming. Duo chuan xin gangsi sheng yingli yingbian fenbu yanjiu. *Meitan jishu = Coal Technol.* 2016, vol. 35, no. 1, pp. 255–258. (In Chin.).
12. Skalatskii V.K., Emel'yanov V.G. Determination of optimal conditions for the process of plastic crimping of strands. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 8* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 8]. Kiev: Tekhnika, 1971, pp. 104–113. (In Russ.).
13. Chayun I.M., Chayun M.I. Method of finite elements in the study of deformed and stressed state of ropes. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 2* [Steel ropes: sb. sci. pap. Issue 2]. Odessa: AstroPrint, 2001, pp. 24–34. (In Russ.).
14. Vilceanu Lucia, Babeu Tiberiu Dimitrie, Ghita Eugen. Numerical analysis of calculation of wire ropes lifetime by the finite element method. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 3* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 3]. Odessa: AstroPrint, 2003, pp. 95–100. (In Russ.).
15. Pataraya D., Nozadze G. etc. Computer modeling and calculation of the cable system of ring cableways. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 7* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 7]. Odessa: AstroPrint, 2009, pp. 153–161. (In Russ.).
16. Pataraya D., Nozadze G. On simulation of force transfer in the drive pulley-rope system. In: *Stal'nye kanaty: sb. nauch. tr. Vyp. 7* [Steel ropes: coll. of sci. papers. Issue 7]. Odessa: AstroPrint, 2009, pp. 217–222. (In Russ.).
17. Danenko V.F., Gurevich L.M., Pronichev D.V., Trunov M.D. Computer simulation in designing the process of circular reduction of a lightning-proof cable with an optical module. *Izv. VolGTU*. 2015, no. 8, pp. 97–102. (In Russ.).
18. Ren Zhiqian, Yu Zongyue, Chen Xun. Model for taking into account the effect of elastoplastic damages on the strength of a wire rope. *Jixie gongcheng xuebao = J. Mech. Eng.* 2017, vol. 53, no. 1, pp. 121–129.
19. Jiao Ai-sheng, Liu Li-mei, Yan Hui-ping. Modeling the choice of parameters of steel ropes Warrington. *Meikuang jixie = Coal Mine Mach.* 2016, vol. 37, no. 1, pp. 236–238.
20. Kharitonov V.A., Ivantsov A.B., Lapteva T.A. Modeling the stressed state of the strand with a calibrated reduction in a roller die. *Chernaya metallurgiya. Byul. in-ta "Chermetinformatsiya"*. 2016, no. 9, pp. 90–94. (In Russ.).
21. Malinovskii V.A. *Stal'nye kanaty. Ch. 2* [Steel ropes. Part 2]. Odessa: Astroprint, 2002, 180 p. (In Russ.).
22. Glushko M.F. *Stal'nye pod'emnye kanaty* [Steel hoisting ropes]. Kiev: Tekhnika, 1966, 328 p. (In Russ.).
23. Biryukov B.A. *Issledovanie i razrabotka tekhnologii plasticheskogo deformirovaniya provolochnykh pryadei v rolkovoi voloke: Avtoref. dis. ... kand. tekhn. nauk* [Research and development of the technology of plastic deformation of wire strands in a roller die: Extended Abstract of Cand. Sci. Diss.]. Magnitogorsk, 1974, 20 p. (In Russ.).
24. Kharitonov V.A., Lapteva T.A. The methods of determining the width of wires contact with small strands reduction. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2012, no. 4, pp. 66–67. (In Russ.).
25. Kharitonov V.A., Lapteva T.A. Calculation of the distribution of deformations along the cross section of a strand under circular compression. *Vestnik MGTU im. Nosova*. 2012, no. 4, pp. 47–51. (In Russ.).

Information about the authors:

V.A. Kharitonov, Cand. Sci. (Eng.), Professor of the Chair "Materials Processing Technologies"

A.B. Ivantsov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair "Metallurgy and Standardization" (art.belor@yandex.ru)

T.A. Lapteva, Cand. Sci. (Eng.), Senior Lecturer of the Chair of Hardware Production and Electrical Energy Industry

Received July 9, 2018

Revised August 15, 2019

Accepted September 2, 2019

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЕТАНДЕР-ГЕНЕРАТОРНОГО АГРЕГАТА НА ТЭЦ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО КОМБИНАТА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ЭЛЕКТРОЭНЕРГИИ И ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ КОМПРЕССОРНОЙ УСТАНОВКИ*

Клименко А.В., академик РАН, д.т.н., главный научный сотрудник
Агабабов В.С., д.т.н., профессор кафедры тепловых электрических станций
Корягин А.В., к.т.н., доцент кафедры теплообменных процессов
и установок (korjaginav@yandex.ru)

Петин С.Н., к.т.н., доцент кафедры энергетики высокотемпературной технологии
Борисова П.Н., аспирант кафедры тепловых электрических станций

Национальный исследовательский университет «МЭИ» (Московский энергетический институт)
(111250, Россия, Москва, Красноказарменная ул., 14)

Аннотация. Рассмотрена возможность экономии энергоресурсов при производстве сжатого воздуха – одного из самых энергозатратных производств, в котором теряется значительная часть используемой энергии. Предлагаемое техническое решение основано на совместном применении двух энергосберегающих технологий: первая из них – использование технологического перепада давления транспортируемого природного газа, безвозвратно теряемого при его дросселировании на газорегуляторных пунктах предприятий, вторая – это охлаждение воздуха перед секциями компрессора для уменьшения работы сжатия. Предложена схема установки для комбинированной паровоздуходувной и электрической станции металлургического предприятия, в которой в дополнение к генерирующей электроэнергию и тепло энергетической турбине и вырабатываемому сжатый воздух двухсекционному компрессору с паротурбинным приводом используется двухступенчатый детандер-генераторный агрегат (ДГА), вырабатывающий электроэнергию и холод. Рассмотрена термодинамика процессов расширения газа в детандере, обоснован выбор двухступенчатой схемы. Вырабатываемый в ДГА холод используется для понижения температуры воздуха на входе в первую и вторую секции компрессора, что позволяет снизить расход топлива на сжатие воздуха. Применение предлагаемой схемы позволяет снизить расход топлива на привод компрессора. Полезно использовать теплоту сжатого воздуха для подогрева транспортируемого газа перед ступенями детандера и вырабатывать дополнительно электроэнергию. При этом для выработки электроэнергии не расходуется топливо, а теплота охлаждаемого воздуха не сбрасывается в окружающую среду, т. е. работа установки характеризуется высокими экологическими показателями. Приводится порядок расчета экономии топлива при применении предлагаемой схемы. Проведенная оценка показала, что использование данной схемы позволяет при расходе газа около 200 тыс. $\text{м}^3/\text{ч}$, давлении газа перед газорегуляторными пунктами 0,7 МПа и требуемом давлении воздуха 0,5 МПа уменьшить потребление топлива на теплоэлектроцентрали паровоздуходувной станции на 11,2 тыс. т у.т./год, что составляет 0,84 %. Вырабатываемая электрическая мощность ДГА при этом составит 5,3 МВт.

Ключевые слова: двухступенчатый компрессор, двухступенчатый детандер-генераторный агрегат, совмещенное производство электроэнергии, холода и сжатого воздуха, охлаждение воздуха перед секциями компрессора, подогрев газа в детандер-генераторном агрегате, использование вторичных энергетических ресурсов, высокие термодинамические и экологические показатели работы, порядок расчета эффективности.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-698-704

Одним из наиболее энергозатратных производств является черная металлургия. Ее доля в общем потреблении первичных энергоносителей (топлива) в России доходит до 9 %, из которых 28 – 30 % приходится на природный газ.

* Статья подготовлена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по государственному заданию в рамках конкурсного отбора научных проектов, выполняемых научными коллективами исследовательских центров и научных лабораторий образовательных организаций высшего образования (заявка № 13.3233.2017/ПЧ1) и при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ в рамках получения стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам по научному проекту № СП-1141.2018.1.

Так, например, расход природного газа на Магнитогорском металлургическом комбинате при годовом объеме производства металлопродукции 11,2 млн т составляет 3,88 млрд м^3 [1]. При этом основными потребителями природного газа являются теплоэлектроцентрали паровоздуходувной станции – 47,7 % (211,3 тыс. $\text{м}^3/\text{ч}$), доменный цех – 26,2 % (101 656 $\text{м}^3/\text{ч}$), листопрокатное производство – 10,8 % (41 904 $\text{м}^3/\text{ч}$), сталеплавильные цеха – 4 % (15 520 $\text{м}^3/\text{ч}$) [2].

Помимо природного газа в технологических процессах на металлургических предприятиях требуются значительные объемы произведенных энергоносителей, в том числе сжатого воздуха, на генерацию которого

расходуется большое количество первичного топлива. По данным [2, 3], на производство сжатого воздуха уходит до 5–7 % общего энергопотребления металлургического предприятия. Согласно показателям, приведенным в работе [3], удельные расходы энергии на производство сжатого воздуха составляют от 80 до 140 кВт·ч/1000 м³ (в зависимости от типа компрессоров, условий охлаждения и эксплуатации) при использовании электропривода и 17–20 кг у.т./1000 м³ при паротурбинном приводе компрессоров. При этом для производства одной тонны металлопродукции (стального листа) требуется в среднем около 1375 кг сжатого воздуха [4] с давлением 0,60–0,75 МПа.

Для генерации сжатого воздуха на металлургических предприятиях применяются, как правило, многосекционные компрессорные установки с турбоприводом. При этом для снижения затрат энергии на компрессорных установках используется система охлаждения подаваемого на сжатие воздуха перед секциями компрессора. Получение холода могут обеспечивать различные устройства. В первую очередь это работающие в режиме холодильной машины термотрансформаторы парокомпрессионного (ПКТТ) и абсорбционного (АБТТ) типов, однако для обеспечения их работы необходимы электроэнергия или тепло соответственно. Тепло от сжатого в секциях компрессора воздуха отводится обычно в градирнях в окружающую среду и полезно не используется.

В то же время, известны технические решения, в которых для генерации холода используются детандер-генераторные агрегаты (ДГА).

Идея использования ДГА для получения холода не нова. Еще в 1939 г. появилась статья академика П.Л. Капицы, в которой предлагалось использовать ДГА для получения низких температур. Затем, уже в пятидесятые годы XX в., академик М.Д. Миллионщиков предложил использовать энергию избыточного давления транспортируемого природного газа для получения электрической энергии. Обоснованием этому было то обстоятельство, что в существующих системах газоснабжения перед использованием газа в различных отраслях промышленности предусматривается понижение его давления по сравнению с давлением в магистральных газопроводах. Обычно это происходит путем простого дросселирования на газораспределительных станциях (ГРС) и затем на газорегуляторных пунктах (ГРП). При традиционно применяемом для уменьшения давления газа дросселировании механическая энергия избыточного давления транспортируемого потока газа теряется. Именно этот потенциал избыточной энергии давления может быть полезно использован за счет применения вместо дросселирующих устройств детандер-генераторных агрегатов [5]. При расширении газа в детандере потенциальная энергия избыточного давления потока преобразуется в механическую работу, которая, в свою очередь, преобразуется в электрическую энер-

гию в соединенном с детандером электрогенераторе. Кроме того, при расширении в детандере температура потока газа уменьшается значительно больше, чем при дросселировании, и может достигать достаточно низких значений, что позволяет использовать поток газа не только для генерации электроэнергии, но и как источник холода.

Тематика, связанная с использованием ДГА не только для генерации электроэнергии, но и для генерации так же тепла и холода, получила определенное развитие в последние годы. Достаточно упомянуть в качестве примера работы [6–16]. Часть из них, например [6], из опубликованных в 2003 и 2004 г., была посвящена использованию ДГА-технологии именно на металлургических предприятиях. Авторы всех упомянутых статей придерживались единой точки зрения: применение на станциях технологического уменьшения давления транспортируемого газа детандер-генераторной технологии термодинамически достаточно эффективно, так как позволяет полезно использовать теряемый при дросселировании потенциал механической энергии потока газа.

В настоящей статье предложена схема установки на базе детандер-генераторной технологии, позволяющая не только генерировать дополнительную электроэнергию, но и повысить эффективность производства сжатого воздуха. Установка сочетает в себе многосекционный (в данном случае – двухсекционный) компрессор и многоступенчатый (в рассматриваемом случае – также двухступенчатый) ДГА. Назначением компрессора является генерация сжатого воздуха для использования в технологиях, а установленный на газорегуляторном пункте предприятия и предназначенный для генерации дополнительной электроэнергии детандер-генераторный агрегат используется также для дополнительного охлаждения сжимаемого воздуха перед секциями компрессора с целью уменьшения необходимых затрат энергии на его привод.

Схема установки приведена на рис. 1. Ее основными элементами являются компрессорная установка, детандер-генераторный агрегат и три теплообменника. В состав ДГА входят две последовательно включенные ступени детандера: первая 6 и вторая 7, а также электрогенератор 8. Компрессорная установка содержит две последовательно включенные секции компрессора: первую 22 и вторую 21, а также используемую для привода компрессора паровую турбину 24 с конденсатором 25. Теплообменник 26 является штатным, изначально относящимся к компрессорной установке, и предназначен для промежуточного охлаждения сжимаемого воздуха между первой 22 и второй 21 секциями компрессора. Для охлаждения поступающего в теплообменник 26 по линии 18 после первой ступени 22 компрессора сжатого воздуха используется градирная система (на схеме рис. 1 не указана). Теплообменники 13 и 16 являются дополнительными, относящимися

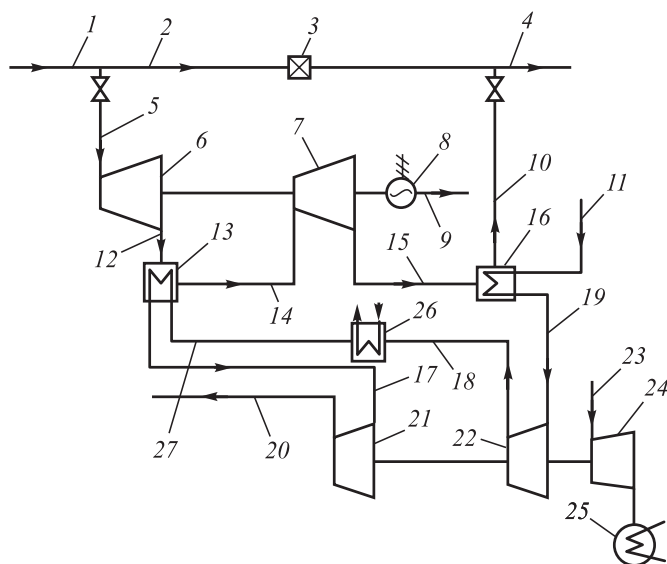


Рис. 1. Схема двухсекционной компрессорной установки с турбоприводом

Fig. 1. Scheme of two-section compressor unit with a turbo drive

как к компрессорной, так и детандерной частям установки. Теплообменник 13 используется для дополнительного снижения температуры поступающего в него после штатного теплообменника 26 по линии 27 воздуха с одновременным нагревом газа промежуточного давления, направляемого в него из детандера 6 первой ступени ДГА по линии 12. Из теплообменника 13 газ во вторую ступень 7 детандера отводится по линии 14, а воздух во вторую ступень 21 компрессора – по линии 17. Назначением второго по ходу газа теплообменника (позиция 16) является уменьшение температуры поступающего в него по линии 11 воздуха с одновременным подогревом газа, направляемого в этот теплообменник из детандера 7 второй ступени ДГА и отводимого из него по линии 10 в линию 4 отвода газа низкого давления из ГРП потребителям.

Принцип действия установки заключается в следующем.

Поток газа высокого давления, поступающий на станцию технологического уменьшения давления транспортируемого газа по линии 1, разделяется на две части. Одна из частей потока газа высокого давления по линии 5 направляется в первую ступень 6 детандера ДГА. Вторая часть газа высокого давления по линии 2 направляется к дросселирующему устройству 3, где его давление уменьшается до необходимого по условиям эксплуатации газоиспользующего оборудования. Затем поступает в линию 4 отвода газа низкого давления из ГРП потребителям. Тем самым осуществляется возможность регулирования при необходимости расхода газа, направляемого на ДГА.

Поток газа, часть потенциальной энергии которого в детандере первой ступени 6 преобразуется в механическую работу, в результате чего его давление снижает-

ся до промежуточного значения, а температура уменьшается, отводится из детандера первой ступени 6 по линии 12 в теплообменник 13. В этот же теплообменник по линии 27 направляется поток воздуха из теплообменника 26, поступающий сюда после первой секции 22 компрессора. В теплообменнике 13 происходит охлаждение потока воздуха, после чего этот поток по линии 17 поступает во вторую секцию 21 компрессора, где производится его окончательное сжатие до необходимого давления. Поток сжатого воздуха отводится из второй секции 21 компрессора по линии 20 потребителям. Из теплообменника 13 поток газа направляется во вторую ступень детандера 7, где часть потенциальной энергии потока газа преобразуется в механическую работу. В результате его давление снижается до необходимого по условиям эксплуатации газопотребляющего оборудования значения, а температура уменьшается. Из второй ступени детандера 7 газ по линии 15 отводится в теплообменник 16, куда по линии 11 подводится также поток воздуха с начальным давлением и температурой более высокой, чем температура потока газа на входе в теплообменник 16. В результате теплообмена температура воздуха уменьшается, а температура газа увеличивается. Из теплообменника 16 газ по линии 10 отводится в линию 4 отвода газа низкого давления из ГРП потребителям, а воздух по линии 19 поступает в первую секцию компрессора 22.

Механическая работа, произведенная потоком газа в первой 6 и второй 7 ступенях детандера ДГА, в генераторе 8 ДГА преобразуется в электроэнергию, которая по линии 9 поставляется потребителям.

Для привода компрессора в схеме предусмотрена паровая турбина 24, пар в которую поступает по линии 23, а конденсат отводится в конденсатор 25.

Необходимо отметить, что похожее техническое решение, в котором уменьшение давления потока топливного газа от 4,5 – 6,5 МПа до необходимых по технологии 1,5 – 2,5 МПа, производилось не в дросселирующем устройстве, а в детандере ДГА, описано в работе [9]. При этом имеющий на выходе из детандера низкую температуру поток топливного газа использовался для охлаждения части компримированного потока на компрессорной станции в системе газоснабжения. Тем не менее, предлагаемая в настоящей работе схема установки и ее назначение отличаются от схемы и назначения установки, описанной в работе [9]. Так, в схеме установки на рис. 1 рассматриваются две технологии: сжатие воздуха в многосекционном воздушном компрессоре и генерация электроэнергии в многоступенчатом детандер-генераторном агрегате. Для обеспечения эффективной работы компрессора требуется охлаждать поток воздуха на входе в его секции, что требует определенных затрат энергии на генерацию холода. Для обеспечения допустимых температурных режимов работы ДГА (температура газа на выходе детандера не должна быть ниже минус 10 °С [17]) необходимо по-

догревать газ либо перед ступенями, либо после ступеней ДГА, что требует затрат тепла. В рассматриваемой установке бросовые вторичные энергоносители одной технологии могут полезно использоваться в другой технологии. Совмещение двух технологий в предлагаемой установке позволяет рассматривать их как взаимодополняемые по энергоиспользованию.

В приведенной на рис. 1 схеме используется двухступенчатый детандер-генераторный агрегат. При такой схеме ДГА температура газа на выходе из ступеней детандера при одинаковых давлениях газа на входе и выходе ГРП оказывается гораздо выше, чем при одноступенчатом детандере. Для пояснения сказанного на рис. 2 в $h-s$ диаграмме показаны процессы, происходящие с потоком газа в одноступенчатом и многоступенчатом (в данном случае – двухступенчатом) детандерах.

Процессы в $h-s$ диаграмме на рис. 2 построены при следующих условиях:

- газ перед первой ступенью детандера не подогревается;
- подогревы газа перед второй ступенью детандера и перед газопроводом низкого давления производятся до температуры, при которой энтальпия газа равна энтальпии газа перед первой ступенью.

Так, процесс 1 – 2 соответствует расширению газа в одноступенчатом детандере от давления на входе $p_{\text{вх}}$ до давления на выходе $p_{\text{вых}}$. Процессы 1 – 4 и 5 – 6 соответствуют расширению газа в двух последовательно включенных ступенях детандера: процесс 1 – 4 в первой ступени от давления на входе в первую ступень $p_{\text{вх}}$ до промежуточного давления $p_{\text{пром}}$ между ступенями детандера; процесс 5 – 6 от давления на входе во вторую ступень $p_{\text{пром}}$ до давления $p_{\text{вых}}$ на выходе из второй ступени. Из приведенной диаграммы ясно, что при двухступенчатой схеме необходим подогрев газа между ступенями детандера. В приведенной на рис. 2 диаграмме подогреву газа, вышедшего из первой ступени детандера, соответствует процесс 2 – 3.

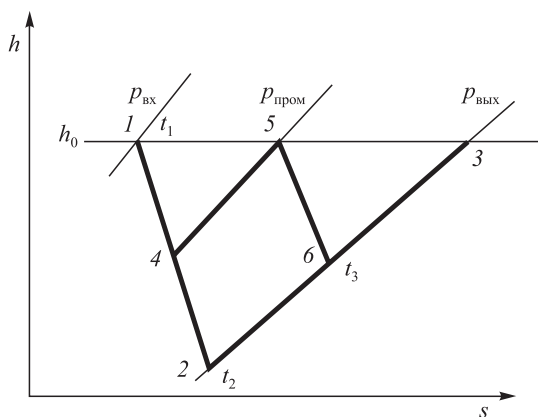


Рис. 2. Процессы в одноступенчатом (1 – 2 – 3) и двухступенчатом (1 – 4 – 5 – 6 – 3) детандерах

Fig. 2. Processes in single-stage (1 – 2 – 3) and two-stage expanders (1 – 4 – 5 – 6 – 3)

пени детандера, соответствует процесс 4 – 5. Чтобы исключить воздействие применения ДГА на показатели работы газопотребляющего оборудования, для обеспечения постоянства энтальпии направляемого потребителям потока газа может применяться также и подогрев потока газа, выходящего из последней, в данном случае второй, ступени детандера (процесс 6 – 3 на диаграмме рис. 2).

Таким образом, сумма разностей энтальпий на рис. 2 $[(h_1 - h_4) + (h_5 - h_6)]$ соответствует механической мощности, генерируемой первой и второй ступенями детандера, а сумма $[(h_5 - h_4) + (h_3 - h_6)]$ – холодильной мощности, которая может быть получена при охлаждении воздуха перед секциями компрессора (при нагреве потока газа после ступеней детандера).

При определении термодинамической эффективности предлагаемой установки было принято, что $h_1 = h_3 = h_5$ и $h_4 = h_6$. При таком условии генерируемые в ступенях детандера потоками газа холод Q_x и механическая работа $N_{\text{ДГАМ}}$ будут равны ($Q_x = N_{\text{ДГАМ}}$). Кроме того, было учтено, что включение в схему двух дополнительных теплообменников 13 и 16 увеличивает сопротивление по прокачке теплоносителей и требует определенных затрат энергии.

Холодильная мощность, которая может быть получена, определяется выражением

$$Q_x = B_T [(h_5 - h_4) + (h_3 - h_6)],$$

а механическая $N_{\text{ДГАМ}}$ мощность ДГА составит

$$N_{\text{ДГАМ}} = B_T [(h_1 - h_4) + (h_5 - h_6)].$$

Электрическая $N_{\text{ДГАЭ}}$ мощность ДГА может быть определена из уравнения [18]

$$N_{\text{ДГАЭ}} = \frac{k_r}{k_r - 1} R_T \left\{ T_{r1} \left[1 - \left(\frac{p_2^r}{p_1^r} \right)^{\frac{k_r - 1}{k_r}} \right] \eta_{\text{ДГА1}} + T_{r2} \left[1 - \left(\frac{p_4^r}{p_3^r} \right)^{\frac{k_r - 1}{k_r}} \right] \eta_{\text{ДГА2}} \right\} \eta_r B_T \alpha, \quad (1)$$

где k_r , R_T – показатель адиабаты и газовая постоянная природного газа; T_{r1} , T_{r2} – температура газа перед первой и второй ступенями турбодетандера; p_1^r , p_2^r , p_3^r , p_4^r – давление газа до и после первой и второй ступени турбодетандера; B_T – расход газа; α – доля газа, проходящая через турбодетандер; $\eta_{\text{ДГА1}}$, $\eta_{\text{ДГА2}}$ – КПД первой и второй ступеней детандера; η_r – КПД электрогенератора.

Из уравнения теплового баланса можно определить, что полученным количеством холода можно уменьшить температуру воздуха перед каждой из двух секций компрессора на Δt градусов:

$$\Delta t = \frac{Q_x \eta_{\text{тр}}}{2G_b c_p}, \quad (2)$$

где G_b , c_p – расход и теплоемкость воздуха в компрессоре; $\eta_{\text{тр}}$ – коэффициент, учитывающий потери холода при транспортировке.

При охлаждении компримируемого воздуха на Δt градусов перед каждой секцией компрессора уменьшение мощности ΔN_k , требуемой для привода компрессора, составит [18]:

$$\Delta N_k = \frac{k}{k-1} R \Delta t \left[\frac{\left(\frac{p_2}{c_{\text{то1}} p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1}{\eta_{k1}} + \frac{\left(\frac{p_4}{c_{\text{то2}} p_3} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1}{\eta_{k2}} \right] G_b, \quad (3)$$

где k , R – показатель адиабаты и газовая постоянная воздуха; p_1, p_2, p_3, p_4 – давление воздуха перед и после первой и второй секциями компрессора; η_{k1}, η_{k2} – КПД первой и второй секций компрессора; $c_{\text{то1}}, c_{\text{то2}}$ – коэффициент потери давления в первом и втором теплообменниках-охладителях воздуха.

Экономия топлива ΔB_t при этом может быть определена из выражения [18]

$$\Delta B_t = \frac{\Delta N_k}{\eta_m \eta_t \eta_k^{\text{бр}} Q_n^p}, \quad (4)$$

где $\eta_m, \eta_t, \eta_k^{\text{бр}}$ – КПД механический, КПД турбопривода, КПД котла brutto.

Расчеты, проведенные для двухсекционного компрессора К5500-42-1 при охлаждении воздуха перед первой и второй секциями на 10 °С (с 20 до 10 °С перед первой секцией и с 30 до 20 °С перед второй) показали, что при расходе воздуха 84 кг/с (4200 м³/мин) и коэффициентах потери давления в первом 16 и втором 13 теплообменниках-охладителях воздуха $c_{\text{то1}}$ и $c_{\text{то2}}$, равных 0,975, для охлаждения необходимо 1,7 МВт холода. Проведенные при принятых условиях расчеты с использованием программы [19] показали, что при расходе природного газа на ТЭЦ-ПВС 211,3 тыс. м³/ч и снижении его давления в двухступенчатом ДГА с 0,7 до 0,2 МПа может быть выработана электрическая мощность 5,28 МВт. Вырабатываемого холода будет достаточно для охлаждения воздуха компрессоров. При этом на ДГА при работе 7000 часов в год, может быть выработано 36 960 тыс. кВт·ч электроэнергии без затрат топлива. Если принять удельный расход топлива на выработку электроэнергии на ТЭЦ близким к среднему по стране, равному 265 г/кВт·ч, то экономию топлива можно оценить как 1,4 т у.т./ч.

При охлаждении воздуха на 10 °С перед каждой секцией компрессора мощность, потребляемая компрессором, снизится приблизительно на 3 % (из формулы (3)

$\frac{\Delta N}{N} = \frac{\Delta T}{T} = \frac{10}{300} \approx 0,03$). На эту же величину снизится расход топлива на работу приводной турбины (из формулы (4) $\frac{\Delta N}{N} = \frac{\Delta B}{B}$). При расходе топлива на приводную турбину К-19-3,4 около 6,5 т у.т./ч экономия составит 0,2 т у.т./ч.

Таким образом, использование ДГА на газорегуляторном пункте теплоэлектроцентрали паровоздуходувной станции для генерации электроэнергии и организации охлаждения воздуха на входе в секции компрессорной установки позволит уменьшить потребление топлива при принятых условиях расчета на 1,6 т у.т./ч или на 11 200 т у.т./год.

Полученные результаты расчета следует рассматривать как оценку эффективности применения предложенной схемы, требующую уточнения с использованием реальных исходных данных в каждом конкретном случае.

Необходимо также отметить, что представленные результаты носят исключительно теоретический характер. При решении вопросов внедрения предлагаемых установок необходимы тщательный анализ схемы предприятия, на котором предполагается использовать установку, и правильный выбор оборудования [20], так как ошибки в этих вопросах могут свести на нет все теоретические преимущества технического решения.

Выводы. Предложена схема установки на газорегуляторном пункте в системе газоснабжения металлургического предприятия на базе генерирующего электроэнергию и холодетандер-генераторного агрегата, в которой холод используется для дополнительного охлаждения воздуха в компрессорной установке. Предложенная схема позволяет снизить потребление топлива не только за счет производства дополнительной электроэнергии без затрат топлива с использованием ДГА, но и одновременно за счет повышения эффективности работы компрессорной установки.

Для разработанной схемы предложена методика определения экономия топлива при охлаждении воздуха перед секциями компрессора с использованием ДГА.

Проведенные расчеты показывают, что при расходе газа 211,5 тыс. м³/ч и заданных условиях расчета, близких к реальным условиям эксплуатации, в двухступенчатом ДГА может быть получена электрическая мощность 5,3 МВт, а общая экономия топлива от применения установки может составить более 11 тыс. т у.т. в год.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Годовой отчет ММК за 2015 г. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://mmk.ru/upload/iblock/5a2/1%20%D0%93%D0%9E%202015.pdf>
2. Никифоров Г.В., Олейников В.К., Заславец Б.И. Энергосбережение и управление в металлургическом производстве. – М.: Энергоатомиздат, 2003. – 480 с.

3. Промышленная теплоэнергетика и теплотехника: Справочник в 4-х томах. Т. 4 / Под ред. А.В. Клименко, В.М. Зорина. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во МЭИ, 2007. – 632 с.
4. Демин Ю.К., Хасанова Р.В., Нешпоренко Е.Г., Картавцев С.В. Совершенствование схемы промежуточного охлаждения сжимаемого газа в системе снабжения техническими газами металлургического производства // Электротехнические системы и комплексы. 2017. № 1. С. 37 – 43.
5. Cronin P. The Application of Turboexpanders for Energy Conservation. Company materials. Rotoflow Corporation, USA, 1999.
6. Агабабов В.С., Корягин А.В., Джураева Е.В. Производство электроэнергии в детандер-генераторных агрегатах с одновременным отпуском теплоты различных температурных уровней (теплоты и холода) // Рациональное использование природного газа в металлургии: Сб. тез. Междунар. науч.-практич. конф. Москва, 13 – 14 ноября 2003 г. – М.: МИСИС, 2003. С. 45 – 46.
7. Berge W., Zahner C. Erdgas-Entspannungsturbine Goeppingen // Gas und Wasserfach Gas Erdgas. 1991. Vol. 132. No. 7. P. 302 – 304.
8. Bosen W. Auslegung und Regelung von Erdgasexpansionsturbinen // VDI Berichte. Vol. 1141. Düsseldorf: VDI-VerlagGmbH, 1994. P. 113 – 124.
9. Байков И.Р., Молчанова И.Р., Гатауллина А.Р. Энерготехнологический комплекс на базе детандер-генераторных агрегатов на компрессорной станции // Территория «НЕФТЕГАЗ». 2015. № 6. С. 114 – 118.
10. He T.B., Ju Y.L. Design and optimization of natural gas liquefaction process by utilizing gas pipeline pressure energy // Applied Thermal Engineering. 2013. Vol. 57. No. 1 – 2. P. 1 – 6.
11. Arabkoohsar A., Gharahchomaghloo Z., Farzaneh-Gord M. etc. An energetic and economic analysis of power productive gas expansion stations for employing combined heat and power // Energy. 2017. Vol. 133. P. 737 – 748.
12. Agababov V.S., Stepanez A.A., Heymer J.J. Der Einsatz von Wärmepumpen zur Erdgasvorwärmung // Gas und Wasserfach Gas Erdgas. 2000. Vol. 141. No. 3. P. 182 – 184.
13. Agababov V.S., Korjagin A.V., Utenkov V.F., Heymer J.J. Abhängigkeit der Betriebsdaten einer Wärmepumpenanlage zur Erdgasvorwärmung von den Einsatzparametern // Gas und Wasserfach Gas Erdgas. 2000. Vol. 141. No. 9. P. 610 – 615.
14. Furchner H. Stromerzeugung durch Erdgasentspannung. Einführungs hemmnisse und technische Lösungen // Gas und Wasserfach Gas Erdgas. 1997. Vol. 138. No. 11. P. 634 – 636.
15. Hagedorn G. Technische Möglichkeiten und Anwendungspotential für den Einsatz von Entspannungsmaschinen in der Versorgungswirtschaft und Industrie // VDI Berichte. Vol. 1141. Düsseldorf: VDI-VerlagGmbH. 1994. P. 1 – 15.
16. Modrei P., Sundermann H.-H. Planung, Bau und erste Betriebserfahrungen einer Erdgas – Expansionsanlage in Ferngassystemen // Gas und Wasserfach Gas Erdgas. 1998. Vol. 139. No. 5. P. 276 – 282.
17. СТО Газпром 2-3/5-501-2006. Нормы технологического проектирования магистральных газопроводов.
18. Кириллин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. – М.: Энергия, 2016. – 496 с.
19. Корягин А.В., Джураева Е.В. Расчет детандер-генераторных агрегатов и ожижителей природного газа // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2001611044. – 1 с.
20. Гуров В.И. Перспективы применения турбодетандеров в системе газоснабжения // Газотурбинные технологии. 2002. Т. 20. № 5. С. 34 – 37.

Поступила в редакцию 6 мая 2019 г.

После доработки 1 июля 2019 г.

Принята к публикации 3 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 698–704.

USE OF EXPANDER-GENERATOR UNIT AT CHP OF METALLURGICAL PLANT FOR PRODUCING ELECTRIC POWER AND INCREASING EFFICIENCY OF COMPRESSOR

A.V. Klimenko, V.S. Agababov, A.V. Koryagin, S.N. Petin, P.N. Borisova

Moscow Power Engineering Institute (MPEI)

Abstract. The ability of saving energy in the production of compressed air is one of the most energy-consuming production in which much of the used energy is lost. The proposed technical solution is based on the united use of two energy-saving technologies. The first of them is the use of technological pressure drop of transported natural gas which lost irrevocably when it is throttled at gas control stations. The second one is air cooling before the compressor sections to reduce compression work. A scheme of a combined steam blowing and heat power plant of a metal manufacturer is proposed. In addition to a power and heat generating turbine and a two-section air compressor with a steam-turbine drive, a two-stage expander-generator unit (EGU) producing electricity and cold is used. The thermodynamics of gas expansion processes in the expander is considered, the choice of a two-stage scheme is founded. The cold produced in the EGU is used to lower the air temperature at the inlet to the first and second sections of the compressor, thus reducing fuel consumption for air compression. Using the proposed scheme allows to reduce fuel consumption to the compressor drive, to use the heat of compressed air to preheat the transported gas before the steps of the expander and to generate additional electric power. At the same time, fuel is not used to generate electricity, and the heat of the cooled air is not discharged into the environment, therefore the plant operation is characterized by high environmental performance. The procedure for calculating of fuel economy when using the proposed scheme is given. The assessment has shown that the use of

this scheme allows, under given conditions of calculation, to reduce fuel consumption at the combined heat power and steam blowing plant by 11.2 thousand tons of fuel equivalent per year, which is 0.84 %. The generated electric power of the EGU will be 5.3 MW.

Keywords: two-stage compressor, two-stage expander-generator unit, combined production of electricity, cold and compressed air, cooling of the air in front of the compressor sections, preheating the transported gas before the steps of the expander, secondary energy resources, high thermodynamic and environmental performance, procedure for calculating efficiency.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-698-704

REFERENCES

1. *Godovoi Otchet MMK za 2015 g* [Annual report of MMK for 2015]. Electronic resource. Available at URL: <http://mmk.ru/upload/iblock/5a2/1%20%D0%93%D0%9E%202015.pdf> (In Russ.).
2. Nikiforov G.V., Oleinikov V.K., Zaslavets B.I. *Energoberezhenie i upravlenie v metallurgicheskoy proizvodstve* [Energy saving and management in metallurgical industry]. Moscow: Energoatomizdat, 2003, 480 p. (In Russ.).
3. *Promyshlennaya teploenergetika i teplotekhnika: Spravochnik v 4 t. T. 4* [Industrial heat and power engineering: Handbook in 4 Vols. Vol. 4]. Klimenko A.V., Zorina V.M. eds. Moscow: Izdatel'stvo MEI, 2007, 632 p. (In Russ.).
4. Demin Yu.K., Khasanova R.V., Neshporenko E.G., Kartavtsev S.V. Improvement of intermediate cooling scheme of compressed gas in industrial gas supply system at a metallurgical enterprise. *Ele-*

- ktrotekhnicheskie sistemy i komplekсы*. 2017, no. 1, pp. 37–43. (In Russ.).
 5. Cronin P. *The Application of Turboexpanders for Energy Conservation. Company materials*. Rotoflow Corporation, USA, 1999.
 6. Agababov V.S., Koryagin A.V., Dzhuraeva E.V. Electricity production in expander-generator units with simultaneous release of heat of different temperature levels (heat and cold). In: *Ratsional'noe ispol'zovanie prirodnogo gaza v metallurgii: Sb. tez. mezhd. nauch.-praktich. konf. Moskva, 13-14 noyabrya 2003 g.* [Rational Use of Natural Gas in Metallurgy: Abstracts of the Int. Sci.-Pract. Conf., November 13-14, 2003, Moscow]. Moscow: MISIS, 2003, pp. 45–46. (In Russ.).
 7. Berge W., Zahner C. Erdgas-Entspannungsturbine Goeppingen. *Gas und Wasserfach Gas Erdgas*. 1991, vol. 132, no. 7, pp. 302–304. (In Germ.).
 8. Bosen W. Auslegung und Regelung von Erdgasexpansionsturbinen. In: *VDI Berichte*. Vol. 1141. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 1994, pp. 113–124. (In Germ.).
 9. Baikov I.R., Molchanova I.R., Gataullina A.R. Energotechnological complex on the basis of expander-generator units at compressor station. *Territoriya "NEFTEGAZ"*. 2015, no. 6, pp. 114–118. (In Russ.).
 10. He T.B., Ju Y.L. Design and optimization of natural gas liquefaction process by utilizing gas pipeline pressure energy. *Applied Thermal Engineering*. 2013, vol. 57, no. 1-2, pp. 1–6.
 11. Arabkoohsar A., Gharahchomaghloo Z., Farzaneh-Gord M., Koury R.N.N., Deymi-Dashtebayaz M. An energetic and economic analysis of power productive gas expansion stations for employing combined heat and power. *Energy*. 2017, vol. 133, pp. 737–748.
 12. Agababov V.S., Stepanez A.A., Heymer J.J. Der Einsatz von Wärmepumpen zur Erdgasvorwärmung. *Gas und Wasserfach Gas Erdgas*. 2000, vol. 141, no. 3, pp. 182–184. (In Germ.).
 13. Agababov V.S., Korjagin A.V., Utenkov V.F., Heymer J.J. Abhängigkeit der Betriebsdaten einer Wärmepumpenanlage zur Erdgasvorwärmung von den Einsatzparametern. *Gas und Wasserfach Gas Erdgas*. 2000, vol. 141, no. 9, pp. 610–615. (In Germ.).
 14. Furchner H. Stromerzeugung durch Erdgasentspannung. Einfuehrungshemmnisse und technische Loesungen. *Gas und Wasserfach Gas Erdgas*. 1997, vol. 138, no. 11, pp. 634–636. (In Germ.).
 15. Hagedorn G. Technische Moeglichkeiten und Anwendungspotentiale fuer den Einsatz von Entspannungsmaschinen in der Versorgungswirtschaft und Industrie. In: *VDI Berichte*. Vol. 1141. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 1994, pp. 1–15. (In Germ.).
 16. Modrei P., Sundermann H.-H. Planung, Bau und erste Betriebserfahrungen einer Erdgas – Expansionsanlage in Ferngassystemen. *Gas und Wasserfach Gas Erdgas*. 1998, vol. 139, no. 5, pp. 276–282. (In Germ.).
 17. *STO Gazprom 2-3/5-501-2006. Normy tekhnologicheskogo proektirovaniya magistral'nykh gazoprovodov* [STO Gazprom 2-3/5-501-2006. Standards of technological design of gas pipelines]. (In Russ.).
 18. Kirillin V.A., Sychev V.V., Sheindlin A.E. *Tekhnicheskaya termodinamika* [Technical thermodynamics]. Moscow: Energiya, 2016, 496 p. (In Russ.).
 19. Koryagin A.V., Dzhuraeva E.V. *Raschet detander-generatornykh agregatov i ozhizhitelei prirodnogo gaza* [Calculation of expander-generating units and liquefiers of natural gas]. Certificate of state registration of computer program no. 2001611044. 1 p. (In Russ.).
 20. Gurov V.I. Prospects for the use of turboexpanders in gas supply system. *Gazoturbinnye tekhnologii*. 2002, vol. 20, no. 5, pp. 34–37. (In Russ.).
- Funding.** The work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation on a state assignment as part of a competitive selection of scientific projects carried out by scientific teams of research centers and scientific laboratories of educational institutions of higher education No. 13.3233.2017/PCh1 and by the Grants Council of the President of the Russian Federation as part of the scholarship of the President of the Russian Federation to young scientists and graduate students on the scientific project No. SP-1141.2018.1.
- Information about the authors:**
- A.V. Klimenko*, Academician of the Russian Academy of Sciences, Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher
V.S. Agababov, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair of Thermal Power Plants
A.V. Koryagin, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair of Heat and Mass Transfer Processes and Units (korjaginav@yandex.ru)
S.N. Petin, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair of Energetics of High-Temperature Technology
P.N. Borisova, Postgraduate of the Chair of Thermal Power Plants

Received May 6, 2019

Revised July 1, 2019

Accepted August 3, 2019

УДК 544.32

ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ В ПРОЦЕССАХ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЕРОДА

Бердников В.И.¹, к.т.н., доцент, старший научный сотрудник (berdnikov-chel@mail.ru)
Гудим Ю.А.², д.т.н., профессор

¹ ООО Промышленная компания «Технология металлов»
(454018, Россия, Челябинск, ул. Косарева 63, офис 486)

² Южно-Уральский государственный университет
(454080, Россия, Челябинск, пр. Ленина, 76)

Аннотация. Проведен термодинамический анализ процесса газификации углерода в присутствии влаги. Химический процесс отображался системой $C-O-H$ с соотношениями элементов в ней 1:1:2 и 1:2:2. Для отработки методики исследования и проверки полученных результатов использовали хорошо изученную ранее подсистему $C-O$. Исходный массив обрабатываемых данных был представлен рассчитанными по программе Терра содержаниями химических компонентов C , CO , CO_2 , CH_4 , H_2 и H_2O . Единая химическая реакция в системе $C-O-H$ отсутствует, поэтому полный рабочий диапазон температур 298 – 1400 К делили на три характерных области, и каждую из них анализировали отдельно. Сопоставляя численные значения содержаний компонентов на границах областей, определяли изменения их величин при переходе от одной области к другой. Эти величины были кратными стехиометрическим коэффициентам предполагаемых химических реакций. Таким образом, решалась проблема с установлением вида химических реакций. Но в двух областях из трех идентифицированные реакции имели комплексный характер, т. е. содержали более четырех компонентов. Поэтому выполнили разложение их по базису из трех более простых и характерных для этих областей реакций. В результате общее число разновидностей реакций сократилось до четырех: две основные реакции газификации углерода ($C + 2H_2O = CO_2 + 2H_2$, $C + CO_2 = 2CO$) и две реакции образования и разложения метана ($2C + 2H_2O = CH_4 + CO_2$, $CH_4 = C + 2H_2$). Одновременно с этим, посредством балансовых коэффициентов β определялась доля каждой реакции в общем химическом процессе. Вид химических реакций дает нужную информацию о содержании компонентов системы лишь на границах областей. Количественную оценку химического процесса внутри областей можно получить путем определения температурной зависимости координат реакций от энергий Гиббса и давления – $\xi(T) = f[\Delta_r G^\circ(T), P]$. Координаты реакций ξ в сочетании с балансовыми коэффициентами β позволяют вычислять не только содержания реагентов и продуктов реакций, но и условные температуры начала и окончания самих реакций. При этом никакие коэффициенты и параметры подгоночного характера в расчетах не использовались. Средняя абсолютная погрешность количественного описания результатов машинного моделирования системы $C-O-H$ менее 0,02 моля (в расчете на 1 моль углерода), а подсистемы $C-O$ практически нулевая.

Ключевые слова: газификация углерода, термодинамическая система, химическая реакция, координата реакции, энергия Гиббса реакции, идентификация реакций, начало и окончание реакций.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-705-712

При углетермическом восстановлении железа, кремния, марганца, хрома и прочих элементов из рудного сырья в газовой фазе происходят химические процессы, которые в первом приближении могут удовлетворительно описываться, исходя из анализа соответствующей термодинамической системы $C-O-H$. Однако подобный анализ осложняется из-за отсутствия общепринятой методики по идентификации и количественной оценке протекающих в системе химических реакций.

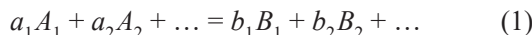
Ранее в физико-химических исследованиях [1 – 5] использовалась специальная характеристика ξ , имевшая различные наименования – «степень полноты (протекания, завершенности) реакции», «глубина (эквивалент, пробег) реакции» или же проще – «координата реакции». В равновесной термодинамике она не нашла широкого распространения, но в неравновесной термодинамике успешно использовалась для организации функциональной связи химического механизма реакции со временем процесса t , в частности, для определения скорости реакции $d\xi/dt$.

В данной работе сделана попытка расширить возможности применения подобной характеристики, выполнив «привязку» ее не ко времени t , а к другому аргументу, температуре T в форме функции $\xi(T)$. Тогда более простой станет и оценка величины $\xi(t)$ в реальных условиях. Так, для стационарного металлургического агрегата обычно хорошо известна скорость нагрева материалов и подъема температуры в печи $T(t)$, поэтому несложно установить комплексную зависимость $\xi[T(t)]$. Для металлургического агрегата шахтного типа также известно распределение температуры материалов по высоте шахты h , т. е. функция $T(h)$. Известна и линейная скорость схода материалов в шахте $h(t)$. Поэтому появляется возможность нахождения в относительно простой форме комплексной зависимости $\xi\{T[h(t)]\}$. Для печи проходного типа с камерой длиной l можно также получить решение аналогичного типа – $\xi\{T[l(t)]\}$.

В общем виде постановка данной задачи заключается в следующем. Полагаем, что в термодинамической системе

$$X_1 - X_2 - \dots = \{n_{X_1}, n_{X_2}, \dots\}$$

может проходить химическая реакция типа



Здесь X_j – химические элементы, входящие в систему; n_{X_j} – общие (балансовые) числа молей (грамм-атомов) соответствующих элементов; A_i – реагенты; B_i – продукты реакции; a_i , b_i – стехиометрические коэффициенты.

Химические реакции записываются, как правило, с «нормальным» набором стехиометрических коэффициентов, представляющих собой целые положительные числа, не содержащие общего делителя, кроме единицы [5]. Аналогичный подход целесообразно использовать и при записи в фигурных скобках состава термодинамической системы.

Равновесное состояние системы при прохождении в газе химической реакции (1) характеризуется величиной стандартной энергии Гиббса

$$\Delta_r G^\circ = \sum b_i \Delta G_{B_i}^\circ - \sum a_i \Delta G_{A_i}^\circ = -RT \ln K = -RT \ln \frac{\prod p_{B_i}^{b_i}}{\prod p_{A_i}^{a_i}}, \quad (2)$$

где ΔG_i° – энергии Гиббса компонентов; R – универсальная газовая постоянная; T – температура; K – константа равновесия; p_i – парциальные давления компонентов газа. Для конденсированных компонентов множители p_i в формуле (2) опускаются.

В соответствии с уравнениями состояния идеального газа

$$PV = NRT, p_i V = n_i RT \quad (3)$$

взаимосвязь парциальных давлений компонентов с числом их молей n_i в газовой фазе будет иметь вид:

$$p_i = \frac{n_i P}{N} = \frac{n_i P}{\sum n_i}. \quad (4)$$

Здесь P , V , N – давление, объем и полное число молей компонентов в газе соответственно. Связи мольных концентраций n_i с координатой ξ для реагентов и продуктов реакции определяем соответственно формулами

$$n_{A,i} = (1 - \xi)a_i, n_{B,i} = \xi b_i. \quad (5)$$

Очевидно, что в этом случае численные значения n_i при $\xi = 0$ (начало реакции) и при $\xi = 1$ (конец реакции) становятся равными соответствующим стехиометрическим коэффициентам уравнения (1).

Таким образом, из уравнений (2), (4), (5) получим итоговое выражение константы равновесия, учитывающего величину координаты реакции ξ :

$$K = \frac{\prod b_i^{b_i}}{\prod a_i^{a_i}} \frac{\xi^{\sum b_i}}{(1 - \xi)^{\sum a_i}} \left[\frac{P}{\sum a_i + (\sum b_i - \sum a_i) \xi} \right]^{(\sum b_i - \sum a_i)} = \exp \left(-\frac{\Delta_r G^\circ}{RT} \right). \quad (6)$$

Существующие процессы газификации углерода могут быть интерпретированы тремя различными термодинамическими системами:

Тип газификации	Реагенты, моли	Продукты	Система
I. Углекислотная	C = 1, CO ₂ = 1	CO	C – O = {2, 2}
II. Паровая	C = 1, H ₂ O = 1	CO, H ₂	C – O – H = {1, 1, 2}
III. Смешанного типа	C = CO ₂ = 0,5, H ₂ O = 1	CO, H ₂ и др.	C – O – H = {1, 2, 2}

Анализ таких процессов требует предварительного выполнения следующих пунктов:

- определение концентраций образующихся соединений;
- идентификация вида происходящих химических реакций;
- определение величин энергии Гиббса реакций;
- вычисление координат реакций.

На рис. 1, 2 приведены результаты расчета концентраций компонентов данных систем в диапазоне температур 400 – 1400 °C посредством программного комплекса Терра [6] с персональной базой данных, обновленной в 2013 г. из фонда базы [7]. Нужные решения по этой программе находились оптимизационным

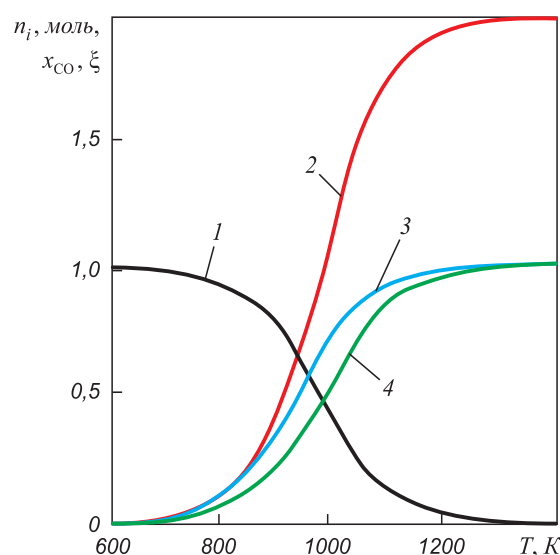


Рис. 1. Термодинамические характеристики системы C–O:
1 – n_C, n_{CO_2} ; 2 – n_{CO} ; 3 – x_{CO} ; 4 – ξ

Fig. 1. Thermodynamic characteristics of C–O system:
1 – n_C, n_{CO_2} ; 2 – n_{CO} ; 3 – x_{CO} ; 4 – ξ

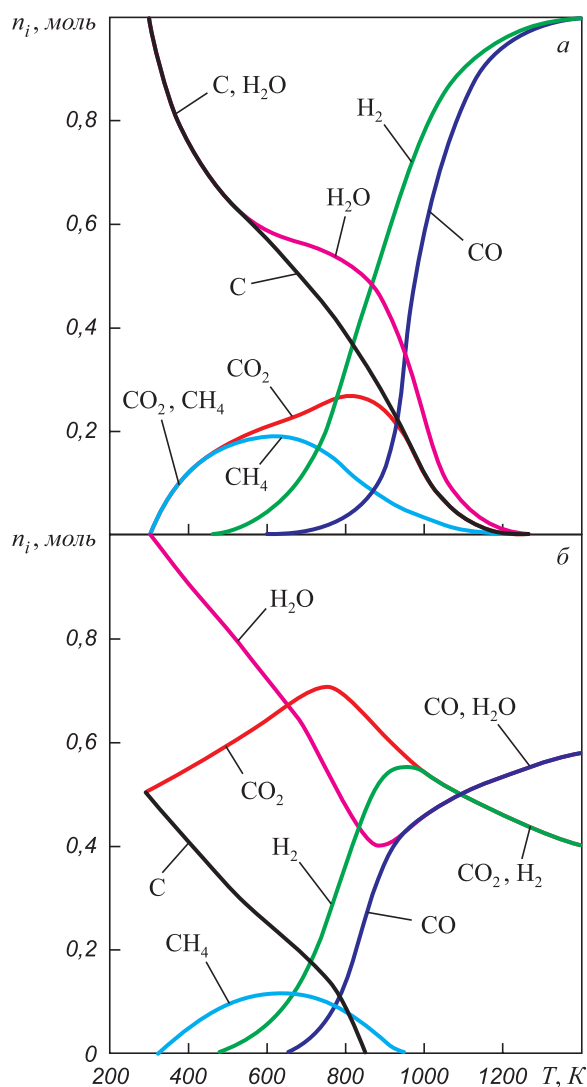


Рис. 2. Содержания компонентов в системе C–O–H для составов {1, 1, 2} (а) и {1, 2, 2} (б)

Fig. 2. Contents of the components in C–O–H system for compositions {1, 1, 2} (a) and {1, 2, 2} (b)

методом – путем поиска максимума энтропии системы [8]. Аналогичные результаты могут быть получены и при «константном» методе моделирования [9] с использованием базы данных [10]. В этом случае необходимые решения достигаются в ходе постоянного мониторинга величин констант диссоциации и конденсации компонентов [11].

Углекислотную газификацию представляет реакция, записанная в табл. 1 под номером (12). Она хорошо изучена ранее [12–14] и достоверность ее подтверждается графиком на рис. 1. В принципе, система C–O могла быть также представлена реакцией $2C + O_2 = 2CO$. Но это не произошло, так как расчетный алгоритм исключал присутствие молекулярного кислорода в системе.

Формальное выражение зависимости $\Delta_r G^\circ = f(T)$ в базе [6] представляется семичленным полиномом типа

$$\Delta_r G^\circ = -[\varphi_1 + \varphi_2 \ln(x) + \varphi_3 x^{-2} + \varphi_4 x^{-1} + \varphi_5 x + \varphi_6 x^2 + \varphi_7 x^3]T, \quad (7)$$

где $x = 10^{-4}T$; φ_i – коэффициенты полинома.

Однако при анализе различных химических процессов температурную зависимость энергии Гиббса реакции принято представлять приближенно в форме двучленного полинома с коэффициентами c_0, c_1 :

$$\Delta_r G^\circ = c_0 + c_1 T. \quad (8)$$

Аппроксимация по полиному (8) численных значений энергии Гиббса во всем рабочем диапазоне температур посредством метода наименьших квадратов (МНК) [15] позволяет получить хорошее приближение $\Delta_r G_T^\circ$. Другой распространенный способ аппроксимации состоит в присвоении коэффициентам уравнения (8) значений стандартной энтальпии и энтропии реакции ($c_0 = \Delta_r H_{298}^\circ$, $c_1 = \Delta_r S_{298}^\circ$) с получением, таким образом, приближения $\Delta_r G_{298}^\circ$. Погрешностью аппроксимации ε в обоих случаях служит средняя величина отклонений приближенных значений энергии Гиббса от точных ее значений по уравнению (7).

Результаты расчета энергии Гиббса для реакции (12) в сравнении с некоторыми ранее опубликованными данными приводятся в табл. 2. Очевидно, что МНК-аппроксимация сопровождается меньшей погрешностью и поэтому рекомендуется к применению. Другая аналогичная характеристика энергии реакций, «химическое сродство» [1, 2], здесь не используется, поскольку позволяет оценивать только самопроизвольно идущие реакции.

В табл. 3 приводятся полученные из уравнения (6) формальные определения констант равновесия $K = (P, \xi)$, а также координат реакций $\xi = f(\Delta_r G^\circ, P)$. Такое уравнение для координаты реакции (12), далее именуемого «характеристическим» уравнением, полностью совпало по форме с уравнением, определяющим степень диссоциации газообразного компонента в реакциях типа $A = 2B$ [16]. В данном же случае оно позволило в сочетании с уравнениями (5) дать полные аналитические описания всех S-образных концентрационных кривых на рис. 1. При этом наиболее часто исследуемая характеристика x_{CO} , т. е. мольная доля монооксида углерода в газовой смеси его с диоксидом углерода, получила следующее выражение:

$$x_{CO} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + 4P \exp\left(\frac{\Delta_r G_{(12)}^\circ}{RT}\right)}}. \quad (9)$$

В целом, зависимость температуры от координаты ξ согласно уравнениям (2), (8) можно представить формулой

$$T = -\frac{c_0}{c_1 + R \ln K(\xi, P)}, \quad (10)$$

Таблица 1

Основные химические реакции газификации углерода

Table 1. Main chemical reactions of carbon gasification

Тип процесса	Температура, К	Химические реакции (в балансовой форме)	Номер реакции
I	298 – 1400	$C + CO_2 = 2CO$	(12)
II	400 – 600	$(3/15)(2C + 2H_2O = CH_4 + CO_2)$	(13.1)
	600 – 800	$(1/15)(C + CH_4 + 3H_2O = CO + CO_2 + 5H_2)$	(13.2)
	800 – 1400	$(2/15)(4C + CH_4 + 3H_2O + 2CO_2 = 7CO + 5H_2)$	(13.3)
		Итого: $C + H_2O = CO + H_2$	
III	400 – 500	$0,1(2C + 2H_2O = CH_4 + CO_2)$	(14.1)
	500 – 800	$0,1(2C + 3H_2O = CO + CO_2 + 3H_2)$	(14.2)
	800 – 950	$0,1(C + H_2O + CO_2 + CH_4 = 3CO + 3H_2)$	(14.3)
	950 – 1400	$0,2(CO_2 + H_2 = CO + H_2O)$	(14.4)
		Итого: $0,5C + 0,1CO_2 + 0,4H_2O = 0,6CO + 0,4H_2$ или $0,5C + 0,5CO_2 + H_2O = 0,6CO + 0,4H_2 + 0,4CO_2 + 0,6H_2O$	
–	400 – 1400	$C + 2H_2O = CO_2 + 2H_2$	(15.1)
–	298 – 1400	$CH_4 = C + 2H_2$	(15.2)

Таблица 2

Энергетические характеристики химических реакций

Table 2. Energy characteristics of the chemical reactions

Реакция	Функция	Температура, К	c_1 , кДж/моль	c_2 , кДж/(моль·К)	ε , кДж/моль	Источник	T_1 , К	T_0 , К	T_2 , К
(12)	$\Delta_r G_T^\circ$	298 – 1600	171,63	–0,1755	0,51		616	978	1528
	$\Delta_r G_{298}^\circ$	То же	172,45	–0,1757	0,76				
	$\Delta_r G^\circ$	"	170,82	–0,1746	0,64	[12]			
	То же	"	171,88	–0,1760	0,52	[13]			
	"	"	172,14	–0,1777	1,54	[14]			
(13.1)	$\Delta_r G_T^\circ$	298 – 600	14,20	–0,0069	0,09		107	2058	>3000
(13.2)	То же	600 – 800	317,17	–0,3531	0,12		423	898	2394
(13.3)	"	800 – 1400	834,06	–0,8854	0,48		548	942	1593
То же	$\Delta_r G_{298}^\circ$	То же	131,30	–0,1337	4,91				
"	$\Delta_r G^\circ$	"	135,56	–0,1442	1,00	[14]			
(14.1)	$\Delta_r G_T^\circ$	298 – 500	14,20	–0,0069	0,09		107	2058	>3000
(14.2)	$\Delta_r G_T^\circ$	500 – 800	231,33	–0,2482	0,07		418	932	2252
(14.3)	"	800 – 950	393,73	–0,4250	0,15		531	926	1623
(14.4)	"	950 – 1400	36,83	–0,0330	0,69		233	1096	>3000
	$\Delta_r G_{298}^\circ$	То же	41,15	–0,0419	4,11				
	$\Delta_r G^\circ$	"	36,58	–0,0335	0,81	[14]			
(15.1)	$\Delta_r G_T^\circ$	400 – 1400	98,32	–0,1095	0,45		342	898	>3000
(15.2)	"	"	85,76	–0,1057	0,50		410	811	2017

в которой значения константы равновесия K для каждой реакции рассчитываются по уравнениям, приведенным в табл. 3.

Поскольку зависимости $\xi = f(T)$ для всех химических реакций на границах диапазонов рабочих температур носят асимптотический характер, то условные температуры начала реакции T_1 и конца реакции T_2 можно с незначительной погрешностью определять соответственно при $\xi_1 = 0,001$ и $\xi_2 = 0,999$. Можно также определять и температуру в «точке инверсии» T_0 [17]. При ней реакция начинает самопроизвольно идти в прямом

или обратном направлении. Соответствующее значение ξ_0 устанавливается, приняв в характеристических уравнениях табл. 3 значения: $P = 1$ и $\Delta_r G^\circ = 0$. Однако большого практического применения такая характеристика не имеет, так как большинство производственных химических процессов осуществляются за счет внешнего подвода тепла. Значения расчетных температур реакции (12) и других приведены в табл. 2.

В тройных системах С–О–Н отсутствует единая химическая реакция во всем диапазоне рабочих температур. Поэтому необходимо выполнить разбиение этого диапазона на 3–4 отрезка по тем температурным точкам, где ход концентрационных кривых начинает резко меняться. Далее выполняется процедура, подобная численному дифференцированию (табл. 4). Так, для состава $\{1, 1, 2\}$ приняты три таких отрезка с пограничными температурами $T_{гр}$, равными 600, 800 и 1400 °С. Переход от одной такой температуры к следующей сопровождался соответствующим изменением концентраций компонентов Δn_i . Если приближенно определить единую кратную величину этих изменений β , то значения $\Delta n_i/\beta$ будут с точностью до целого соответствовать стехиометрическим коэффициентам химической реакции.

Коэффициент β в роли балансового множителя записывается в начале каждой такой реакции, чаще в форме рациональной дроби (см. табл. 1). Физический смысл коэффициента β – доля общего ресурса системы, затраченного на образование одной стехиометрической единицы продукта реакции. При этом для каждой системы имеет место общий неделимый «квант» реакции β_0 . Для данного состава он равен 1/12, а для состава $\{1, 2, 2\}$ – 1/10. Ранее при анализе систем Si–O–C, Si–O–C–Ca и Si–O–C–Al его значения были определены соответственно как 1/6, 1/18 и 1/24 [18–20].

Если для температур $T_{гр}$ определить численные значения координат реакции $\xi_{гр}$ (см. табл. 4), то по формулам

$$n_{A,i} = \sum n_{A,i} - \frac{\xi}{\xi_{гр}} \beta a_i, \quad n_{B,i} = \sum n_{B,i} + \frac{\xi}{\xi_{гр}} \beta b_i \quad (11)$$

можно получить верные результаты во всей области действия этой реакции, а не только на ее границе. Здесь уравнения (11), предназначенные для «цепочки» реакций, заменили уравнения (5), пригодные лишь для одиночной реакции. Поэтому потребовалось дополнительно ввести параметры Σn_i , характеризующие накопленные (интегральные) суммы масс компонентов по итогам предыдущих реакций. Добавим, что для состава $\{1, 2, 2\}$ будут следующие значения констант β и $\xi_{гр}$:

T, K	500	800	950	1400
β	0,1	0,1	0,1	0,2
$\xi_{гр}$	0,354	0,450	0,581	0,199

Таблица 3

Константы равновесия и координаты химических реакций

Table 3. Equilibrium constants and coordinates of the chemical reactions

Реакция	K	ξ^*	ξ_0
(12)	$\frac{4\xi^2 P}{1-\xi^2}$	$\frac{1}{\sqrt{1+4PE}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}} = 0,45$
(13.1), (14.1)	$\left(\frac{0,5\xi}{1-\xi}\right)^2$	$\frac{1}{1+0,5\sqrt{E}}$	$\frac{1}{1,5} = 0,67$
(13.2)	$\frac{115,7\xi^7 P^3}{(1-\xi)^4 (4+3\xi)^3}$	**	0,62
(13.3)	$\left(\frac{2,83\xi^2 P}{1-\xi^2}\right)^6$	$\frac{1}{\sqrt{1+2,83PE^{1/6}}}$	$\frac{1}{\sqrt{3,83}} = 0,51$
(14.2)	$\frac{\xi^5 P^2}{(1-\xi)^3 (3+2\xi)^2}$	***	0,77
(14.3)	$\left(\frac{3\xi^2 P}{1-\xi^2}\right)^3$	$\frac{1}{\sqrt{1+3PE^{1/3}}}$	$\frac{1}{\sqrt{4}} = 0,50$
(14.4)	$\left(\frac{\xi}{1-\xi}\right)^2$	$\frac{1}{1+\sqrt{E}}$	$\frac{1}{2} = 0,50$
(15.1)	$\frac{\xi^3 P}{(1-\xi)^2 (2+\xi)}$	****	0,67
(15.2)	$\frac{4\xi^2 P}{1-\xi^2}$	$\frac{1}{\sqrt{1+4PE}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}} = 0,45$

Примечания:

* $E = \exp\left(\frac{\Delta_r G^\circ}{RT}\right)$ соответствующей химической реакции.

** Расчет по итерационной формуле

$$\xi_{n+1} = \left[\frac{(1-\xi_n)^4 (4+3\xi_n)^3}{115,7EP^3} \right]^{1/7}$$

*** Тоже по формуле $\xi_{n+1} = \left[\frac{(1-\xi_n)^3 (3+2\xi_n)^2}{EP^2} \right]^{1/5}$

**** Тоже по формуле $\xi_{n+1} = \left[\frac{(1-\xi_n)^2 (2+\xi_n)}{EP} \right]^{1/3}$

Определение вида химических уравнений в системе $C-O-H = \{1, 1, 2\}$

Table 4. Determination of chemical equations type in the system $C-O-H = \{1, 1, 2\}$

Характеристики реакций		n_i , моль				Δn_i , моль			$\Delta n_i/\beta$, моль		
		Температура $T_{гр}$, К									
		298	600	800	1400	600	800	1400	600	800	1400
Компоненты	C _к	1	0,589	0,533	0,001	-0,410	-0,057	-0,532	-2	-1	-4
	CO	0	0,001	0,058	0,996	0,001	0,057	0,939	0	1	7
	CO ₂	0	0,216	0,276	0,001	0,216	0,060	-0,275	1	1	-2
	CH ₄	0	0,194	0,133	0,002	0,194	-0,061	-0,131	1	-1	-1
	H ₂	0	0,046	0,343	0,994	0,046	0,298	0,650	0	5	5
	H ₂ O	1	0,567	0,390	0,002	0,433	-0,177	-0,388	-2	-3	-3
Параметры	β					0,200	0,066	0,133			
	$\xi_{гр}$					0,422	0,372	0,996			

Окончательная проверка полученных результатов выполнялась посредством табулирования расчетного состава компонентов n_i для всех рассмотренных систем по уравнениям (11) в полном диапазоне рабочих температур с шагом 50 К. Средняя величина отклонений полученных данных от данных точного машинного расчета не превышала 0,02 моля.

В системах $C-O-H$ имеются комплексные реакции, содержащие свыше четырех компонентов. Каждую такую реакцию можно представить как совокупность (базис) из трех более простых и линейно независимых базисных реакций [5]. На роль таких реакций здесь были выбраны реакции (15.2), (15.1) и (12), отражающие основные особенности поведения компонентов в диапазоне температур 600 – 950 К, в частности – распад метана, образование и последующий распад диоксида углерода. При разложении комплексных реакций по принятому базису (табл. 5) балансовые коэффициенты всех базисных реакций получили положительные значения. Следовательно, эти реакции будут идти в том же

направлении, что и комплексные, не образуя возвратные циклы.

Завершающая реакция водяного газа (14.4) происходит уже после полного сгорания углерода. Поэтому она не имеет прямого отношения к процессу газификации, а отражает лишь условия последующего газообмена.

Выводы. Проведенный термодинамический анализ химического процесса газификации углерода в присутствии влаги показал, что весь такой процесс в диапазоне температур 298 – 1400 К может быть удовлетворительно описан с учетом четырех химических реакций – двух основных реакций газификации углерода ($C + 2H_2O = CO_2 + 2H_2$, $C + CO_2 = 2CO$) и двух побочных реакций образования и разложения метана ($2C + 2H_2O = CH_4 + CO_2$, $CH_4 = C + 2H_2$).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. De Donder Th., van Rysselbtrghe P. The thermodynamic theory of affinity. – Stanford University Press, 1936.
2. Prigogine I., Defay R. Chemical thermodynamics. – London: Longman, 1967.
3. Lewis G., Randall M. Thermodynamics. – New York, 1961.
4. Kondepudi D., Prigogine I. Modern thermodynamics. – New York: J. Wiley & Sons, 2002.
5. Булатов Н.К., Лундин А.Б. Термодинамика необратимых физико-химических процессов. – М.: Химия, 1984. – 336 с.
6. Трусов Б.Г. База данных и программный комплекс TERRA, редакция 6.3 (электронный ресурс).
7. Gurvich L.V., Iorish V.S. etc. IVTANTHERMO - A Thermodynamic Database and Software System for the Personal Computer. User's Guide. Boca Raton: CRC Press, Inc., 1993.
8. White W.B., Johnson S.M., Dantzig G.B. Chemical equilibrium in complex mixtures // J. Chem. Phys. 1958. Vol. 28. No. 5. P. 751 – 755.
9. Brinkley S.R. Calculation of equilibrium composition of systems of many constituents // J. Chem. Phys. 1947. Vol. 15. No. 2. P. 107 – 110.
10. Gurvich L.V., Veitz I.V. etc. Thermodynamic Properties of Individual Substances. 4th ed. in 5 vols. – New York: Hemisphere Pub Co., 1989.

Таблица 5

Базисные реакции в составе комплексных реакций

Table 5. Basic reactions in the composition of complex reactions

Комплексные реакции	Балансовые коэффициенты базисных реакций			
	(15.1)	(15.2)	(12)	β_0
	β			
(13.2)	1/10	1/15	1/30	1/30
(13.3)	1/5	2/15	7/15	1/15
(14.2)	0,15	–	0,05	0,05
(14.3)	0,05	0,10	0,15	0,05

11. Бердников В.И. Машинный расчет химического равновесия в многокомпонентных системах // Изв. вуз. Черная металлургия. 1984. № 4. С. 120 – 122.
12. Теория металлургических процессов / Д.И. Рыжонков, П.П. Арсентьев, В.В. Яковлев и др. – М.: Металлургия, 1989. – 392 с.
13. Гольдштейн Н.Л. Краткий курс теории металлургических процессов. – Свердловск: Металлургиздат, Свердловское отделение, 1961. – 334 с.
14. Кузнецов Ю.С., Качурина О.И. Окислительно-восстановительные свойства газовых фаз // Изв. вуз. Черная металлургия. Т. 61. 2018. № 1. С. 69 – 79.
15. Korn G., Korn Th. *Mathematical handbook*. – New York, 1968.
16. Atkins P., de Paula J. *Physical chemistry*. – Oxford, 2007.
17. Лаптев Д.М. Термодинамика металлургических растворов. – Челябинск: Металлургия, Челябинское отделение, 1992. – 352 с.
18. Бердников В.И. Применение балансового термодинамического анализа к исследованию механизма восстановления кремния в ферросплавной печи // Сталь. 1991. № 2. С. 42 – 45.
19. Бердников В.И., Гудим Ю.А., Картелева М.И. Термодинамическое моделирование процесса получения силикокальция углеродотермическим методом // Изв. вуз. Черная металлургия. 2008. № 4. С. 23 – 29.
20. Бердников В.И., Гудим Ю.А., Картелева М.И. Термодинамическое моделирование процесса получения алюминиевых сплавов углеродотермическим методом // Изв. вуз. Черная металлургия. 2009. № 2. С. 21 – 27.

Поступила в редакцию 1 февраля 2019 г.
После доработки 31 июля 2019 г.
Принята к публикации 1 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 705–712.

CHEMICAL REACTIONS IN PROCESSES OF CARBON GASIFICATION

V.I. Berdnikov¹, Yu.A. Gudim²

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-705-712

¹ LLC Industrial Company “Technology of Metals”, Chelyabinsk, Russia

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

REFERENCES

- Abstract.** Thermodynamic analysis of carbon gasification process in the presence of moisture was carried out. The chemical process was displayed by the system C–O–H with the ratios of elements in it: 1:1:2 and 1:2: 2. To work out the methods of research and verification of the results, we used a well-studied subsystem C–O. The initial array of processed data was presented by the contents of chemical components C, CO, CO₂, CH₄, H₂ and H₂O calculated by TERRA program. There is no single chemical reaction in the C–O–H system, so the full operating temperature range of 298 – 1400 K was divided into three characteristic areas, and each of them was analyzed separately. By comparing the numerical values of the components contents at the regions' boundaries, we determined changes in their values during the transition from one region to another. These values were multiples of stoichiometric coefficients of the expected chemical reactions. Thus, the problem with establishment of the chemical reactions' type was solved. But two areas of three identified reactions were complex containing more than four components. Therefore, their decomposition was performed on the basis of three more simple and characteristic reactions for these areas. As a result, the total number of reaction varieties was reduced to four – two main reactions of carbon gasification (C + 2H₂O = CO₂ + 2H₂, C + CO₂ = 2CO) and two reactions of formation and decomposition of methane (2C + 2H₂O = CH₄ + CO₂, CH₄ = C + 2H₂). At the same time, the proportion of each reaction in the total chemical process was determined by the balance coefficients β. The type of chemical reactions provides the necessary information about content of the system components only at the regions' boundaries. A quantitative assessment of the chemical process within the regions can be obtained by determining the temperature dependence of the reaction coordinates on Gibbs energy of the reactions and the pressure – $\xi(T) = f[\Delta_r G^\circ(T), P]$. The coordinates of reactions ξ in combination with the balance coefficients of reactions β allow us to calculate not only the content of reagents and reaction products at any moment of reactions, but also the conditional temperatures of the beginning and end of the reactions themselves. No coefficients and parameters of the fitting character were used in the calculations. The average absolute error of the quantitative description of the results of machine simulation of the system C–O–H – is less than 0.02 mole (per 1 mole of carbon), and for the subsystem C–O it is almost zero.
- Keywords:** carbon gasification, thermodynamic system, chemical reaction, reaction coordinate, Gibbs energy of reaction, identification of reactions, beginning and end of reactions.
1. De Donder Th., van Rysselbtrghe P. *The thermodynamic theory of affinity*. Stanford University Press, 1936.
 2. Prigogine I., Defay R. *Chemical thermodynamics*. London: Longman, 1967.
 3. Lewis G., Randall M. *Thermodynamics*. New York, 1961.
 4. Kondepudi D., Prigogine I. *Modern thermodynamics*. New York: J. Wiley & Sons, 2002.
 5. Bulatov N.K., Lundin A.B. *Termodinamika neobratimyykh fiziko-khimicheskikh protsessov* [Thermodynamics of irreversible physical and chemical processes]. Moscow: Khimiya, 1984, 336 p. (In Russ.).
 6. Trusov B.G. *Baza dannykh i programnyi kompleks TERRA, pedaktsiya 6.3 (elektronnyi resurs)* [Database and program complex TERRA, edition 6.3]. (In Russ.).
 7. Gurvich L.V., Iorish V.S. etc. *IVTANTHERMO – A Thermodynamic Database and Software System for the Personal Computer. User's Guide*. Boca Raton: CRC Press, Inc., 1993.
 8. White W.B., Johnson S.M., Dantzig G.B. Chemical equilibrium in complex mixtures. *J. Chem. Phys.* 1958, vol. 28, no. 5, pp. 751–755.
 9. Brinkley S.R. Calculation of equilibrium composition of systems of many constituents. *J. Chem. Phys.* 1947, vol. 15, no. 2, pp. 107–110.
 10. Gurvich L.V., Veitz I.V. etc. *Thermodynamic Properties of Individual Substances*. 4th ed. in 5 vols. New York: Hemisphere Pub. Co., 1989.
 11. Berdnikov V.I. Computer calculation of chemical equilibrium in multicomponent systems. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 1984, no. 4, pp. 120–122. (In Russ.).
 12. Ryzhonkov D.I., Arsent'ev P.P., Yakovlev V.V. etc. *Teoriya metallurgicheskikh protsessov* [Theory of metallurgical processes]. Moscow: Metallurgiya, 1989, 392 p. (In Russ.).
 13. Gol'dshteyn N.L. *Kratkii kurs teorii metallurgicheskikh protsessov* [Short course of metallurgical processes theory]. Sverdlovsk: Metallurgizdat, 1961, 334 p. (In Russ.).
 14. Kuznetsov Yu.S., Kachurina O.I. Redox properties of the gas phases. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2018, vol. 61, no. 1. pp. 69–79. (In Russ.).
 15. Korn G., Korn Th. *Mathematical handbook*. New York, 1968.
 16. Atkins P., de Paula J. *Physical chemistry*. Oxford, 2007.
 17. Laptev D.M. *Termodinamika metallurgicheskikh rastvorov* [Thermodynamics of metallurgical solutions]. Chelyabinsk: Metallurgiya, 1992, 352 p. (In Russ.).
 18. Berdnikov V.I. Adaptation of the balance thermodynamic analysis to the mechanism of silicon reduction in a ferroalloy furnace. *Stal'*. 1991, no. 2, pp. 42–45. (In Russ.).

19. Berdnikov V.I., Gudim Yu.A., Karteleva M.I. Thermodynamic modeling of the process of obtaining silicocalcium by carbon-thermal method. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2008, vol. 51, no. 4, pp. 23–29. (In Russ.).
20. Berdnikov V.I., Gudim Yu.A., Karteleva M.I. Thermodynamic modeling of the process of obtaining aluminum alloys by carbon-thermal method. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2009, vol. 52, no. 2, pp. 21–27. (In Russ.).

Information about the authors:

V.I. Berdnikov, *Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Senior Researcher*
(berdnikov-chel@mail.ru)

Yu.A. Gudim, *Dr. Sci. (Eng.), Professor*

Received February 1, 2019

Revised July 31, 2019

Accepted August 1, 2019

Авторская коррекция:

Дмитриевский Б.С., Башкатова А.В.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
ДУГОВОЙ СТАЛЕПЛАВИЛЬНОЙ ПЕЧИ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА**

Известия Высших Учебных Заведений. Черная металлургия. Черная металлургия. 2019. Том 62. № 7. С. 571 – 577.
DOI: 10.17073/0368-0797-2019-7-571-577

В разделе «Место работы авторов» указаны не точные данные:

Дмитриевский Б.С., д.т.н., доцент, профессор кафедры «Информационные процессы и управление»
Башкатова А.В., аспирант кафедры «Информационные процессы и управление» (atom1299@yandex.ru)

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина (392000, Россия, Тамбов, ул. Интернациональная, 33)

Следует читать:

Дмитриевский Б.С., д.т.н., доцент, профессор кафедры «Информационные процессы и управление»
Башкатова А.В., аспирант кафедры «Информационные процессы и управление» (atom1299@yandex.ru)

Тамбовский государственный технический университет (392036, Россия, Тамбов, ул. Ленинградская, 1)

УДК 669:544.35:519.653

ЗНАЧЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МАЛОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ЖИДКИХ БИНАРНЫХ СПЛАВАХ

*Большов Л.А., д.ф.-м.н., профессор кафедры математики (labolshov@mail.ru)
Корнейчук С.К., к.ф.-м.н., доцент кафедры физики (korn62@mail.ru)*

Вологодский государственный университет
(160000, Россия, Вологда, ул. Ленина, 15)

Аннотация. Рассмотрены основное разложение термодинамики малоконцентрированных бинарных сплавов и термодинамические параметры взаимодействия первого, второго и третьего порядков в этих сплавах. По экспериментальным термодинамическим данным о концентрационной зависимости избыточного химического потенциала примеси в жидких сплавах бинарных систем оценены значения параметров взаимодействия первого и второго порядков в 37 таких системах. Оценки получены методом численного дифференцирования. Этот метод основан на первой интерполяционной формуле Ньютона. Приведены расчетные формулы для соответствующих оценок. Предложена простейшая теория, связывающая значение термодинамического параметра взаимодействия второго порядка с параметром взаимодействия первого порядка в жидких сплавах определенной системы. Эта теория основана на решеточной модели раствора и принципах статистической механики. В качестве модельной решетки принята решетка ГЦК. Использована модель парного взаимодействия между металлическими атомами в сплаве. Радиус взаимодействия соответствует радиусу ближайшей координационной сферы решетки. С помощью предложенной теории рассчитаны значения термодинамических параметров второго порядка для всех 37 рассмотренных в настоящей работе систем, а также значения параметров взаимодействия третьего порядка для 23 систем из числа вышеупомянутых тридцати семи. Для этих 23 систем теоретические оценки параметров взаимодействия второго порядка согласуются с экспериментальными как по знаку, так и по порядку величины. Это обстоятельство может рассматриваться как свидетельство в пользу применимости, в принципе, метода численного дифференцирования для оценки значений термодинамических параметров взаимодействия первого и второго порядков в жидких бинарных сплавах. Точность оценки значений третьей производной методом численного дифференцирования представляется недостаточной. Это делает невозможным сопоставление расчетных значений параметров взаимодействия третьего порядка с экспериментальными, полученными методом численного дифференцирования. Можно предположить, что проделанные теоретические расчеты этих параметров дают представление о порядке величин указанных коэффициентов.

Ключевые слова: термодинамика сплавов, статистическая механика, бинарные сплавы, термодинамический параметр взаимодействия, основное разложение, численное дифференцирование, интерполяционная формула Ньютона, парное взаимодействие, решеточная модель раствора.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-713-718

Рассмотрим бинарный сплав, включающий растворитель 1 и примесь 2. Пусть c – концентрация примеси в сплаве, выраженная в мольных долях, a_2 – термодинамическая активность примеси в растворе, γ_2 – коэффициент активности примеси $\left(\gamma_2 = \frac{a_2}{c}\right)$. Пусть $\gamma_2 \rightarrow \gamma_2^0$ при $c \rightarrow 0$, где γ_2^0 – начальное значение коэффициента активности. Примем условие нормировки $\gamma_2 = 1$ при $c = 1$. Тогда

$$RT \ln \gamma_2 = \mu_2^E,$$

где R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура; μ_2^E – избыточный химический потенциал примеси.

Основное разложение термодинамики малоконцентрированных бинарных сплавов записывается следующим образом [1, 2]

$$\frac{\mu_2^E}{RT} = \ln \gamma_2^0 + \varepsilon_2^{(2)} c + \rho_2^{(2)} c^2 + \zeta_2^{(2)} c^3 + \dots, \quad (1)$$

где $\varepsilon_2^{(2)}$, $\rho_2^{(2)}$, $\zeta_2^{(2)}$ – термодинамические параметры взаимодействия первого, второго и третьего порядков соответственно. Аналогично определяются термодинамические параметры взаимодействия более высоких порядков. Термодинамический параметр взаимодействия первого порядка часто называют вагнеровским [3] параметром взаимодействия.

Значения термодинамических параметров взаимодействия могут представлять интерес с различных точек зрения. Рассмотрим малоконцентрированные сплавы. Под малоконцентрированными здесь понимаются сплавы, для которых сходится разложение (1). Для таких сплавов при вычислении значения величины $\ln \gamma_2$ допустимо использование усечения ряда (1), т. е. замены бесконечного ряда многочленом конечной степени. Таким образом, зная значения термодинамических параметров взаимодействия, можно рассчитывать термодинамические равновесия, в которых участвуют малоконцентрированные сплавы. Примером может служить расчет термодинамической стабиль-

ности сплавов по отношению к спиновальному распаду [2, 4].

С другой стороны, по значениям термодинамических параметров взаимодействия можно осуществлять проверку различных теорий и моделей межатомного взаимодействия в сплавах, так как эти параметры непосредственно связаны с потенциалами такого взаимодействия. Эти теории можно разделить на три группы. К первой группе относятся термодинамические теории. Примером таких теорий являются теории регулярных [5] и субрегулярных [6] растворов.

Вторую группу составляют теории, основанные на принципах статистической механики. Хронологически одной из первых таких теорий является квазихимическая [7]. За ней следуют теории, основанные на методе моментов Кирквуда [8] и его обобщении [9]. Сюда же примыкают теории, рассматривающие высокотемпературные разложения корреляционных функций [10, 11]. Существуют также статистические теории малоцентрированных сплавов, основанные на методе группового разложения [12, 13]. По значениям термодинамических параметров взаимодействия можно также проверять результаты численных расчетов термодинамических функций бинарных сплавов, выполненных методом Монте-Карло.

Третью группу теорий, проверяемых, в принципе, по значениям термодинамических параметров взаимодействия, могут составить теории, базирующиеся на современной электронной теории сплавов. В первую очередь это модели, основанные на теории функционала электронной плотности [14, 15].

Заметим, что в рамках общих теорий могут реализовываться многочисленные частные модели.

Как было сказано выше, термодинамические параметры взаимодействия могут быть рассмотрены в рамках модельных представлений с помощью статистической механики. При этом получаются формулы, связывающие эти параметры с эффективным потенциалом межатомного взаимодействия в рамках решеточной модели раствора. Такие результаты получены в отношении параметров взаимодействия первого, второго и третьего порядков [12], а в дальнейших работах автора [12] также в отношении параметров взаимодействия четвертого и пятого порядков. Однако сами по себе эти результаты представляют собой умозрительные теории, имеющие лишь формально-математическое значение. Чтобы понять природу реальных сплавов, необходимо обратиться к эмпирическому материалу. С этой точки зрения интерес представляют лишь параметры взаимодействия, значения которых могут быть достаточно точно оценены, исходя из экспериментальных термодинамических данных. К таким параметрам безусловно относятся вагнеровские параметры взаимодействия в твердых [15, 16] и жидких [17] металлических растворах. Возможно, что к ним также относятся термодинамические параметры взаимодействия второго порядка в кристаллических

сплавах [16]. Одной из основных целей настоящей работы является оценка значений параметров взаимодействия первого и второго порядков по экспериментальным данным в жидких бинарных сплавах.

В работе [17] предложен простой способ оценки вагнеровских параметров взаимодействия в бинарных сплавах методом численного дифференцирования, основанном на первой интерполяционной формуле Ньютона [18, 19]. Рассмотрим функцию $y(c) \equiv \mu_2^E$. Проинтерполируем эту функцию по системе $q + 1$ равноотстоящих узлов с шагом интерполяции h на отрезке $0 \leq c \leq qh$, где q – натуральное число. При этом i -й узел интерполяции приходится на концентрацию примеси $c_i = ih$, где $i = 0, 1, 2, \dots, q$. Обозначим $y(c_i) = y_i$. Конечную разность порядка m в i -м узле интерполяции можно определить рекуррентным образом:

$$\Delta^m y_i = \Delta^{m-1} y_{i+1} - \Delta^{m-1} y_i,$$

где $\Delta^1 y_i \equiv \Delta y_i = y_{i+1} - y_i$, $\Delta^0 y_i \equiv \Delta y_i$.

Таким образом, Δ есть символ оператора конечной разности, Δ^m – символ оператора конечной разности порядка m . Оператор Δ^m можно рассматривать как m -ю степень оператора Δ .

Запишем интерполяционный многочлен согласно первой интерполяционной формуле Ньютона [18]. Затем продифференцируем этот многочлен и найдем производную в точке $c = 0$, т. е. в нулевом узле интерполяции. Выразим результат через конечные разности $\Delta^m y_0$ в нулевом узле интерполяции. Подставим полученный результат в определение вагнеровского параметра взаимодействия как производной. Отсюда находим расчетную формулу [16, 17]

$$\varepsilon_2^{(2)} \approx \frac{1}{hRT} \sum_{m=1}^q (-1)^{m-1} \frac{\Delta^m y_0}{m}. \quad (2)$$

В работе [16] аналогичным образом была получена расчетная формула для значения термодинамического параметра взаимодействия второго порядка:

$$\rho_2^{(2)} \approx \frac{1}{h^2 RT} \left(\sum_{m=1}^q (-1)^{m-1} \frac{\Delta^m y_0}{m} \right) \sum_{k=1}^{m-1} \frac{1}{k}. \quad (3)$$

При $q = 10$ из формулы (3) получаем [16]:

$$\begin{aligned} \rho_2^{(2)} \approx \frac{1}{h^2 RT} & \left(\frac{1}{2} \Delta^2 y_0 - \frac{1}{2} \Delta^3 y_0 + \frac{11}{24} \Delta^4 y_0 - \frac{5}{12} \Delta^5 y_0 + \right. \\ & + \frac{137}{360} \Delta^6 y_0 - \frac{7}{20} \Delta^7 y_0 + \frac{363}{1120} \Delta^8 y_0 - \frac{761}{2520} \Delta^9 y_0 + \\ & \left. + \frac{7129}{25200} \Delta^{10} y_0 \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Формулой (4) можно пользоваться и при $q < 10$, если учесть в ней лишь члены, содержащие конечные разности порядка не выше q .

В работе [17] показано, что применительно к формуле (2) целесообразно выбрать значение q , минимизирующее отношение

$$\frac{|\Delta^{q+1}y_0|}{q+1}, \quad (5)$$

В настоящей работе в формулах (3) и (4) также использовано значение q , минимизирующее отношение (5).

Заметим, что, если отношение (5) минимизируется при значении $q = 0$, то в формуле (2) следует использовать $q = 1$. Аналогично, если отношение (5) минимизируется при значениях $q = 0$ или $q = 1$, то в формуле (3) и (4) следует использовать $q = 2$.

В настоящей работе для всех систем, за исключением Hg–Zn и Hg–Cd, использовано значение шага интерполяции $h = 0,1$. Оценки термодинамических параметров взаимодействия методом численного дифференцирования, сделанные по формулам (2) и (4) на основании экспериментальных данных [20] о концентрационной зависимости избыточного химического потенциала примеси μ_2^E в жидких бинарных сплавах, приведены в табл. 1. В третьем столбце таблицы приведены значения числа шагов интерполяции q , минимизирующие значение отношения (5). В скобках приведены значения q , используемые в формуле (4).

Бинарные системы, представленные в табл. 1, выбраны, по существу, случайно. В первую очередь в таблицу вошли системы, оба компонента которых принадлежат одной группе и одной подгруппе периодической системы Менделеева. Кроме того, в таблицу включены системы, одним из компонентов которых являются железо или никель, так как эти элементы играют чрезвычайно важную роль в современной технологии. Случайно сюда оказались включены также системы Al–Ag и Ag–Al.

В качестве примера использования формул (2) и (4) приведем расчет термодинамических параметров взаимодействия для системы Cu–Fe. Вычисление конечных разностей для этой системы представлено в табл. 2. В первом столбце таблицы приведены значения концентрации железа в сплаве, отвечающие узлам интерполяции функции $y(c_i)$. Между двумя соседними концентрациями оставлена пустая строка. Во втором столбце таблицы помещены значения $y_i = y(c_i) = \mu_{Fe}(c_i)$ согласно данным работы [20]. В третьем столбце таблицы помещены конечные разности первого порядка $\Delta^1 y_i \equiv \Delta y_i = y_{i+1} - y_i$. Конечные разности первого порядка располагаются в строках, оставленных пустыми и расположенными между значениями y_i и y_{i+1} . Аналогичным образом заполняются столбцы со значениями конечных разностей $\Delta^q y_i$ порядка q . Таким образом находятся значения конечных разностей $\Delta^q y_0$ в нулевом узле интерполяции $c = 0$. Этими значениями являются те, которые занимают самые верхние позиции в каждом из соответствующих столбцов табл. 2. В последней строке таблицы помещены округленные зна-

Таблица 1

Термодинамические параметры взаимодействия в малоконцентрированных жидких бинарных сплавах

Table 1. Thermodynamic parameters of interaction in low-concentrated liquid binary alloys

Система 1–2	T, К	q	Расчет по данным работы [20], формулы (2) и (4)		Теория, формулы (6) и (7)	
			$\varepsilon_2^{(2)}$	$\rho_2^{(2)}$	$\rho_2^{(2)}$	$\zeta_2^{(2)}$
Cu–Fe	1823	4	–6,9	7,8	4,8	3,0
Fe–Cu	1823	3	–6,0	6,4	4,5	2,1
Al–In	1173	3	–5,9	5,3	4,4	2,0
Hg–Zn	298	1(2)	–5,0	0,0	3,9	1,0
Zn–Cd	800	4	–4,7	8,7	3,6	0,7
Hg–Zn	573	3	–2,8	5,2	2,1	–0,3
Cu–Ag	1473	4	–2,6	2,0	1,9	–0,3
Cd–Zn	800	2	–2,4	1,2	1,7	–0,3
Na–K	384	2	–2,3	1,5	1,6	–0,3
K–Na	384	2	–1,5	0,4	1,0	–0,2
Co–Fe	1863	2	–1,2	0,8	0,8	–0,2
Al–Ag	1273	3	–0,9	2,5	0,5	–0,1
Sn–Pb	1050	5	–0,7	0,3	0,4	–0,1
Fe–Mn	1863	2	–0,6	0,3	0,3	–0,05
Mn–Fe	1863	2	–0,6	0,3	0,3	–0,05
Fe–Cr	1873	3	–0,4	1,1	0,2	–0,02
Al–Ga	1023	2	–0,3	0,1	0,2	–0,01
Ga–Al	1023	2	–0,3	0,1	0,2	–0,01
Ca–Mg	1200	3	0,8	–0,3	–0,3	–0,1
Sb–Bi	1200	1(2)	1,1	–0,1	–0,4	–0,2
Hg–Cd	298	1(2)	1,3	0,0	–0,4	–0,4
Ni–Fe	1873	1(2)	2,5	–0,1	–0,3	–1,5
Ag–Au	1350	3	2,6	–2,2	–0,2	–1,7
Ag–Al	1273	2	5,4	6,7	3,1	–6,4
Pb–Sn	1050	4	–7,9	12,4	4,9	–
Fe–Pd	1873	6	–7,0	10,5	4,9	–
Fe–Ni	1873	3	1,7	–7,2	–0,4	–
Fe–Si	1873	2	6,3	17,5	5,3	–
Pd–Fe	1873	1(2)	–1,4	–0,1	0,9	–
Fe–Co	1863	3	0,9	–1,2	0,3	–
Au–Ag	1350	4	0,9	0,4	–0,3	–
Ni–Co	1750	1(2)	1,0	0,7	–0,4	–
Hg–Cd	600	1(2)	1,4	0,4	–0,4	–
Cd–Hg	600	3	3,1	–2,1	0,1	–
Au–Cu	1550	2	3,7	–1,9	0,6	–
Cu–Au	1550	2	3,7	–1,9	0,6	–
Fe–Al	1873	2	5,8	–3,9	4,0	–
Au–Fe	1473	3	9,4	–15,5	17,9	–

Таблица 2

Значения конечных разностей (Дж/моль)
для системы Cu–Fe

Table 2. Values of the finite differences (J/mole)
for the system Cu–Fe

c_i	y_i [20]	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$	$\Delta^5 y_i$	$\Delta^6 y_i$
0,0	35 733						
		–9318					
0,1	26 455		2201				
		–7117		–280			
0,2	19 338		1921		–114		
		–5196		–394		–112	
0,3	14 142		1527		–226		432
		–3669		–620		320	
0,4	10 473		907		94		24
		–2762		–526		344	
0,5	7711		381		438		–593
		–2381		–88		–249	
0,6	5330		293		189		129
		–2088		101		–120	
0,7	3242		394		69		29
		–1694		170		–91	
0,8	1548		564		–22		
		–1130		148			
0,9	418		712				
		–418					
1,0	0						
$\frac{ \Delta^{q+1} y_0 }{q+1}$	9318	1100	93	28	22	72	

чения отношения $\frac{|\Delta^{q+1} y_0|}{q+1}$. Из данных табл. 2 следуют

значения конечных разностей в единицах Дж/моль: $\Delta y_0 = -9318$; $\Delta^2 y_0 = 2201$; $\Delta^3 y_0 = -280$; $\Delta^4 y_0 = -114$; $\Delta^5 y_0 = -112$; $\Delta^6 y_0 = 432$. Из последней строки табл. 2 следует, что значение q , минимизирующее отношение (5), приходится на $q = 4$. Для рассматриваемой системы формулы (2) и (4) принимают вид:

$$\varepsilon_2^{(2)} \approx \frac{1}{hRT} \left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} \right)$$

и

$$\rho_2^{(2)} \approx \frac{1}{h^2 RT} \left(\frac{1}{2} \Delta^2 y_0 - \frac{1}{2} \Delta^3 y_0 + \frac{11}{24} \Delta^4 y_0 \right).$$

Результаты расчета по этим формулам отражены в соответствующей строке табл. 1.

Очевидно, что использование метода численного дифференцирования для оценки параметров взаимодействия второго порядка требует дополнительного

обоснования, так как правильность оценки при обработке конкретных экспериментальных данных зависит от выбора шага интерполяции h , длины отрезка интерполяции qh и качества сглаживания исходных данных. С целью такого обоснования были получены простейшие теоретические оценки параметров взаимодействия $\rho_2^{(2)}$ для жидких бинарных сплавов всех рассмотренных в настоящей работе систем. При этом была использована простейшая решеточная модель жидкого раствора. В качестве модельной решетки была взята решетка ГЦК. В качестве модели межатомного взаимодействия принята модель парного взаимодействия. Будем считать, что радиус этого взаимодействия отвечает ближайшей координационной сфере. Рассмотрев такую модель с позиций статистической механики, получим теоретическое выражение для термодинамического параметра взаимодействия второго порядка. Это выражение связывает параметр $\rho_2^{(2)}$ с вагнеровским параметром взаимодействия [12, 16]:

$$\rho_2^{(2)} = \frac{\tau}{2z^2} (\varepsilon_2^{(2)})^3 + \frac{3}{2z} (\varepsilon_2^{(2)})^2 - \frac{1}{2} \varepsilon_2^{(2)},$$

где z – координационное число ГЦК решетки ($z = 12$); τ – число узлов ГЦК решетки, соседних по отношению к каждому из двух соседних между собой узлов ($\tau = 4$). Записанное выше выражение может быть получено различными методами статистической термодинамики малоцентрированных сплавов [12], в том числе и методом группового разложения [13].

Таким образом, в рассматриваемой простейшей модели раствора [12, 16] имеем:

$$\rho_2^{(2)} = \frac{1}{72} (\varepsilon_2^{(2)})^3 + \frac{1}{8} (\varepsilon_2^{(2)})^2 - \frac{1}{2} \varepsilon_2^{(2)}. \quad (6)$$

Результаты расчетов по формуле (6) представлены в шестом столбце табл. 1.

В первой части таблицы помещены 23 системы, для которых экспериментальное и теоретическое значение параметра $\rho_2^{(2)}$ совпадает по знаку и хорошо согласуется по порядку величины. Во второй части таблицы находятся четыре системы, для которых экспериментальное и теоретическое значение этого параметра совпадает лишь по знаку. В третьей части таблицы имеем 10 систем, для которых упомянутые значения отличаются по знаку. Таким образом, для большинства рассматриваемых систем экспериментальное и теоретическое значение термодинамического параметра взаимодействия второго порядка находятся довольно близко друг к другу. Это говорит в пользу возможности использования метода численного дифференцирования для оценки экспериментальных значений термодинамических параметров взаимодействия первого и второго порядков в жидких бинарных сплавах для большинства рассмотренных систем.

При сопоставлении теории с экспериментом следует иметь в виду, что здесь имеем дело с физикой жидкост-

ти, где теоретические модели очень приближенные, а зачастую, просто условные. С другой стороны, результаты термодинамического эксперимента также могут нести существенную погрешность. Поэтому оценки термодинамических параметров по результатам термодинамического эксперимента имеют, как правило, значительную экспериментальную неопределенность. Тем более, это относится к термодинамическим параметрам взаимодействия второго порядка, которые являются довольно тонкими термодинамическими характеристиками. Поэтому при сопоставлении экспериментальных и теоретических значений термодинамических параметров взаимодействия второго порядка невозможно ожидать математической точности. Достаточно совпадения по порядку величины. Смысл понятия порядка величины точно не определен и зависит от контекста. В данном случае значения от 1 до 10 суть величины одного порядка, так же как значения от 0 до 1. Исключение составляют сопоставления теории с экспериментом для систем Hg–Zn (для 298 K), Al–Ag, Fe–Cr, Ag–Au, но здесь значения параметров $\rho_2^{(2)}$ довольно малы.

Приведенные в предыдущем абзаце рассуждения служат пояснением, почему оценка термодинамических параметров взаимодействия второго порядка по экспериментальным данным может отличаться от теоретических оценок как по величине, так и по знаку.

В заключение рассмотрим вопрос о возможных значениях термодинамических параметров взаимодействия третьего порядка в жидких бинарных сплавах. Существует мнение, что метод численного дифференцирования недостаточно точен для вычисления производной третьего порядка. Авторы не пытаются оспаривать это мнение. Поэтому в настоящей работе не оцениваются этим методом экспериментальные значения параметров взаимодействия третьего порядка $\zeta_2^{(2)}$. Однако ориентировочное представление о порядке величины этих параметров можно получить с помощью теоретической модели, использованной выше. При этом имеем формулу [12]

$$\zeta_2^{(2)} = -\frac{1}{373 \cdot 248}(\varepsilon_2^{(2)})^6 + \frac{1}{1728}(\varepsilon_2^{(2)})^5 + \frac{5}{1728}(\varepsilon_2^{(2)})^4 - \frac{1}{24}(\varepsilon_2^{(2)})^3 - \frac{1}{6}(\varepsilon_2^{(2)})^2. \quad (7)$$

Эта формула получена методом группового разложения. Вычисленные по формуле (7) значения параметров $\zeta_2^{(2)}$ для сплавов, представленных в первой группе табл. 1, приведены в последнем столбце этой таблицы. Заметим, что во всех системах этой группы абсолютные значения параметров взаимодействия первого, второго и третьего порядков не превосходят числа 10.

Таким образом, формулы (2) и (4) представляют метод обработки экспериментальных данных, а формулы (6) и (7) – результаты статистической теории сплавов [12].

Выводы. Для оценки термодинамических параметров взаимодействия первого и второго порядков в малоцентрированных жидких бинарных сплавах в принципе возможно использовать метод численного дифференцирования, основанный на первой интерполяционной формуле Ньютона. Эти значения оценены для тридцати семи рассмотренных в настоящей работе систем.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Lupis C.H.P., Elliott J.F. Generalized interaction coefficients. Part I. Definitions // *Actametallurgica*. 1966. Vol. 14. No. 4. P. 529 – 538.
2. Люпис К. Химическая термодинамика материалов. – М.: Металлургия, 1989. – 504 с.
3. Вагнер К. Термодинамика сплавов. – М.: Металлургиздат, 1957. – 179 с.
4. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. – М.: Наука, 1974. – 384 с.
5. Гильдебранд Дж.Г. Растворимость неэлектролитов. – М.: ГОНТИ, 1938. – 168 с.
6. Григорян В.А., Белянчиков Л.Н., Стомахин А.Я. Теоретические основы электросталеплавильных процессов. – М.: Металлургия, 1987. – 272 с.
7. Guggenheim E.A. Mixtures. – Oxford: Clarendon Press, 1952. – 270 p.
8. Kirkwood J.G. Order and disorder in binary liquid solutions // *Journal of physical chemistry*. 1939. Vol. 43. No. 1. P. 97 – 107.
9. Бадалян Д.А., Хачатурян А.Г. Учет корреляции в упорядочивающемся твердом бинарном растворе // *Физика твердого тела*. 1970. Т. 12. № 2. С. 439 – 447.
10. Taggart G.B., Tahir-Kheli R.A. Role of three-body potentials in disordered alloys // *Progress of theoretical physics*. 1971. Vol. 46. No. 6. P. 1690 – 1702.
11. Taggart G.B., Tahir-Kheli R.A. High temperature series expansion for the correlation functions in disordered binary alloys // *Physica*. 1973. Vol. 68. No. 1. P. 93 – 106.
12. Большов Л.А. Статистическая теория многокомпонентных и малоцентрированных сплавов: Дисс. ... докт. физ.-мат. наук. – М.: МГУ, 1991. – 496 с.
13. Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика. – М.: Мир, 1980. – 544 с.
14. Ruban A.V., Abrikosov I.A. Configurational thermodynamics of alloys from first principles: effective cluster interactions // *Reports on progress of physics*. 2008. Vol. 71. No. 4. Id. 046501.
15. Богданов В.И., Большов Л.А., Корнейчук Е.А. и др. Межатомные взаимодействия и термодинамические параметры в малоцентрированных твердых растворах системы Ag–Au // *Физика металлов и металловедение*. 2015. Т. 116. № 7. С. 709 – 713.
16. Большов Л.А., Богданов В.И., Горбунов В.А. Оценка значений термодинамических параметров взаимодействия второго порядка в бинарных сплавах по экспериментальным термодинамическим данным // *Физика металлов и металловедение*. 2010. Т. 109. № 4. С. 351 – 356.
17. Большов Л.А., Корнейчук С.К. Термодинамические параметры первого порядка в малоцентрированных бинарных сплавах // *Журнал физической химии*. 2015. Т. 89. № 12. С. 1841 – 1844.
18. Демидович Б.П., Марон А.И. Основы вычислительной математики. – СПб.: Лань, 2007. – 672 с.
19. Самарин М.К. Ньютона интерполяционная формула. – В кн. «Математическая энциклопедия. Том 3». – М.: Советская энциклопедия, 1982. С. 1092.
20. Hultgren R., Desai P.D., Hawkins D.T. etc. Selected values of thermodynamic properties of binary alloys. – Metals Park, Ohio: ASFM, 1973. – 1435 p.

Поступила в редакцию 14 марта 2019 г.

После доработки 19 апреля 2019 г.

Принята к публикации 3 августа 2019 г.

THERMODYNAMIC INTERACTION COEFFICIENTS IN LOW-CONCENTRATED LIQUID BINARY ALLOYS

L.A. Bol'shov, S.K. Korneichuk

Vologda State University, Vologda, Russia

Abstract. The article considers basic expansion of thermodynamics and thermodynamic interaction coefficients of the first, second and third orders of low-concentrated binary alloys. The values of interaction coefficients of the first and second orders in 37 such systems were estimated according to experimental thermodynamic data on the concentration dependence of excess chemical potential of an impurity in liquid alloys of binary systems. Estimates were obtained by the numerical differentiation method. This method is based on Newton first interpolation formula. Calculation formulas for the corresponding estimates are given. A simple theory is proposed that relates the thermodynamic interaction coefficient of the second order with the first-order one in the liquid alloy of certain system. The theory is based on the lattice model of a solution and the principles of statistical mechanics. The FCC lattice is adopted as a model lattice. The model of pair interaction between metal atoms in the alloy was used. The radius of this interaction corresponds to radius of the nearest atomic shell. Using the proposed theory, thermodynamic interaction coefficients of the second-order for all 37 systems considered in this work, as well as the values of the third order interaction coefficients for 23 systems out of 37 mentioned above, were calculated. For these 23 systems, theoretical estimates of the second-order interaction coefficients are in agreement with experimental ones both by sign and by order of magnitude. This circumstance can be considered as evidence of applicability of the numerical differentiation method for estimation of thermodynamic interaction coefficients of the first and second orders in liquid binary alloys. The accuracy of estimating the values of the third derivative by numerical differentiation is insufficient. That makes it impossible to compare the calculated values of the interaction coefficients of the third order with the experimental ones, obtained by this method. It can be assumed that the theoretical calculations just give an idea of the magnitudes' order of these coefficients.

Keywords: thermodynamics of alloys, statistical mechanics, binary alloys, thermodynamic interaction coefficient, fundamental series expansion, numerical differentiation, Newton interpolation formula, pair interaction, lattice model of solution.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-713-718

REFERENCES

1. Lupis C.H.P., Elliott J.F. Generalized interaction coefficients. Part I. Definitions. *Acta metallurgica*. 1966, vol. 14, no. 2, pp. 529–538.
2. Lupis C.H.P. *Chemical thermodynamics of Materials*. New York: North Holland, 1983, 581 p. (Russ. ed.: Lupis C. *Khimicheskaya termodinamika materialov*. Moscow: Metallurgiya, 1989, 503 p.).
3. Wagner C. *Thermodynamics of alloys*. Cambridge, Addison-Wesley Press., 1952. (Russ. ed.: Wagner C. *Termodinamika splavov*. Moscow: Metallurgizdat, 1957, 179 p.).
4. Khachaturyan A.G. *Teoriya fazovykh prevrashchenii i struktura tverdykh rastvorov* [Theory of phase transitions and structure of solid solutions]. Moscow: Nauka, 1974, 384 p. (In Russ.).
5. Hildebrand Joel H. *Solubility of non-electrolytes*. New York: Reinhold publishing corporation, 1936, 203 p. (Russ. ed.: Hildebrand J.H. *Rastvorimost' neelektrolitov*. Moscow: GONTI, 1938, 168 p.).
6. Grigoryan V.A., Belyanchikov L.N., Stomakhin A.Ya. *Teoreticheskie osnovy elektrometallurgicheskikh protsessov* [Theoretical fundamentals of electric steelmaking processes]. Moscow: Metallurgiya, 1987, 272 p. (In Russ.).
7. Guggenheim E.A. *Mixtures*. Oxford: Clarendon Press, 1952, 270 p.
8. Kirkwood J.G. Order and disorder in binary liquid solutions. *Journal of physical chemistry*. 1939, vol. 43, no. 1, pp. 97–107.
9. Badalyan D.A., Khachaturyan A.G. Allowance of correlation in ordered solid binary solution. *Fizika tverdogo tela*. 1970, vol. 12, no. 2, pp. 439–447. (In Russ.).
10. Taggart G.B., Tahir-Kheli R.A. Role of three-body potentials in disordered alloys. *Progress of theoretical physics*. 1971, vol. 46, no. 6, pp. 1690–1702.
11. Taggart G.B., Tahir-Kheli R.A. High temperature series expansion for correlation functions in disordered binary alloys. *Physica*. 1973, vol. 68, no. 1, pp. 93–106.
12. Bol'shov L.A. *Statisticheskaya teoriya mnogokomponentnykh i malokontsentrirrovannykh splavov: diss... doktora fiz.-mat. nauk* [Statistical theory of multicomponent and low-concentration alloys: Dr. Phys.-Math. Sci. Diss.]. Moscow: 1991, 496 p. (In Russ.).
13. Mayer J.E., Goeppert Mayer M. *Statistical mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1948. (Russ. ed.: Mayer J., Goeppert Mayer M. *Statisticheskaya mekhanika*. Moscow: Mir, 1980, 549 p.).
14. Ruban A.V., Abrikosov I.A. Configurational thermodynamics of alloys from first principles: effective cluster interactions. *Reports on progress of physics*. 2008, vol. 71, no. 4, id. 046501.
15. Bogdanov V.I., Bol'shov L.A., Korneichuk E.A., Popov V.A., Korneichuk S.K., Badanin D.A. Interatomic interactions and thermodynamic parameters in dilute solid solutions of the Ag–Au system. *Physics of Metals and Metallography*. 2015, vol. 116, no. 7, pp. 671–675.
16. Bol'shov L.A., Bogdanov V.I., Gorbunov V.A. Estimation of the thermodynamic parameters of second-order interactions in binary alloys on the basis of experimental thermodynamic data. *Physics of Metals and Metallography*. 2010, vol. 109, no. 4, pp. 323–328.
17. Bol'shov L.A., Korneichuk S.K. Thermodynamic parameters of the first order in low-concentration binary alloys. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2015, vol. 89, no. 12, pp. 2174–2177.
18. Demidovich B.P., Maron A.I. *Osnovy vychislitelnoi matematiki* [Basics of computational mathematics]. St. Petersburg: Lan', 2007, 672 p. (In Russ.).
19. Samarin M.K. Newton interpolation formula. In: *Matematicheskaya entsiklopediya*. T. 3. [Mathematical encyclopedia. Vol. 3]. Moscow: Sovetskaya entsiklopediya, 1982, p. 1092. (In Russ.).
20. Hultgren R., Desai P.D., Hawkins D.T., Gleiser M., Kelley K.K. *Selected Values of Thermodynamic Properties of Binary Alloys*. Metals Park, Ohio: ASFM, 1973, 1435 p.

Information about the authors:

L.A. Bol'shov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor of the Chair of Mathematics (labolshov@mail.ru)

S.K. Korneichuk, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Professor of the Chair of Physics (korn62@mail.ru)

Received March, 14, 2019

Revised April 19, 2019

Accepted August 3, 2019

УДК 669:541.1

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЛАВА ОКСИДНО-ФТОРИДНОЙ ПРОМЫШЛЕННОЙ ШЛАКООБРАЗУЮЩЕЙ СМЕСИ

*Гельчинский Б.Р.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией порошковых,
композиционных и наноматериалов (brg47@list.ru)*

*Дюльдина Э.В.², к.т.н., доцент, профессор кафедры металлургии и химической технологии
Леонтьев Л.И.^{1,3,4}, академик РАН, советник, д.т.н., профессор, главный научный сотрудник*

¹Институт металлургии УрО РАН

(620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101)

²Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова

(455000, Россия, Челябинская обл., Магнитогорск, пр. Ленина, 38)

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

(119049, Россия, Москва, Ленинский пр., 4)

⁴Президиум РАН

(119991, Россия, Москва, Ленинский пр., 14)

Аннотация. В данной работе обсуждаются результаты молекулярно-динамического моделирования расплава многокомпонентной окисно-фторидной системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-Na}_2\text{O-K}_2\text{O-CaF}_2\text{-FeO}$, соответствующей составу промышленной шлакообразующей смеси (ШОС), используемой при разливке стали для наведения шлака в кристаллизаторе машины непрерывного литья заготовок. Химический состав ШОС, % (по массе): 35,35 SiO_2 ; 30,79 CaO ; 8,58 Al_2O_3 ; 1,26 MgO ; 13,73 CaF_2 ; 7,57 Na_2O ; 0,88 K_2O ; 1,82 FeO . С учетом этих концентраций был проведен пересчет состава на мольные доли и вычислено соответствующее число ионов в модели для каждого компонента. Моделирование восьмикомпонентного окисно-фторидного расплава размером 2003 иона в основном кубе (длина ребра 31,01 Å) с периодическими граничными условиями проведено при экспериментально определенной температуре начала затвердевания (1257 К) и фиксированном объеме. Кулоновское взаимодействие учитывали методом Эвальда-Хансена. Шаг по времени равнялся $0,05t_0$, где t_0 – внутренняя единица времени, равная $7,608 \cdot 10^{-14}$ с. Плотность расплава ($3,04 \text{ г/см}^3$) принимали на основании собственных экспериментальных данных. Потенциалы межатомного взаимодействия были выбраны в форме Борна-Майера. По результатам моделирования определена структура субкристаллических группировок атомов, присутствующих в расплаве при температуре начала затвердевания. Проведено обсуждение результатов моделирования и их сопоставление с литературными данными. Показано, что компьютерная модель позволяет получить достаточно реалистичную картину атомной структуры шлакового расплава, свидетельствующую о том, что основной структурной составляющей всех силикатных систем является кремнекислородный тетраэдр. Тетраэдры в силикатах находятся либо в виде изолированных друг от друга структурных единиц, либо, соединяясь между собой через вершины, образуют комплексные анионы, что согласуется с теорией шлаковых расплавов. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет получить адекватную информацию о структуре расплава определенного химического состава.

Ключевые слова: окисно-фторидные расплавы, многокомпонентные, структура, свойства, компьютерное моделирование.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-719-724

ВВЕДЕНИЕ

Многокомпонентные окисные и окисно-фторидные шлакообразующие смеси (ШОС) широко применяются в сталеплавильном производстве для решения многих задач, таких как изоляция металла от контакта с воздухом, удаление нежелательных компонентов из металла в процессе разливки, улучшение качества непрерывнолитых заготовок и слэбов и т. д. Металлургическими предприятиями и организациями – производителями ШОС постоянно ведутся работы по созданию новых и совершенствованию существующих ШОС с целью повышения эффективности их применения в соответствии с конкретными условиями и задачами производства [1 – 6]. Для разработки более эффектив-

ных ШОС необходимо знать фундаментальные закономерности, определяющие их физико-химические и технологические свойства. Такую информацию может дать микроскопическая теория расплавов и современные методы компьютерного моделирования. В данной работе обсуждаются результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования расплава многокомпонентной окисно-фторидной системы, соответствующей по химическому составу промышленной шлакообразующей смеси, используемой при разливке стали для наведения шлака в кристаллизаторе машины непрерывного литья заготовок. По результатам моделирования определена структура субкристаллических группировок атомов, присутствующих в расплаве при температуре начала затвердевания. Проведено обсуждение полученных ре-

зультатов и их сопоставление с литературными данными [7 – 10].

МЕТОДИКА КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Выполнено МД моделирование восьмикомпонентного оксидно-фторидного расплава, соответствующего химическому составу промышленной ШОС марки Accutherm ST-SP/601-A, % (по массе): 35,35 SiO₂; 30,79 CaO; 8,58 Al₂O₃; 1,26 MgO; 13,73 CaF₂; 7,57 Na₂O; 0,88 K₂O; 1,82 FeO. С учетом этих концентраций проведен пересчет состава на мольные доли и вычислено соответствующее число ионов в модели для каждого компонента. Система состояла из 2003 атомов в основном кубе (длина ребра 31,011 Å), установлены периодические граничные условия. Кулоновское взаимодействие учитывали методом Эвальда-Хансена [11]. Шаг по времени равнялся 0,05*t*₀, где *t*₀ – внутренняя единица времени, равная 7,608·10⁻¹⁴ с. Плотность расплава 3,04 г/см³ при температуре начала затвердевания (1257 К) принимали на основании собственных экспериментальных данных [12]. Потенциалы межчастичного взаимодействия были выбраны в форме Борна-Майера:

$$u_{ij}(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r} + B_{ij} \exp\left(-\frac{r}{\rho_{ij}}\right) + \frac{C_{ij}}{r^6},$$

где *r* – расстояние между центрами ионов; *Z_i* – заряд *i*-го иона в единицах элементарного заряда *e*; *B_{ij}* и *ρ_{ij}* – параметры отталкивания ионных оболочек частиц *i* и *j*; *C_{ij}* – параметры эффективного диполь-дипольного взаимодействия.

Заряды ионов приняли следующими: 4,00 для Si; –2,00 для кислорода; 3,00 для Al; 2,00 для Ca, Mg и Fe; 1,00 для Na и K; –1,00 для F. Параметры *B_{ij}* для различных пар ионов одинакового знака (кроме пар O–O) приняли равными нулю, поскольку эти пары из-за кулоновского отталкивания находятся на большом расстоянии. Для пары O–O значение *B_{ij}* взяли из работы [13]. Остальные параметры *B_{ij}* приведены в обзоре [11]. Все коэффициенты *ρ_{ij}* = 0,29 Å [11].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Основными структурными характеристиками некристаллических многокомпонентных систем являются парциальные парные корреляционные функции (ППКФ) *g_{ij}(r)*, описывающие вероятность обнаружения пары частиц сортов *i* и *j* на расстоянии *r*. Они нормированы так, что при *r* → ∞ все *g_{ij}(r)* → 1. Эти функции непосредственно рассчитываются в методе молекулярной динамики.

Базовую информацию о структуре моделируемого расплава дают ППКФ для пар Si–O и Al–O, показанные на рис. 1. Они имеют четкий и высокий пик в ин-

тервале расстояний от 1,4 до 2,0 Å, за которым находится широкая область нулевого значения функции. Это свидетельствует о том, что ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ окружены притянутыми к ним ионами O^{2–}, образующими своеобразную оболочку. Такие группировки из этих ионов участвуют в структурообразовании расплава как самостоятельные структурные единицы. Координаты пиков указывают среднее расстояние между центральными ионами Si⁴⁺ и Al³⁺ и кислородным окружением, составляющее 1,55 и 1,65 Å соответственно. Значение 1,55 Å близко к расстоянию Si–O в природных силикатах, равному 1,6 Å. Количество ионов O^{2–}, окружающих ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ (так называемое координационное число *Z*), находится интегрированием ППКФ по ширине первого пика. Для пиков ППКФ Si⁴⁺ и Al³⁺ численное интегрирование дает величину *Z*, равную 3,75 и 3,23 соответственно. Эти значения близки к 4, т.е. ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ окружены обычно четырьмя ионами O^{2–} и в расплаве присутствуют кремне- и алюмокислородные тетраэдры. Средние размеры тетраэдров (расстояние между центрами ионов кислорода в тетраэдре) находятся по максимуму на кривой ППКФ для пары O–O, также показанному на рис. 1 и составляющему 2,55 Å.

Небольшое отличие координационного числа 3,75 для кремния, полученного по результатам моделирования, от значения 4, вероятно связано с тем, что в некоторых кремнекислородных тетраэдрах ионы O^{2–} замещены практически равновеликими ионами F^{1–}. Более значительное отличие от значения 4 координационного числа пары Al–O несомненно связано с тем, что в алюмосиликатах алюминий находится не только в тетраэдрах, но и вне их, выполняя роль связки, аналогичную, например, ионам кальция.

Согласно современным теоретическим представлениям, субкристаллические анионные комплексы, состоящие из кремне- и алюмокислородных тетраэдров,

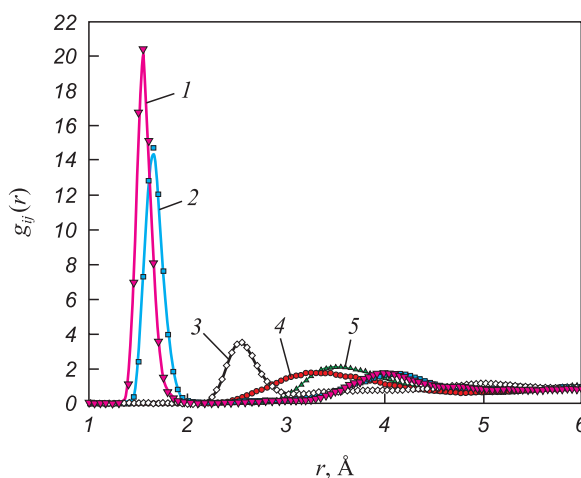


Рис. 1. Парциальные парные корреляционные функции для пар Si–O (1), Al–O (2), O–O (3), Na–Na (4) и Ca–Ca (5)

Fig. 1. Partial pair correlation functions for pairs: Si–O (1), Al–O (2), O–O (3), Na–Na (4) and Ca–Ca (5)

соединяются друг с другом в основном ионами кальция. Большое сходство ППКФ для пар Ca–Ca и Na–Na (см. рис. 1) указывает на тот факт, что в соединительной функции принимают практически равное участие и ионы кальция, и ионы натрия. Ионные радиусы этих элементов различаются незначительно: 1,01 Å для кальция и 0,98 Å для натрия, что дает им возможность замещать друг друга без существенного искажения кристаллической решетки.

При небольших перегревах над температурой ликвидус в шлаковых расплавах возникают субкристаллические анионные группировки, аналогичные природным минералам. Тип анионных группировок, образовавшихся в моделируемой системе алюмосиликата, можно определить по параметрам ППКФ пар Si–Si, Si–Al и Al–Al (рис. 2).

На кривых, представленных на рис. 2, имеется по одному пику ППКФ, соответствующему двум ближайшим атомам каждой пары, а также по одному локальному максимуму, соответствующему расположению двух более удаленных атомов пары. Расстояние между двумя ближайшими атомами пар Si–Si, Si–Al и Al–Al в среднем составляет 3,15, 3,20 и 3,15 Å соответственно, что равно удвоенному расстоянию между ионами этих элементов и кислорода в тетраэдрах. Положение вторых максимумов кривых ППКФ рассматриваемых пар атомов составляет 5,45, 5,85 и 5,45 Å, что равно удвоенной длине ребра тетраэдров.

Следует отметить, что положение и высота пиков ППКФ для ряда оксидов, дающих основной вклад в интегральную ПКФ, например, SiO₂, FeO, MgO, CaO, Al₂O₃, Na₂O хорошо согласуются с данными дифракционного эксперимента для соответствующих расплавов [14]. Из экспериментальных исследований шлаковых систем, использующих химический и рентгеноструктурный анализ, а также из теории шлаков из-

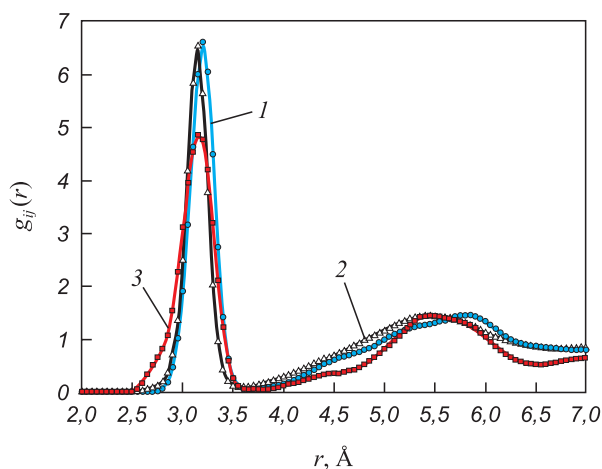


Рис. 2. Парциальные парные корреляционные функции для пар Si–Al (1), Si–Si (2) и Al–Al (3)

Fig. 2. Partial pair correlation functions for pairs: Si–Al (1), Si–Si (2) and Al–Al (3)

вестно [15–21], что в минералах, как и в большинстве неорганических соединений, отсутствуют замкнутые группировки атомов в виде самостоятельных молекул и что частицами, составляющими кристаллы, являются преимущественно ионы. Так, в узлах кристаллических решеток оксидов металлов располагаются катионы последних и анионы кислорода. Установлено, что основной структурной составляющей всех силикатных систем является кремнекислородный тетраэдр SiO₄^{4–}, в вершинах которого располагаются четыре крупных аниона O^{2–}, а в центре – маленький высокочарядный катион Si⁴⁺. Тетраэдры в силикатах находятся либо в виде изолированных друг от друга структурных единиц, либо, соединяясь между собой через вершины, образуют комплексные анионы (рис. 3, а, б).

Это положение теории хорошо подтверждают данные визуализации ионной структуры, полученные авторами по результатам компьютерного моделирования. На рис. 3, в показан фрагмент системы Si–O–Al в форме шаров и стержней. Хорошо видна тетраэдрическая цепочка, в которой два соседних тетраэдра кремния и алюминия имеют один общий ион кислорода. Следовательно, эти тетраэдры соединены в цепочки, близкие к цепочкам природного минерала волластонита. Цепочечная структура группировок, состоящих из кремне- и алюмокислородных тетраэдров, подтверждается еще тем, что координационное число для всех пар Si–Si, Al–Al и Si–Al близко к двум.

В моделируемой системе в довольно большом количестве присутствуют атомы фтора, причем их ППКФ

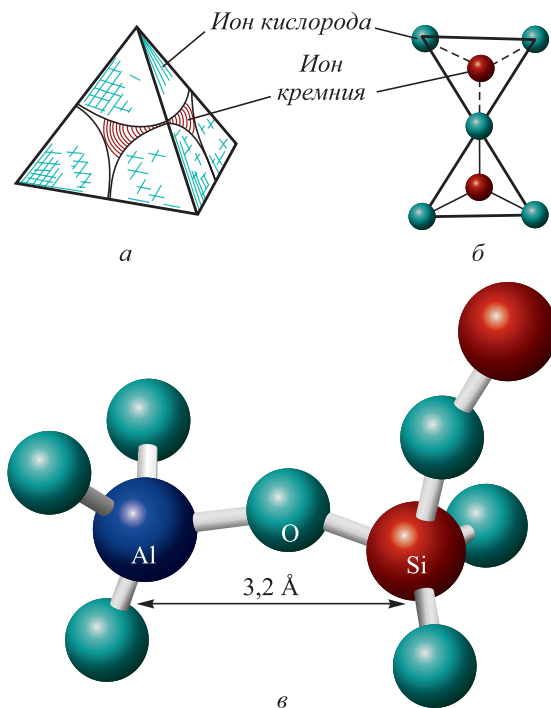


Рис. 3. Кремнекислородные (а, б) [16] и кремне-алюмокислородные (в) тетраэдры

Fig. 3. Silicon-oxygen (a, b) [16] and silica-alumina tetrahedra (v)

принципиально отличается от аналогичных функций всех других элементов (рис. 4).

Из рис. 4 видно, что ППКФ для пары F–F мало отклоняется от единицы, т. е. фтор относительно равномерно распределен по объему расплава. Однако наблюдается некоторая тенденция к замещению фтором кислорода в некоторых тетраэдрах, а также к сближению ионов фтора с ионами кальция в промежутках между анионными цепочками, состоящими из тетраэдров. Присутствие отрицательно заряженных ионов фтора вместе с ионами кальция и натрия в промежутках между цепочками тетраэдров ослабляет связь этих цепочек друг с другом, что объясняет хорошо известный факт уменьшения вязкости шлаковых расплавов при введении в них фторсодержащих компонентов. Фактическое совпадение результатов моделирования со свойствами реальных ШОС дает основание полагать, что по данным моделирования уже сейчас можно предлагать конкретные рекомендации, например увеличить содержание фтора и/или натрия и калия для уменьшения вязкости расплава.

Относительно небольшие пики ППКФ для пар Ca–F и Si–F дают основание полагать, что в расплаве присутствуют ионные группировки, близкие по структуре к кустидину, имеющему минералогическую формулу $\text{Ca}_4(\text{Si}_2\text{O}_7)\text{F}_2$. Наличие кустидина в затвердевших фторсодержащих шлаках установлено экспериментально рентгенофазовым анализом [10].

Выводы

Основываясь на экспериментальных данных о плотности, в приближении модели ионной связи проведено молекулярно-динамическое моделирование восьми-

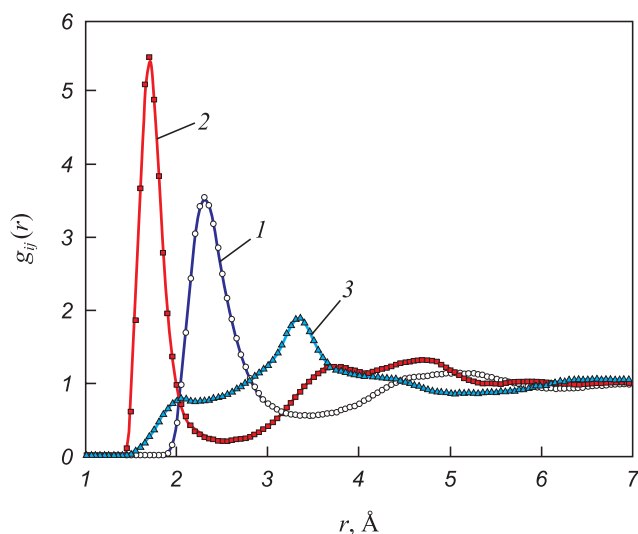


Рис. 4. Парциальные парные корреляционные функции для пар Ca–F (1), Si–F (2) и F–F (3)

Fig. 4. Partial pair correlation functions for pairs: Ca–F (1), Si–F (2) and F–F (3)

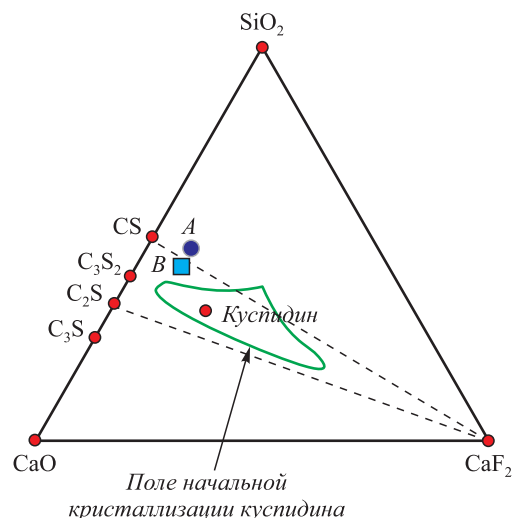


Рис. 5. Состав шлака на фазовой диаграмме тройной системы [10]

Fig. 5. Slag composition in phase diagram of the ternary system [20]

компонентного оксидно-фторидного расплава при температуре ликвидус.

Показано, что компьютерная модель позволяет получить достаточно реалистичную картину атомной структуры шлакового расплава, которая по основным параметрам (положение и высота пиков парциальных ПКФ) хорошо согласуется с данными дифракционного эксперимента. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет получить адекватную информацию о структуре расплава определенного химического состава, что облегчает подбор шлакообразующих смесей для конкретных условий их использования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Филиппов А.В., Дидович С.В., Селиванов В.Н. Шлакообразование в кристаллизаторе слывовой МНЛЗ // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2013. № 4. С. 40 – 42.
2. Макуров С.Л., Смирнов А.Н., Епишев М.В., Шлемко С.В. Исследование и оптимизация технологических свойств шлакообразующих смесей для непрерывной разливки стали с повышенной скоростью // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 12. С. 13 – 16.
3. Экхардт Д., Бехманн Д. Выбор шлакообразующих смесей для непрерывной разливки стали // Сталь. 2008. № 11. С. 19 – 22.
4. Суворов С.А., Вихров Е. А. Совершенствование ШОС для кристаллизаторов МНЛЗ // Сталь. 2010. № 4. С. 38 – 42.
5. Дюльдина Э.В., Селиванов В.Н., Лозовской Е.П., Коротин А.В. Исследование шлакообразования в промежуточном ковше МНЛЗ // Изв. вуз. Черная металлургия. 2013. № 5. С. 7 – 11.
6. Суворов С.А., Ордин В.Г., Ерошкин С.Б., Вихров Е.А. Кристаллизационная способность как критерий выбора ШОС в зависимости от марочного сортамента непрерывнолитых сталей // Сталь. 2010. № 12. С. 14 – 19.
7. Zhou Lejun, Wang Wanlin, Wei Juan, Lu Boxun. Effect of Na_2O and B_2O_3 on heat transfer behavior of low fluorine mold flux for casting medium carbon steels // ISIJ International. 2013. Vol. 53. No. 4. P. 665 – 672.
8. Wen Guang Hua, Zhu Xin Bai, Tang Ping etc. Influence of raw material type on heat transfer and structure of mold slag // ISIJ International. 2011. Vol. 51. No. 7. P. 1028 – 1032.

9. Takahira N., Hanao M., Tsukaguchi Y. Viscosity and solidification temperature of SiO_2 -CaO- Na_2O melts for fluorine free mould flux // *ISIJ International*. 2013. Vol. 53. No. 5. P. 818 – 822.
10. Hanao Masahito. Influence of basicity of mold flux on its crystallization rate // *ISIJ International*. 2013. Vol. 53. No. 4. P. 648 – 654.
11. Белашенко Д.К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ. – М.: МИСИС, 2005. – 408 с.
12. Дюльдина Э.В., Селиванов В.Н., Лозовский Е.П. и др. Физико-химические свойства расплавов шлакообразующих смесей, используемых при непрерывной разливке стали // *Расплавы*. 2009. № 6. С. 3 – 10.
13. Белашенко Д.К., Сапожникова С.Ю. Компьютерное моделирование структуры, термодинамических свойств и механизма переноса ионов в криолит-глинозёмных расплавах // *Журнал физической химии*. 1997. Т. 71. № 6. С. 1036 – 1040.
14. Пастухов Э.А., Ватолин Н.А., Лисин В.Л. и др. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. – Екатеринбург: УрОПАН, 2003. – 355 с.
15. Deer W.A., Howie R.A., Zussman J. *Rock-Forming Minerals*. Vol. 2: Chain silicates. Longmans Green and Co, 1963. – 379 p.
16. Гольдштейн Н.Л. Краткий курс теории металлургических процессов. – Свердловск: Металлургиздат, 1961. – 334 с.
17. Есин О.А., Гельд П.В. Физическая химия пирометаллургических процессов. Ч. 2. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Металлургия, 1966. – 702 с.
18. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Molecular size distribution in multichain polymers: application of polymer theory to silicate melts // *Can J. Chem.* 1970. Vol. 48. P. 1456 – 1464.
19. Gaskell D.R. Activities and free energies of mixing in binary silicate melts // *Met. Trans.* 1977. Vol. 8B. No. 1. P. 131 – 145.
20. Elfsberg J., Matsushita T. Measurements and calculation of interfacial tension between commercial steels and mould flux slags // *Steel Research International*. 2011. Vol. 82. No. 4. P. 404 – 414.
21. Singh D., Bhardwaj P., Yang Y.D. etc. The influence of carbonaceous material on the melting behaviour of mould powder // *Steel Research International*. 2010. Vol. 81. No. 11. P. 974 – 979.

Поступила в редакцию 31 июля 2019 г.

После доработки 4 августа 2019 г.

Принята к публикации 6 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 719–724.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF THE MELT OF OXIDE-FLUORIDE INDUSTRIAL SLAG-FORMING MIXTURE

B.R. Gel'chinskii¹, E.V. Dyul'dina², L.I. Leont'ev^{1,3,4}

¹ Institute of Metallurgy, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

² Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Chelyabinsk Region, Russia

³ National University of Science and Technology "MISIS" (MISIS), Moscow, Russia

⁴ Scientific Council on Metallurgy and Metal Science of Russian Academy of Sciences (Department of Chemistry and Material Sciences), Moscow, Russia

Keywords: oxide-fluoride melts, multicomponent, structure, properties, computer simulation.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-719-724

REFERENCES

1. Filippov A.V., Didovich S.V., Selivanov V.N. Slag formation in the mold of slab CCM. *Problemy chernoi metallurgii i materialovedeniya*. 2013, no. 4, pp. 40–42. (In Russ.).
2. Makurov S.L., Smirnov A.N., Epishev M.V., Shlemko S.V. The study and optimization of technological properties of slag-forming mixtures for steel high-speed continuous casting. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2010, no. 12, pp. 13–16. (In Russ.).
3. Ekkhardt D., Bekhmann D. Selection of slag-forming mixtures for continuous casting of steel. *Stal'*. 2008, no. 11, pp. 19–22. (In Russ.).
4. Suvorov S.A., Vikhrov E. A. Improvement of slag-forming mixtures for continuous-casting machine molds. *Steel in Translation*. 2010, vol. 40, no. 4, pp. 341–346.
5. Dyul'dina E.V., Selivanov V.N., Lozovskoi E.P., Korotin A.V. Investigation of slag formation in the tundish of continuous caster. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2013, no. 5, pp. 7–11. (In Russ.).
6. Suvorov S.A., Ordin V.G., Eroshkin S.B., Vikhrov E.A. Solidification properties in the selection of slag-forming mixtures for continuous-cast steel of different grades. *Steel in Translation*. 2010, vol. 40, no. 12, pp. 1070–1076.
7. Zhou Lejun, Wang Wanlin, Wei Juan, Lu Boxun. Effect of Na_2O and B_2O_3 on heat transfer behavior of low fluorine mold flux for casting medium carbon steels. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 4, pp. 665–672.
8. Wen Guang Hua, Zhu Xin Bai, Tang Ping, Yang Bo, Yu Xiong. Influence of raw material type on heat transfer and structure of mold slag. *ISIJ International*. 2011, vol. 51, no. 7, pp. 1028–1032.
9. Takahira N., Hanao M., Tsukaguchi Y. Viscosity and solidification temperature of SiO_2 -CaO- Na_2O melts for fluorine free mould flux. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 5, pp. 818–822.
10. Hanao M. Influence of basicity of mold flux on its crystallization rate. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 4, pp. 648–654.
11. Belashchenko D.K. *Komp'yuternoe modelirovanie zhidkikh i amorfnykh veshchestv* [Computer simulation of liquid and amorphous substances]. Moscow: MISIS, 2005, 408 p. (In Russ.).

Abstract. The paper discusses the results of molecular dynamic simulation of a melt of the multicomponent oxide-fluoride system $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-Na}_2\text{O-K}_2\text{O-CaF}_2\text{-FeO}$, corresponding to composition of industrial slag-forming mixture (SFM) used in steel casting for slag targeting in the mold of a continuous casting machine (in wt %: 35.35 % SiO_2 , 30.79 % CaO , 8.58 % Al_2O_3 , 1.26 % MgO , 13.73 % CaF_2 , 7.57 % Na_2O , 0.88 % K_2O , and 1.82 % FeO). These concentrations were converted to mole fractions, and the number of ions was calculated for each of the components in the model. An eight-component oxide-fluoride melt containing 2003 ions in the main cube with a side length of 31.01 Å was simulated under periodic boundary conditions at an experimentally determined solidification onset temperature of 1257 K at constant volume. Coulomb interaction was taken into account by the Ewald-Hansen method. The time step was $0.05t_0$, where $t_0 = 7,608 \cdot 10^{-14}$ s is the internal unit of time. The melt density was taken to be 3.04 g/cm^3 based on our experimental data. The interparticle interaction potentials were chosen in the Born-Mayer form. Based on the simulation results, the structure of subcrystalline groups of atoms present in the melt at the temperature of solidification onset was determined. A discussion of the simulation results and their comparison with the literature data was held. It is shown that the computer model allows one to obtain a fairly realistic picture of atomic structure of the slag melt, indicating that the main structural component of all silicate systems is silicon-oxygen tetrahedron. Tetrahedra in silicates are either in the form of structural units isolated from each other, or, connecting together through peaks, they form complex anions. It is consistent with the theory of slag melts. Molecular-dynamic simulation allows one to obtain adequate information on structure of the melt of a certain chemical composition.

12. Dyul'dina E.V., Selivanov V.N., Lozovskii E.P., Istomin S.A., Ryabov V.V., Chentsov V.P. Physico-chemical properties of melts of slag-forming mixtures used in continuous casting of steel. *Rasplavy*. 2009, no. 6, pp. 3–10. (In Russ.).
13. Belashchenko D.K., Sapozhnikova S.Yu. Computer simulation of the structure and thermodynamic properties of cryolite-alumina melts and the mechanism of ion transfer. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 1997, vol. 71, no. 6, pp. 1036–1040. (In Russ.).
14. Pastukhov E.A., Vatolin N.A., Lisin V.L. etc. *Difraktsionnye issledovaniya stroeniya vysokotemperaturnykh rasplavov* [Diffraction studies of the structure of high-temperature melts]. Ekaterinburg: UrO RAN, 2003, 355 p. (In Russ.).
15. Deer W.A., Howie R.A., Zussman J. *Rock-Forming Minerals*. Vol. 2: Chain silicates. Longmans Green and Co, 1963, 379 p.
16. Gol'dshtein N.L. *Kratkii kurs teorii metallurgicheskikh protsessov* [A short course in the theory of metallurgical processes]. Sverdlovsk: Metallurgizdat, 1961, 334 p. (In Russ.).
17. Esin O.A., Gel'd P.V. *Fizicheskaya khimiya pirometallurgicheskikh protsessov: ch. 2* [Physical chemistry of pyrometallurgical processes: Part.2]. Moscow: Metallurgiya, 1966, 702 p. (In Russ.).
18. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Molecular size distribution in multichain polymers: application of polymer theory to silicate melts. *Can J. Chem.* 1970, vol. 48, pp. 1456–1464.
19. Gaskell D.R. Activities and free energies of mixing in binary silicate melts. *Met. Trans.* 1977, vol. 8B, no. 1, pp. 131–145.
20. Elfsberg J., Matsushita T. Measurements and calculation of interfacial tension between commercial steels and mould flux slags. *Steel Research International*. 2011, vol. 82, no. 4, pp. 404–414.
21. Singh D., Bhardwaj P., Yang Y.D., McLean A., Hasegawa M., Iwase M. The influence of carbonaceous material on the melting behaviour of mould powder. *Steel Research International*. 2010, vol. 81, no. 11, pp. 974–979.

Information about the authors:

B.R. Gel'chinskii, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, Head of the Laboratory of Powder, Composite and Nanomaterials (brg47@list.ru)
E.V. Dyul'dina, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Professor of the Chair “Metallurgy and Chemical Engineering”
L.I. Leont'ev, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Academician, Adviser of the Russian Academy of Sciences

Received July 31, 2019

Revised August 4, 2019

Accepted August 6, 2019

УДК 538.913

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМЫ Fe–P МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ*

Маркидонов А.В.^{1,2,3}, д.ф.-м.н., доцент кафедры естественнонаучных дисциплин
имени В.М. Финкеля (markidonov_artem@mail.ru)

Лубяной Д.А.², к.т.н., доцент кафедры экономики и управления

Коваленко В.В.¹, д.ф.-м.н., профессор кафедры естественнонаучных дисциплин
имени В.М. Финкеля

Старостенков М.Д.⁴, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики

¹ Сибирский государственный индустриальный университет
(654007, Россия, Кемеровская обл., Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева в г. Новокузнецке
(654000, Россия, Кемеровская обл., Новокузнецк, ул. Орджоникидзе, 7)

³ Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного университета
(654041, Россия, Кемеровская обл., Новокузнецк, ул. Циолковского, 23)

⁴ Алтайский государственный технический университет имени И.И. Ползунова
(656038, Россия, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

Аннотация. Проблема дефосфоризации железоуглеродистых сплавов является актуальной для металлургической отрасли, так как высокая концентрация фосфора способствует появлению целого ряда крайне нежелательных явлений. Решению этой задачи посвящено множество экспериментальных работ, но справиться с ней окончательно до сих пор не удалось. Любые натурные эксперименты, направленные на исследование процесса удаления фосфора, требуют немалых материальных и временных затрат, но при этом не гарантируют получение нужного результата. Поэтому для поиска новых подходов к разрешению обозначенной проблемы гораздо рациональнее использование методов численного моделирования с привлечением вычислительных возможностей современных компьютеров. В настоящее время компьютерные эксперименты являются таким же признанным методом исследования, как теоретическое исследование и реальный эксперимент. Для изучения поведения атомов фосфора в железе с помощью численного эксперимента необходимо построить расчетную модель и апробировать ее путем вычисления различных характеристик, значения которых заранее известны. В качестве метода компьютерного моделирования в данной работе был выбран метод молекулярной динамики. С его помощью можно проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов. Для описания межчастичного взаимодействия использовался потенциал, рассчитанный в рамках метода погруженного атома. Исследование проводилось на расчетной ячейке, имитирующей кристалл α -железа с атомами замещения фосфора. Построенная модель продемонстрировала удовлетворительные результаты при вычислении известных характеристик моделируемой системы. Были установлены зависимости изменения таких характеристик, как температурный коэффициент линейного расширения, температура плавления, скрытая теплота плавления и теплоемкость от концентрации атомов замещения фосфора, а также в отдельных случаях от величины приложенного внешнего давления. Расчеты показали, что, например, концентрация фосфора 0,5 % приводит к росту среднего теплового коэффициента линейного расширения на 9 %, снижению температуры и скрытой теплоты плавления на 5 %, а теплоемкости на 7 %.

Ключевые слова: кристалл, примесь, молекулярная динамика, потенциал, ЕАМ, температура, давление, теплота, энтальпия.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-725-731

ВВЕДЕНИЕ

Дефосфоризация железоуглеродистых сплавов является весьма актуальной задачей для металлургической отрасли, так как высокая концентрация фосфора может приводить к ряду крайне нежелательных явлений, таких как хладноломкость, охрупчивание границ зерен и т. д. Существуют различные направления решения проблемы удаления фосфора, которые постоянно совершенствуются [1 – 3]. Но любые натурные исследования процесса

дефосфоризации предполагают привлечение немалых финансовых и временных ресурсов. Поэтому для поиска новых подходов к разрешению обозначенной проблемы гораздо рациональнее использование методов численного моделирования с привлечением вычислительных возможностей современных ЭВМ. Ранее авторами данные методы успешно применялись для исследования процессов модифицирования системы дефектов в кристаллических структурах при внешних высокоинтенсивных воздействиях [4 – 7]. Представленная статья посвящена исследованию влияния примесей фосфора на термодинамические свойства кристаллического железа. Построение и апробация алгоритмов, моделирующих поведение

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 p_a.

ние фосфора в железе, позволит в дальнейшем провести исследование, например процессов связывания атомов фосфора фосфидообразующими элементами.

В данной работе объектом исследования выбран кристалл железа, содержащий атомы замещения фосфора. При этом необходимо учитывать, что исследуемый материал в процессе эксплуатации может подвергаться высоким температурам и давлениям, поэтому для моделирования требуются алгоритмы, позволяющие имитировать эти воздействия. Если рассматривать объект исследования на атомном уровне, то он будет представлять собой систему взаимодействующих объектов двух типов, различная концентрация которых влияет на свойства всей моделируемой системы. При этом частицы могут обладать высокой кинетической энергией, а также возможно их взаимодействие с внешними полями. Для реализации численного эксперимента, позволяющего смоделировать описанные выше условия, был выбран метод молекулярной динамики. Таким образом, цель проводимого исследования можно сформулировать как определение влияния концентрации фосфора на термодинамические свойства системы Fe–P, в том числе при постоянном внешнем давлении, с помощью метода молекулярной динамики.

ОПИСАНИЕ МЕТОДА ИССЛЕДОВАНИЯ

В основе метода молекулярной динамики лежит модельное представление о многоатомной системе как совокупности материальных точек, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона. Для интегрирования данных уравнений использовался скоростной алгоритм Верле, обеспечивающий постоянство энергии моделируемой системы. Учитывая, что объем и количество частиц системы также сохраняются, в данном случае моделируется микроканонический ансамбль (NVE). Для моделирования изотермо-изобарического ансамбля (NPT) использовался пропорциональный термостат Берендсена [8]. Расчеты выполнялись при помощи пакета XMD.

При построении потенциала межчастичного взаимодействия использовался метод погруженного атома (ЕАМ), базирующийся на квантово-механической теории функционала электронной плотности [9, 10]. Потенциальная энергия кристалла в данном случае представляет собой сумму энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия атомов с электронным газом:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_i \left(\sum_{j=1}^N \psi(r_{ij}) \right), \quad (1)$$

где $\varphi(r_{ij})$ – потенциал парного взаимодействия,

$F_i \left(\sum_{j=1}^N \psi(r_{ij}) \right)$ – энергия внедрения i -го атома в электрон-

ную плотность, $\psi(r_{ij})$ – функция одноэлектронной плотности.

При расчетах применялся парный потенциал, представляющий собой кусочно-заданную функцию, включающую экранированный кулоновский потенциал в форме Бирсака-Циглера [11]. Функциональный вид парного потенциала может быть представлен как

$$\begin{aligned} \varphi(r) = & \sum_k a_k (r - r_k)^{n_k} \theta(r_k - r) \theta(r - r_2) + \\ & + \theta(r_2 - r) \theta(r - r_1) \exp(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3) + \\ & + \theta(r_2 - r) \frac{Q_i Q_j}{r} \xi\left(\frac{r}{r_s}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\xi(x) = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4029x} + 0,02817e^{-0,216x}$, $\theta(r)$ – ступенчатая функция Хевисайда;

$r_s = \frac{0,4683766}{Q_i^{2/3} + Q_j^{2/3}} \cdot Q_{i(j)}$ – заряд ядра $i(j)$ -атома.

Функция плотности записывается в виде кубического сплайна

$$\psi(r) = \sum_k a_k (r_k - r)^3 \theta(r_k - r), \quad (3)$$

а одноэлектронная плотность задается как функция вида

$$F(\rho) = -\sqrt{\rho} + a_2 \rho^2 + a_4 \rho^4. \quad (4)$$

Численные значения параметров функций (2) – (4) указаны в работе [12]. Для их вычисления авторы исходили из результатов квантово-механических расчетов ab-initio. Ковалентная связь частиц фосфора не может быть описана рассмотренным типом потенциалов, поэтому его параметризация осуществлялась для описания взаимодействия примесей фосфора с частицами α -железа. Кроме того, все аллотропные модификации фосфора имеют дальнедействующее Ван-дер-ваальсовое взаимодействие, которое невозможно описать, используя формализм ЕАМ потенциала. Поэтому данным взаимодействием в подобных расчетах пренебрегают [13].

При построении расчетной ячейки моделируемой системы создавалась элементарная ячейка ОЦК-решетки с равновесным параметром $a_0 = 2.855 \text{ \AA}$ и транслировалась вдоль осей x , y , z . Полученная расчетная ячейка имитировала кристалл железа как основного компонента моделируемой системы и включала в себя 16 000 частиц ($20 \times 20 \times 20$ элементарных ячеек). Бесконечная протяженность кристалла достигалась использованием периодических граничных условий.

Известно, что в малых концентрациях фосфор растворяется в железе. Для моделирования атомов замещения в расчетной ячейке случайным образом выбиралось определенное количество частиц, соответствующее задаваемой концентрации, и при расчетах им присваивались свойства второстепенного компонента.

РЕЗУЛЬТАТЫ, ИХ АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ

На начальном этапе проведено исследование температурной зависимости параметра решетки, влияние температуры на который обусловлено несимметричностью потенциала межатомного взаимодействия. Для этого выполнен расчет температурного коэффициента линейного расширения. Истинный изобарический коэффициент вычислялся по формуле

$$\alpha = \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_P, \quad (5)$$

где l – линейный размер расчетной ячейки. При расчете аппроксимации построенной зависимости $l(T)$ использовался полином второй степени вида $l(T) = b_0 + b_1 T + b_2 T^2$. Численные эксперименты, проведенные с построенной моделью, дают вполне удовлетворительные результаты вычислений. Так, например, вычисленное истинное значение температурного коэффициента линейного расширения при 1200 К равно $21,2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, что отличается от справочного значения, указанного в работе [14], на 6 %. На всем представленном в данной работе температурном диапазоне погрешность вычисленных значений не превышает 8 %, за исключением результатов при 100 и 1000 К, которые явно выпадают из общей приведенной зависимости. При построении зависимостей $l(T)$ для однокомпонентной системы Fe оказалось, что аналитический вид аппроксимирующих полиномов отличается лишь свободным членом b_0 , а различия в остальных параметрах, как показал регрессионный анализ, являются статистически не значимыми. Таким образом, для рассматриваемой концентрации частиц фосфора в моделируемой системе полученные истинные температурные коэффициенты линейного расширения являются мало отличимыми. В данном случае более наглядной является зависимость среднего температурного коэффициента, определяемого как среднее значение истинных коэффициентов на конечном интервале температур, от концентрации частиц фосфора (рис. 1).

Расчеты показали, что рассматриваемая концентрация второстепенного компонента начинает оказывать существенное влияние (выходящее за рамки статистической погрешности) на свойства моделируемой системы при температурах, значительно превышающих температуру Дебая. Поэтому дальнейшее исследование проводилось при температурах, сопоставимых с температурой плавления рассматриваемого материала.

Температура плавления T_m является важной физической характеристикой вещества. Несмотря на то, что рассматривается двухкомпонентная система частиц, вычислялось определенное значение T_m , а не точка ликвидуса, так как для задаваемой концентрации частицы фосфора не образуют твердый раствор. При моделировании в условиях отсутствия зародыша жидкой

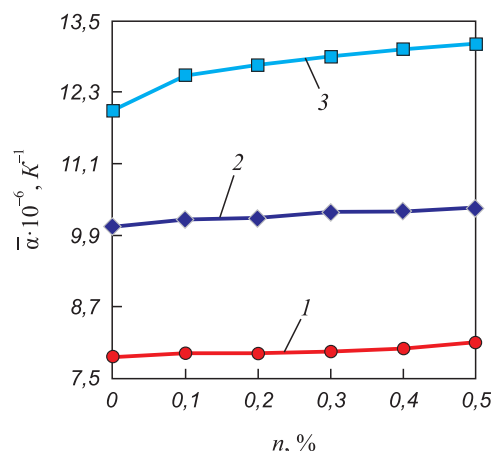


Рис. 1. Зависимость среднего температурного коэффициента линейного расширения $\bar{\alpha}$ от концентрации частиц фосфора n в расчетной ячейке на различных температурных интервалах, К:
1 – 300 – 1100; 2 – 600 – 1400; 3 – 900 – 1700

Fig. 1. Dependence of the average temperature coefficient of linear expansion $\bar{\alpha}$ on the concentration of phosphorus particles n in the calculation cell at different temperature ranges, K:
1 – 300 – 1100; 2 – 600 – 1400; 3 – 900 – 1700

фазы температура плавления, определяемая путем наблюдения за структурой кристаллической решетки при поэтапном нагревании, будет давать завышенное значение T_m , так как в данном случае система в области перегрева будет находиться в метастабильном состоянии, соответствующем кристаллической структуре [15, 16]. Поэтому для определения T_m моделируемая система разбивалась на две равные области, одна из которых содержала твердую, а вторая жидкую фазу, подтверждением наличия которых являлись построенные радиальные функции распределения. Если при заданной температуре T_0 устанавливается фазовое равновесие в системе (считалось, что система прибывает в равновесии, если не наблюдался фазовый переход в течение 30 000 шагов вычислительного эксперимента), то принимали $T_0 = T_m$. При $T_0 \neq T_m$ наблюдалось смещение межфазной границы с последующим плавлением или кристаллизацией расчетной ячейки. В англоязычной литературе данный способ вычисления температуры плавления получил название «метод сэндвича» [17].

Учитывая то, что температура плавления зависит от давления P , проведено исследование фазового равновесия системы при различном внешнем давлении и построена зависимость $T_m(P)$ однокомпонентной (рис. 2, а) и двухкомпонентной (рис. 2, б) системы.

Использование описанного выше подхода позволяет с достаточной точностью определить T_m . Полученные значения температуры плавления железа отличаются от справочных значений, представленных в работе [14], не более, чем на 2 %. Однако при этом угловой коэффициент dT/dP прямой и отличается от справочного значения на 12 %. Высокая погрешность обусловлена тем, что в работе [14] значения приведены для давле-

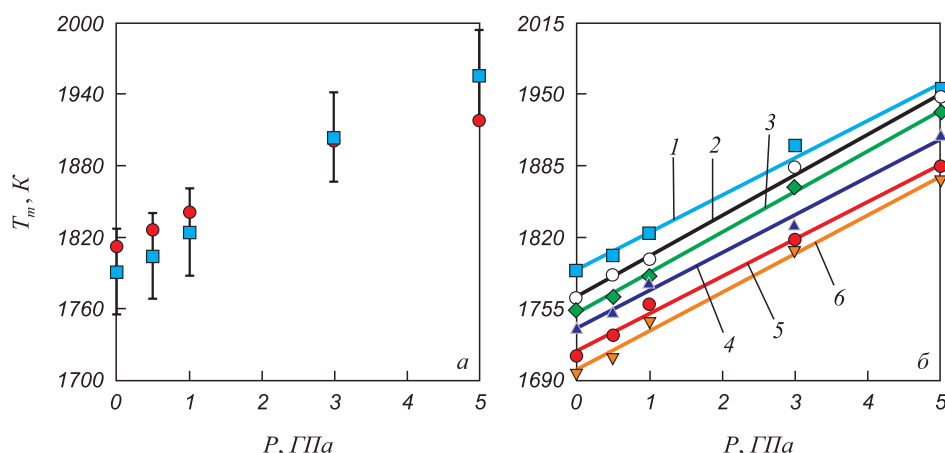


Рис. 2. Зависимость температуры плавления железа от давления (а), полученная в результате численного эксперимента (■), и ее сравнение со справочными значениями [14] (●) (построены планки погрешностей с относительными ошибками 2 %) и зависимость температуры плавления моделируемой двухкомпонентной системы от давления (б) при различной концентрации атомов фосфора (выполнена линейная аппроксимация данных), %:
1 – 0; 2 – 0,1; 3 – 0,2; 4 – 0,3; 5 – 0,4; 6 – 0,5

Fig. 2. Dependence of the melting point of iron on pressure (a), obtained as a result of a numerical experiment (■), and its comparison with reference values [14] (●) (error bars were constructed with relative errors of 2 %). Dependence of the melting point of the simulated two-component system on pressure (б) at different concentrations of phosphorus atoms (linear approximation of the data was made), %:
1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.2; 4 – 0.3; 5 – 0.4; 6 – 0.5

ния, не превышающего 1 ГПа. Добавление частиц фосфора снижает значение T_m , но угловые коэффициенты аппроксимирующих прямых можно считать равными. То, что температура плавления однокомпонентной системы имеет наибольшее значение, вполне справедливо, так как известно, что примеси понижают температуру плавления кристаллического вещества.

Процесс фазового перехода в моделируемой системе сопровождается поглощением или выделением скрытой теплоты плавления. При моделировании NVE-ансамбля процесс поглощения/выделения осуществляется за счет изменения кинетической энергии частиц, что определяется по изменению температуры системы. Скрытую теплоту плавления L_m можно определить, рассчитав изменения энтальпии:

$$L_m = \Delta H = \Delta E_{tot} + P\Delta V, \quad (6)$$

где ΔE_{tot} – изменение полной энергии системы при фазовом переходе, ΔV – изменение объема системы при фазовом переходе. В данном случае точность вычислений достигает приемлемых значений. Например, мольная скрытая теплота плавления для однокомпонентной системы железа получилась равной 15,7 кДж/моль, что отличается на 1,8 % от справочного значения [18]. Результаты вычислений L_m , полученные при различном давлении и концентрации частиц фосфора, представлены на рис. 3.

Еще одной важной теплофизической характеристикой моделируемой системы является теплоемкость. Для расчета теплоемкости использовалась формула $C = dH/dT$. Следует отметить, что для твердого тела C

практически не зависит от давления, поэтому, как правило, изохорные C_V и изобарные C_P теплоемкости считаются равными. Поэтому при проведении численных экспериментов моделировался только NPT-ансамбль. Построена зависимость $H(T)$ для интервала температур 1670 – 2000 К. В работе [19] температурная зависимость теплоемкости кристаллического железа задается уравнением вида $C(T) = b_1 + b_2 T$, поэтому для аппроксимации построенной зависимости $H(T)$ на интервале

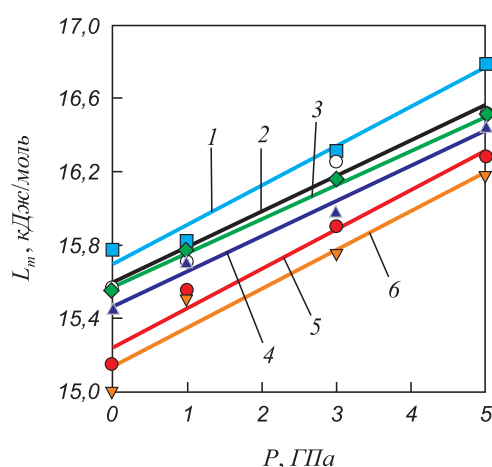


Рис. 3. Зависимость мольной скрытой теплоты плавления от давления при различной концентрации частиц фосфора (выполнена линейная аппроксимация данных), %:
1 – 0; 2 – 0,1; 3 – 0,2; 4 – 0,3; 5 – 0,4; 6 – 0,5

Fig. 3. Dependence of the molar latent heat of fusion on pressure at various concentrations of phosphorus particles (linear approximation of the data was made), %:
1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.2; 4 – 0.3; 5 – 0.4; 6 – 0.5

1670 – T_m К использовался полином вида $H(T) = b_0 + b_1 T + b_2 T^2$. Поскольку после плавления теплоемкость меняется пренебрежительно мало, то для аппроксимации $H(T)$ на интервале $T_m - 2000$ К использовалось уравнение вида $H^*(T) = b_0^* + b_1^* T$. Оценки показали, что построенные уравнения описывают расчетные зависимости со средней ошибкой аппроксимации, не превышающей 3 %. Далее рассчитаны аналогичные зависимости $H(T)$ при различной концентрации частиц фосфора в моделируемой системе с последующей аппроксимацией и вычислением теплоемкостей. Полученные результаты представлены на рис. 4.

Вычисленные значения хорошо согласуются со справочными данными [20]. Так теплоемкость однокомпонентной системы, состоящей из частиц железа, при температуре T_m составила 791 Дж/(кг·К), что меньше справочного значения на 2 %, а теплоемкость расплава при 2000 К составила 809 Дж/(кг·К) (отличие от [20] составляет 3 %). Кроме того, полученное значение изменения энтальпии при плавлении однокомпонентной системы равно 15,7 кДж/моль, а разница со справочными данными [19] при этом составляет чуть более 1 %.

Выводы

Методом молекулярной динамики проведено исследование термодинамических характеристик железа, содержащего малые концентрации фосфора, присутствующего в моделируемой системе в виде атомов замещения. Установлены зависимости изменения рассмотренных характеристик от концентрации атомов замещения и величины приложенного внешнего давления. Численные эксперименты показали, что наличие

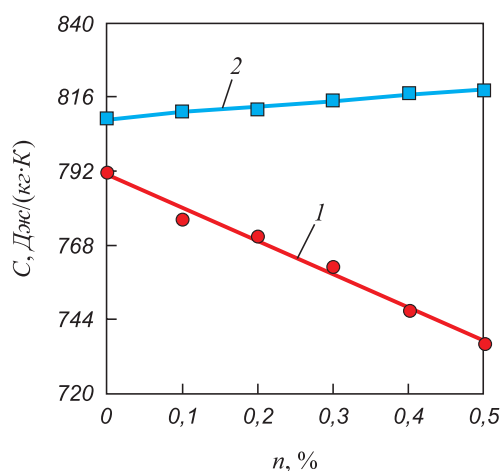


Рис. 4. Зависимость теплоемкости системы, пребывающей в твердом и жидком состоянии при температуре плавления, от концентрации частиц фосфора (выполнена линейная аппроксимация данных): 1 – solidus; 2 – liquidus

Fig. 4. Dependence of heat capacity of the system in solid and liquid state at melting point, on concentration of phosphorus particles (linear approximation of the data was made): 1 – solidus; 2 – liquidus

примесей приводит к росту среднего теплового коэффициента линейного расширения и понижению температуры плавления, скрытой теплоты плавления, а также теплоемкости. Полученные результаты подтвердили адекватность построенной модели и ее пригодность для изучения более сложных процессов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Дауд А.Д., Семин А.Е., Котельников Г.И., Щукина Л.Е. Дефосфоризация хромистых расплавов с использованием оксидов редкоземельных металлов // Изв. вуз. Черная металлургия. 2017. Т. 60. № 1. С. 54 – 59.
2. Робей Р., Уайтхед М. Внедоменная обработка чугуна с учетом конкретных производственных условий // МРТ. Металлургическое производство и технология металлургических процессов. 2014. № 1. С. 16 – 24.
3. Георгадзе А.Г., Гернер В.И., Елашвили М.И. и др. Условия дефосфоризации жидкого металла в разливочном ковше // Литье и металлургия. 2012. № 3(67). С. 117 – 119.
4. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Grinkevich L.S. etc. Dynamics of edge dislocations in a low-stability fcc-system irradiated by high-energy particles // Russian Physics Journal. 2017. Vol. 59. No. 9. P. 1446 – 1453.
5. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Smirnova M.V. Self-diffusion process in an FCC crystal caused by the passage of a shock wave // Russian Physics Journal. 2015. Vol. 58. No. 6. P. 828 – 832.
6. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Poletaev G.M. Transformation of nanopores in gold under conditions of thermoactivation and the effects of acoustic and shock waves // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2015. Vol. 79. No. 9. P. 1089 – 1092.
7. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting vacancy voids in the grain boundary region by a post-cascade shock wave // Materials Physics and Mechanics. 2013. Vol. 18. No. 2. P. 148 – 155.
8. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature // The Journal of Chemical Physics. 1980. Vol. 72. No. 4. P. 2384 – 2393.
9. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals // Physical Review B. 1984. Vol. 29. No. 12. P. 6443 – 6453.
10. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys Rev B. 1986. Vol. 33. No. 12. P. 7983 – 7991.
11. Biersack J.P., Ziegler J.F. Refined universal potentials in atomic collisions // Nuclear Instruments and Methods. 1982. Vol. 194. P. 93 – 100.
12. Ackland G.J., Mendelev M.I., Srolovitz D.J. etc. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // Journal of Physics: Condensed Matter. 2004. Vol. 16. P. 2629 – 2642.
13. Ko W.-S., Kim N.-J., Lee B.-J. Atomistic modeling of an impurity element and a metal-impurity system: pure P and Fe-P system // Journal of Physics: Condensed Matter. 2012. Vol. 14. P. 225002 – 225016.
14. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. Физические величины: Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
15. Belonoshko A.B., Skorodumova N.V., Rosengren A., Johansson B. Melting and critical superheating // Physical Review B. 2006. Vol. 73. P. 0122011 – 0122013.
16. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E. etc. Kinetic melting and crystallization stages of strongly superheated and supercooled metals // Mathematical Models and Computer Simulations. 2017. Vol. 9. No. 4. P. 448 – 456.
17. Yang H., Lu Y., Chen M., Guo Z. A molecular dynamics study on melting point and specific heat of Ni_3Al alloy // Science in China.

- Series G: Physics, Mechanics & Astronomy. 2007. Vol. 50. No. 4. P. 407–413.
18. Таблица физических величин: Справочник / Под ред. И.К. Кикина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.
 19. Зайцев И.Д., Зозуля А.Ф., Асеев Г.Г. Машинный расчет физико-химических параметров неорганических веществ. – М.: Химия, 1983. – 256 с.

20. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах: Справочник. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.

Поступила в редакцию 18 февраля 2019 г.
После доработки 21 марта 2019 г.
Принята к публикации 3 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 725–731.

CALCULATION OF THE THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF Fe–P SYSTEM BY METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

A.V. Markidonov^{1,2,3}, D.A. Lubyanoi², V.V. Kovalenko¹, M.D. Starostenkov⁴

¹Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Kemerovo Region, Russia

²Novokuznetsk Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev, Novokuznetsk, Kemerovo Region, Russia

³Novokuznetsk branch of Kemerovo State University, Novokuznetsk, Kemerovo Region, Russia

⁴Altai State Technical University, Barnaul, Altai Territory, Russia

Abstract. The problem of dephosphorization of iron-carbon alloys is relevant for the metallurgical industry, since a high concentration of phosphorus contributes to the appearance of a number of extremely undesirable phenomena. A lot of experimental work has been devoted to solving this problem, but it has still not been completely possible to cope with it. Any field experiments aimed at studying the process of phosphorus removal, require considerable material and time costs, but at the same time do not guarantee getting the desired result. Therefore, to search for new approaches to solving this problem, it is much more rational to use numerical simulation methods involving the computational capabilities of modern computers. At present, computer experiments are the same recognized research method as theoretical research and real experiment. To study the behavior of phosphorus atoms in iron using a numerical experiment, it is necessary to build a computational model and test it by calculating various characteristics whose values are known in advance. In this paper, the method of molecular dynamics was chosen as the method of computer simulation. Using this method, one can conduct experiments with given atomic velocities and describe dynamics of the studied processes. To describe the interparticle interaction, we used the potential calculated in the framework of the immersed atom method. The study was conducted on a computational cell simulating α -iron crystal with phosphorus substitution atoms. The constructed model demonstrated satisfactory results when calculating the known characteristics of the simulated system. Dependences of changes in such characteristics as temperature coefficient of linear expansion, melting point, latent heat of melting and heat capacity on the concentration of phosphorus atoms, as well as in some cases on magnitude of the applied external pressure were established. Calculations showed that, for example, the phosphorus concentration of 0.5 % leads to an increase in the average thermal coefficient of linear expansion by 9 %, a decrease in temperature and latent heat of fusion by 5 % and a heat capacity by 7 %.

Keywords: crystal, impurity, molecular dynamics, potential, EAM, temperature, pressure, heat, enthalpy.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-725-731

REFERENCES

1. Dawood A.D., Semin A.E., Kotelnikov G.I., Shchukina L.E.. Dephosphorization of high-chromium steels by using rare earth oxides.

- Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2017, vol. 60, no. 1, pp. 54–59. (In Russ.).
2. Robei R., Uaitkhed M. Ladle treatment of pig iron at specific production conditions. *MRT. Metallurgicheskoe proizvodstvo i tekhnologiya metallurgicheskikh protsessov*. 2014, no. 1, pp. 16–24. (In Russ.).
 3. Georgadze A.G., Gerner V.I., Elashvili M.I., Nikiforov P.A., Pletnev A.N., Smirnov S.A. Conditions for dephosphorization of liquid metal in a casting ladle. *Lit'e i metallurgiya*. 2012, vol. 67, no. 3, pp. 117–119. (In Russ.).
 4. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Grinkevich L.S., Kulagina V.V., Markidonov A.V. Dynamics of edge dislocations in a low-stability fcc-system irradiated by high-energy particles. *Russian Physics Journal*. 2017, vol. 59, no. 9, pp. 1446–1453.
 5. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Smirnova M.V. Self-diffusion process in an FCC crystal caused by the passage of a shock wave. *Russian Physics Journal*. 2015, vol. 58, no. 6, pp. 828–832.
 6. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Poletaev G.M. Transformation of nanopores in gold under conditions of thermoactivation and the effects of acoustic and shock waves. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2015, vol. 79, no. 9, pp. 1089–1092.
 7. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting vacancy voids in the grain boundary region by a post-cascade shock wave. *Materials Physics and Mechanics*. 2013, vol. 18, no. 2, pp. 148–155.
 8. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of Chemical Physics*. 1980, vol. 72, no. 4, pp. 2384–2393.
 9. Daw M. S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals. *Physical Review B*. 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443–6453.
 10. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*. 1986, vol. 33, no. 12, pp. 7983–7991.
 11. Biersack J.P., Ziegler J.F. Refined universal potentials in atomic collisions. *Nuclear Instruments and Methods*. 1982, vol. 194, pp. 93–100.
 12. Ackland G.J., Mendelev M.I., Srolovitz D.J., Han S., Barashev A.V. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004, vol. 16, pp. 2629–2642.
 13. Ko W.-S., Kim N.-J., Lee B.-J. Atomistic modeling of an impurity element and a metal-impurity system: pure P and Fe–P system. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2012, vol. 24, pp. 225002–225016.
 14. Grigor'ev I.S., Meilikhov E.Z. *Fizicheskie velichiny: spravochnik* [Physical quantities: Reference book]. Moscow: Energoatomizdat, 1991, 1232 p. (In Russ.).
 15. Belonoshko A.B., Skorodumova N.V., Rosengren A., Johansson B. Melting and critical superheating. *Physical Review B*. 2006, vol. 73, pp. 0122011–0122013.
 16. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Kinetic melting and crystallization stages of strong-

- ly superheated and supercooled metals. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2017, vol. 9, no. 4, pp. 448–456.
17. Yang H., Lu Y., Chen M., Guo Z. A molecular dynamics study on melting point and specific heat of Ni_3Al alloy. *Science in China. Series G: Physics, Mechanics & Astronomy*. 2007, vol. 50, no. 4, pp. 407–413.
 18. *Tablitsa fizicheskikh velichin: spravochnik* [Table of physical quantities: Reference book]. Kikoin I.K. ed. Moscow: Atomizdat, 1976, 1008 p. (In Russ.).
 19. Zaitsev I.D., Zozulya A.F., Aseev G.G. *Mashinnyi raschet fiziko-khimicheskikh parametrov neorganicheskikh veshchestv* [Machine calculation of physico-chemical parameters of inorganic substances]. Moscow: Khimiya, 1983, 256 p. (In Russ.).
 20. Zinov'ev V.E. *Teplofizicheskie svoistva metallov pri vysokikh temperaturakh: spravochnik* [Thermophysical properties of metals at high temperatures: Reference book]. Moscow: Metallurgiya, 1989, 384 p. (In Russ.).
- Funding.** The work was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research and the Altai Territory Administration as part of the scientific project No. 18-42-220002 r_a.
- Information about the authors:**
- A.V. Markidonov**, Dr. Sci. (Phys.-math), Assist. Professor of the Chair of Science named after V.M. Finkel (markidonov_artem@mail.ru)
- D.A. Lubyanoi**, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair of Economics and Management
- V.V. Kovalenko**, Dr. Sci. (Phys.-math), Professor of the Chair of Science named after V.M. Finkel
- M.D. Starostenkov**, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Physics
- Received February 18, 2019
Revised March 21, 2019
Accepted August 3, 2019

УДК: 620.169.1

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА УСТАЛОСТИ АВТОМОБИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Пачурин Г.В.¹, д.т.н., профессор кафедры «Производственная безопасность, экология и химия»

Гончарова Д.А.¹, аспирант кафедры «Автомобильный транспорт»

Филиппов А.А.¹, к.т.н., доцент кафедры «Производственная безопасность, экология и химия»

*Нуждина Т.В.¹, к.т.н., доцент кафедры «Материаловедение, технологии материалов
и термическая обработка металлов»*

*Деев В.Б.^{2,3}, д.т.н., профессор кафедры «Литейные технологии и художественная обработка
материалов» (deev.vb@mail.ru)*

¹ Нижегородский государственный технический университет им. Р.А. Алексеева
(603022, Россия, Нижний Новгород, ул. Минина, 24)

² Уханьский текстильный университет
(430072, No. 34, Hongshance Road, Wuchang District, Wuhan University, Wuhan, Hubei Province, P.R. China)

³ Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
(119049, Россия, Москва, Ленинский пр., 4)

Аннотация. В процессе эксплуатации конструктивные элементы автомобилей испытывают воздействие температур и вибрации. Преобладающее большинство разрушений металлоконструкций вызвано их усталостью. Это обуславливает экономические потери и часто человеческие жертвы от аварий. Поэтому задача обеспечения работоспособности деталей и узлов автомобилей является одной из актуальных в современном автомобилестроении. Для этого нужно знать закономерности поведения металлических материалов, полученных по разным технологиям, при воздействии вибрации. Деструкция структуры металла непосредственно сказывается на поведении прогиба образцов, отражающего конкуренцию двух взаимно противоположных явлений – упрочнения и разупрочнения, напрямую влияющих на структурную повреждаемость металла. Статья посвящена изучению кинетики усталостного разрушения автомобильных материалов с использованием тарировки структурных повреждений их поверхности с поведением кривых изменения текущего прогиба при знакопеременном нагружении. В работе рассматриваются автомобильные материалы (стали 20Х13, 14Х17Н2, 35ХГСА) и модельные металлы и сплавы (Медь М1, Латунь Л63Т, алюминиевый сплав В95пчТ2) в различном структурном состоянии при циклическом нагружении для пониженных, комнатных и повышенных температур с фиксацией прогиба образца и соответствующих ему структурных повреждений. Показана возможность изучения кинетики усталостной деструкции материала образцов по кривым прогиба, представляющим собой интегральную характеристику деструктивных процессов, протекающих при знакопеременном нагружении. По этим процессам можно отслеживать стадии повреждаемости при усталости металлических материалов – повреждение структуры на начальном этапе, момент появления макроскопической трещины, ее последующее продвижение вплоть до полного разделения конструкционного материала. По ним можно выявить соотношение длительности периода до появления трещины усталости и ее последующего роста, а также определить среднюю скорость продвижения усталостной трещины по телу металлического образца. Важным является также то, что по кривым прогиба можно оценивать кинетику деструкции материалов в условиях, когда прямое изучение структурного состояния поверхности образцов невозможно, например, в условиях криогенных и высоких температур или в присутствии коррозионных сред. В сочетании с фрактографическим и металлографическим анализом процесса усталости кривые прогиба позволяют на основании оценки стадий деструкции материалов проводить выбор последних для конструктивных элементов автомобиля с учетом условий его эксплуатации и оптимизацию технологии изготовления деталей с целью повышения ресурса и ремонтпригодности.

Ключевые слова: автомобильные металлы и сплавы, кривые изменения текущего прогиба образцов, структурная повреждаемость металлических материалов, циклическое нагружение металлов и сплавов, сопротивление усталостному разрушению материалов при разных температурах.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-732-738

ВВЕДЕНИЕ

В процессе эксплуатации автомобиль подвергается различным видам нагрузок, приводящим к деструкции материалов его конструкции. Наиболее опасными являются вибрационные нагрузки при нормальных, пониженных и повышенных температурах, увеличивающие вероятность аварий [1].

Преобладающее большинство разрушений металлоконструкций вызвано их усталостью. Поэтому задача обеспечения работоспособности деталей и узлов автомобилей является одной из актуальных в современном автомобилестроении.

Эксплуатационные показатели конструкционных материалов, предназначенных для изготовления автомобильных металлоизделий, формируются на всех ста-

дях металлургического передела: от выбора шихтовых материалов для плавки будущего сплава до получения готовых деталей. Причиной необходимости увеличения ресурса и эксплуатационной надежности является также высокая стоимость конструкционных материалов автомобиля. Поэтому проведение экспериментальных исследований усталостных характеристик конструкционных материалов с целью снижения металлоемкости изделий, разработки новых методов обработки, а также определения наиболее конкурентного материала является приоритетным в современном автомобилестроении [2 – 4].

Одним из важных факторов, влияющих на работоспособность изделий, является усталостная выносливость материала. Но данные по влиянию видов технологий получения на механические свойства используемых материалов в условиях разных температур ограничены и разрозненны. Кроме этого, испытания должны быть максимально приближены к условиям эксплуатации материалов. Это обуславливает необходимость нахождения конструкторских решений в части как выбора материалов, так и технологических процессов, которые позволят обеспечить необходимые эксплуатационные свойства деталей машин [5 – 7].

Решение этой задачи предполагает изучение процесса усталостного разрушения автомобильных металлов и сплавов в условиях различных температур и схем нагружения с возможностью определения длительности периода до зарождения трещин и интенсивности их дальнейшего продвижения по сечению конструкции. Это позволит выбрать материал, соответствующий требованиям эксплуатации, и, как следствие, предотвратить его разрушение, обеспечить снижение финансовых и временных затрат на ремонт автомобиля.

Известно [8 – 10], что усталостное поведение материала предопределено его природой, способом изготовления (виды и режимы технологических процессов), средой (криогенные и повышенные температуры, присутствие коррозионных сред) и напряжением нагружения.

Детали автомобиля изготавливаются по разным технологиям [11 – 13]. Однако изучение деструкции материалов при усталости осложняется длительностью и условиями испытаний [14]. Поэтому выявление закономерностей усталостного поведения автомобильных материалов, полученных по разным технологическим процессам, также является актуальным.

Разрушение при усталости конструкционных материалов принято делить на этапы [15, 16]:

- появление микротрещины;
- субкритический ее рост;
- катастрофический долом.

Важную роль при этом могут сыграть кривые упрочнения (разупрочнения), отражающие деструктивные изменения в материале в процессе знакопеременного нагружения металлических образцов. Было установле-

но [17, 18], что по кривым прогиба можно отслеживать зарождение трещины, обуславливающее усиление прогиба, и посчитать скорость ее продвижения. Это ценно для температур, отличных от комнатных (т. е. высоких и низких), из-за невозможности или затрудненности прямого наблюдения.

Считается [19, 20], что стали в нормализованном состоянии при напряжениях, больших макроскопического предела текучести, линейно упрочняются. Высокопрочные и наклепанные в холодном виде стали при высоких напряжениях монотонно разупрочняются. При низких же напряжениях для сталей, прошедших термическую обработку нормализации, перед упрочнением характерно разупрочнение.

Фаза структурного упрочнения – это подготовительный этап деструкции при знакопеременном нагружении, предшествующий разрыхлению, появлению и дальнейшему продвижению трещины до полного разделения металлического материала, что непосредственно отражается на поведении его прогиба. Собственно кинетика прогиба и есть отражение борьбы двух взаимно противоположных физических явлений – упрочнения и разупрочнения в металле, напрямую вызванных деструктивными повреждениями в нем при усталости.

Данная статья посвящена изучению процесса усталостной деструкции в автомобильных материалах с использованием тарировки структурных повреждений их поверхности с поведением кривых прогиба при знакопеременном нагружении.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектом исследований являлись автомобильные материалы (стали 20Х13, 14Х17Н2, 35ХГСА) и модельные металлы и сплавы (Медь М1, Латунь Л63Т, алюминиевый сплав В95пчТ2) в различном структурном состоянии при циклическом нагружении для пониженных, комнатных и повышенных температур с фиксацией прогиба образца и соответствующих ему структурных повреждений.

Характеристика материалов образцов, исследованных в работе, дана в таблице.

Для изучения усталостных свойств образцов из конструкционных материалов применяются различные виды испытательных машин [21, 22]. Выбор динамики и характеристик усталостных машин обуславливается методами испытания, метрологией и надежностью, которые большей частью связаны с динамическими особенностями машин и испытываемых объектов.

Полученные образцы испытывались [23] симметричным консольным изгибом с вращением 50 Гц и фиксацией изменения прогиба образца. Наблюдение за структурными повреждениями поверхности образца без прекращения испытаний осуществлялось с применением оригинального фазосинхронизатора с оптическим микроскопом ($\times 37$) и стробоскопическим освещением

Характеристика материалов

Characteristics of materials

Материал	Химический состав, %	Исходное состояние образцов	Особенности микро-структуры материала
Медь М1	9,93 Cu; 0,005 Fe; 0,005 S; 0,002 P	Холоднокатаная	Размер зерна 0,04 – 0,08 мм
Медь М1	99,93 Cu; 0,005 Fe; 0,005 S; 0,002 P	Отжиг 540 °С, 2 ч, вакуум 1,33–10 Па. Охлаждение с печью	Размер зерна 0,04 – 0,08 мм
Латунь Л63Т	63,25 Cu; 0,014 Fe; 0,01 P; Zn – остальное	Холоднокатаная	Размер зерна 0,04 мм
Алюминиевый сплав В95пчТ2	6,0Zn; 1,8 Cu; 0,2Cr; 0,1 Si; 0,4 Mn; 0,1 Fe; Al – остальное	Закалка 465 – 475 °С, 1 ч, вода, растяжение в свежезакаленном состоянии 1,7 %; старение (120 °С, 5 ч, 180 °С, 6 ч)	–
Сталь 20Х13	0,24 C; 12,5 Cr; 0,6 Si; 0,6 Mn; 0,025 S; 0,025 P; Fe – остальное	Закалка 1030 °С, масло, отпуск 600 – 640 °С	Мартенсит
Сталь 14Х17Н2	0,15 C; 17,0 Cr; 0,8 Si; 2,1 Ni; 0,7 Mn; 0,025S; 0,035 P; Fe – остальное	Закалка 1030 °С, масло, отпуск 620 – 660 °С	Мартенсит
Сталь 35ХГСА	0,32 C; 1,24 Cr; 1,13 Si; 1,0 Mn; 0,02 S; 0,01 P; Fe – остальное	Закалка 900 °С, 20 мин, масло, отпуск 425 °С	Троостосорбит

(Е27 G45 40×88 мм, белый, 12 Вт, RL-BL-E27-G45-ST). Варьирование условий испытаний обеспечивалось специально спроектированными криокамерой и электрической печью сопротивления.

Микроструктура образцов изучалась с привлечением оптического микроскопа AKASHI, Япония.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены результаты тарировки криовой прогиба модельного материала меди М1 с деструкцией его поверхности (140 МПа).

У М1 после отжига при $N = 0,63$ % на расстоянии друг от друга примерно в 10 мкм появляются редкие линии скольжения, проходящие через все зерно. При $N = 12,5$ % уже через ~5 мкм друг от друга они покрывают практически все зерна. Активируются пересекающиеся плоскости скольжения. При $N = 22$ % активируются вторичные плоскости. Появляется даже пересечение полос скольжения, которые при $N = 40,7$ % блокируются, возрастает их плотность, и они уже отстоят друг от друга на расстоянии ~2 мкм. При этом при $N = 57,6$ % наблюдается появление микротрещины, проходящей по линиям скольжения и по границам зерен и вырастающей в макротрещину к $N = 66,8$ %.

Таким образом, показана возможность изучения процесса и стадий усталостной деструкции материала образцов по кривым прогиба, представляющим собой интегральную характеристику разрушительных процессов, сопровождающих усталость конструкционных материалов. Они позволяют выявить соотношение длительности до зарождения трещины усталости и ее последующего продвижения по сечению металла, а также

определить усредненную скорость ее продвижения по телу металлического образца.

Из рис. 2 и 3 следует, что прогиб описывается тремя основными стадиями:

- существенное увеличение для наклепанных материалов или снижение для не наклепанных;
- стабилизация;
- рост до разрушения материала.

Окончание участка стабилизации связано с появлением трещины ~1,0 мм.

У упрочненных материалов в самом начале знакопеременного нагружения физическое структурное разупрочнение превалирует над упрочнением, поэтому прогиб образца увеличивается.

Аналогичный характер наблюдается при -196 °С и $+550$ °С у меди М1 после термического отжига и предварительного упрочнения. Рост температуры усиливает прогиб, а не четко выраженная стабилизация уже практически отсутствует при $+550$ °С.

Технологическое упрочнение на 25 % М1 после отжига приводит к преобладанию ее разупрочнения и, тем сильнее, чем выше температура.

При 550 °С технологически наклепанная на 25 % медь разупрочняется. Участок стабилизации отсутствует. Долговечность до возникновения трещин и до разрушения возрастает, а продвижение трещин затрудняется.

Так, изменение температуры от 20 до 550 °С при амплитуде нагружения 140 МПа обуславливает повышение скорости продвижения трещин соответственно от 0,051 до 0,318 мкм/цикл и от 0,024 до 0,163 мкм/цикл, а предшествующая ее появлению долговечность уменьшается от $4 \cdot 10^4$ до $6 \cdot 10^3$ циклов и от $2,3 \cdot 10^5$ до $2,5 \cdot 10^4$ циклов соответственно для упрочненной на 25 % после отжига

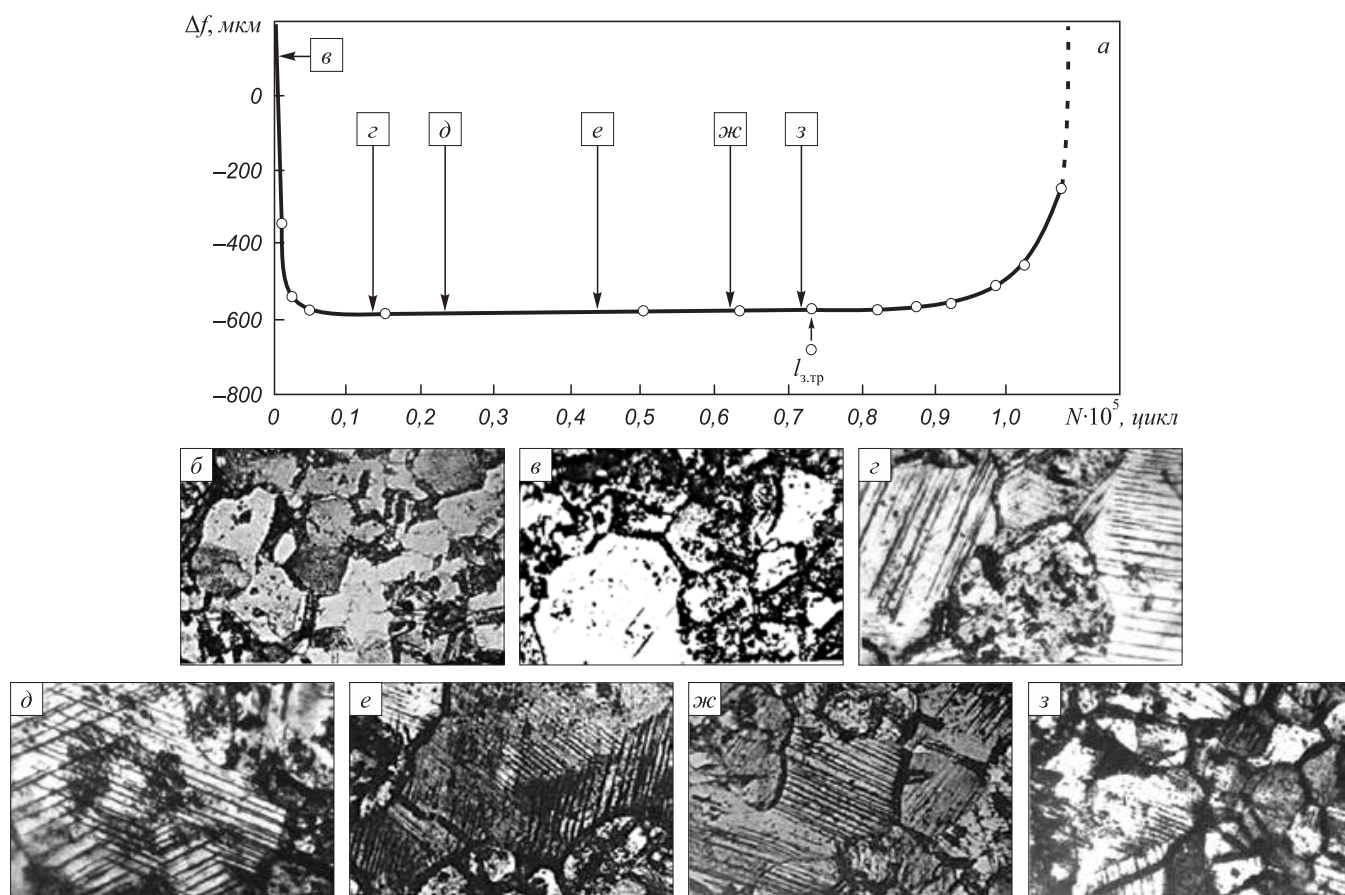


Рис. 1. Результаты тарировки кривой прогиба (а) и фотографии деструкции и возникновения трещин в соотношении с прогибом меди М1 после отжига при знакопеременном нагружении (долговечность $1,055 \cdot 10^5$ циклов, $\times 450$). Число циклов: б – начальное состояние; в – $6,8 \cdot 10^2$ (0,63 %); з – $1,35 \cdot 10^4$ (12,5 %); д – $2,38 \cdot 10^4$ (22,0 %); е – $4,4 \cdot 10^4$ (40,7 %); жс – $6,22 \cdot 10^4$ (57,6 %); з – $7,21 \cdot 10^4$ (66,8 %)

Fig. 1. Calibration results of the deflection curve (a) and photos of destruction and cracks occurrence in relation to the M1 copper deflection after annealing under alternating loading (durability $1,055 \cdot 10^5$ cycles; magnification $\times 450$). Number of cycles: б – initial state; в – $6,8 \cdot 10^2$ (0,63 %); з – $1,35 \cdot 10^4$ (12,5 %); д – $2,38 \cdot 10^4$ (22,0 %); е – $4,4 \cdot 10^4$ (40,7 %); жс – $6,22 \cdot 10^4$ (57,6 %); з – $7,21 \cdot 10^4$ (66,8 %)

меди. Температура -196°C обуславливает появление четко выраженной стабилизации ее разупрочнения, но длительность его уменьшается по мере повышения циклического напряжения.

Кривые прогиба наклепанной на 25 % отожженной и не наклепанной меди идентичны, но фратография изломов отличается. В упрочненной на 25 % меди в процессе знакопеременного нагружения наблюдается появление полос скольжения, их интенсификация и возникновение микротрещин. Трещины растут в основном по границам зерен, ограничивающих их дальнейшее продвижение.

В результате наклепа в меди происходит измельчение зерен. Дислокационное скольжение не развитое. На фратографии слабо видны участки продвижения трещин, однако имеются небольшие сколы и углубления в виде ямок, говорящие о тонкой деструкции меди. Высокие напряжения обуславливают весьма интенсивное разупрочнение наклепанной меди. Стабилизация практически отсутствует. Поверхность изломов имеет

четкие следы продвижения трещин, связанных перемычками ручьев скола.

Результаты обработки кривых изменения прогиба в процессе циклического нагружения исследованных конструкционных материалов представлены на рис. 4, 5.

Выводы

Установлено, что кривые прогиба представляют собой интегральную характеристику деструкции металлических образцов, протекающей в них при знакопеременном нагружении, так как позволяют отслеживать стадии повреждаемости при усталости – повреждение структуры на начальном этапе, момент появления макроскопической трещины, ее последующее продвижение вплоть до полного разделения конструкционного материала.

Кривые прогиба позволяют выявить соотношение длительности стадии до появления усталостной трещи-

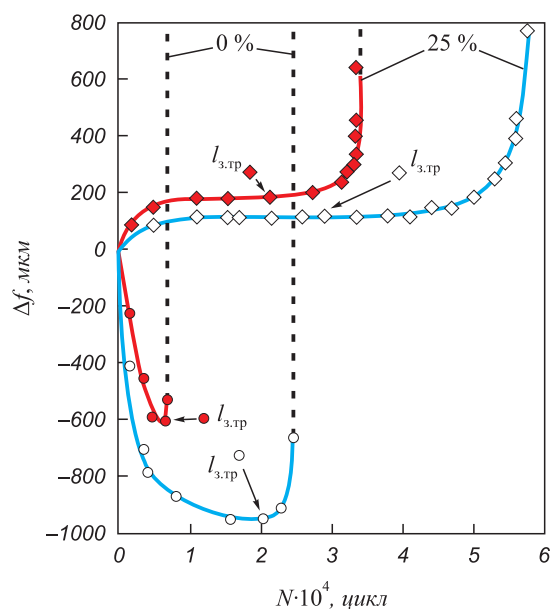


Рис. 2. Зависимость прогиба при -196°C после отжига неупрочненной М1 от числа циклов нагружения для напряжения 260 МПа (●, ◆) и 220 МПа (○, ◇) для неупрочненного и наклепанного на 25 % состояния

Fig. 2. Dependence of deflection at -196°C after annealing of unstressed M1 on the number of loading cycles for a voltage of 260 MPa (●, ◆) and 220 MPa (○, ◇) for a state that was not strengthened and not work-hardened at 25 %

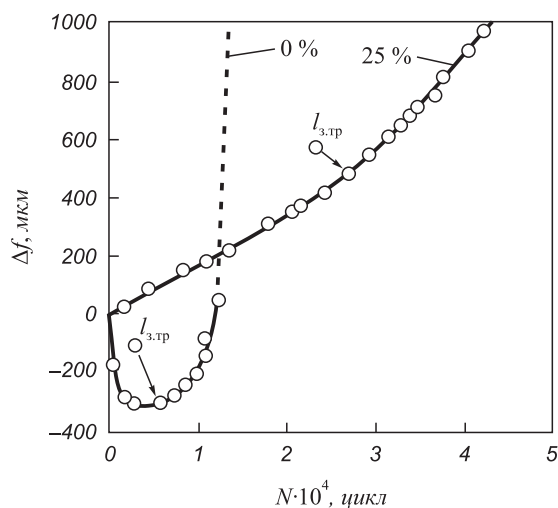


Рис. 3. Зависимость прогиба при 550°C после отжига неупрочненной М1 от числа циклов нагружения для неупрочненного и наклепанного на 25 % состояния (напряжение 140 МПа)

Fig. 3. Dependence of deflection at 550°C after annealing of unstressed M1 on the number of loading cycles for a state that was not strengthened and not work-hardened to 25 % (voltage 140 MPa)

ны и ее последующего подрастания, а также определить усредненную скорость продвижения по телу металлического образца. Так, например, с повышением температуры от 20 до 550°C для меди после отжига и после деформации 25 % при амплитуде нагружения 140 МПа период до зарождения трещин сокращается от $4 \cdot 10^4$ до

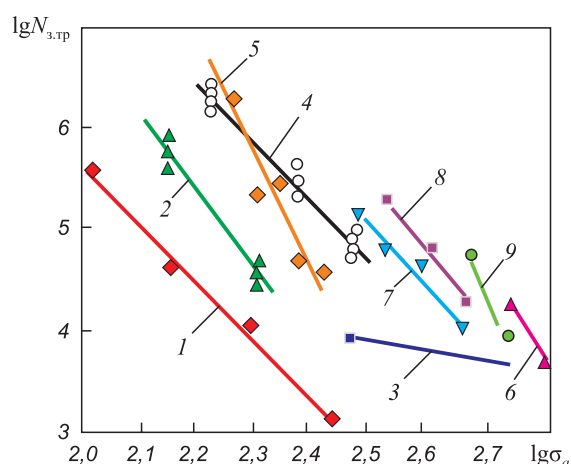


Рис. 4. Влияние амплитуды напряжения на долговечность до появления трещины $\lg N_{з.тр}$ при 20°C материалов: 1 – отожженная М1; 2 – холоднокатаная М1; 3 – отожженная Л63; 4 – холоднокатаная Л63; 5 – В95пчТ2; 6 – 14Х17Н2 (0 %); 7 – 14Х17Н2 (25 %); 8 – 3 4Х17Н2 (25 %); 9 – 20Х13 (0 %)

Fig. 4. Influence of the voltage amplitude on durability until the appearance of crack $\lg N_{з.тр}$ at 20°C of materials: 1 – annealed M1; 2 – cold rolled M1; 3 – annealed L63; 4 – cold rolled L63; 5 – V95pchT2; 6 – 14Kh17N2 (0 %); 7 – 14Kh17N2 (25 %); 8 – 3 4Kh17N2 (25 %); 9 – 20Kh13 (0 %)

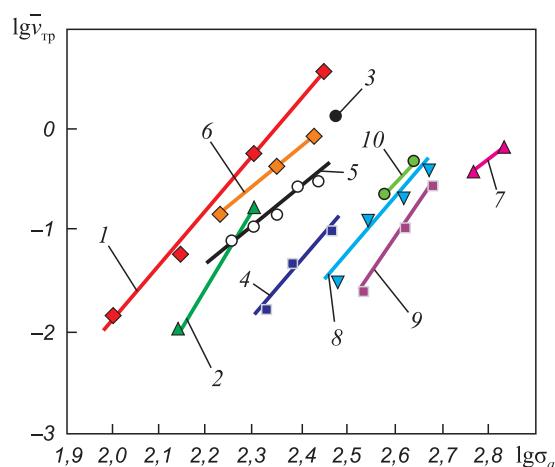


Рис. 5. Влияние амплитуды напряжения на усредненную скорость роста трещины при 20°C материалов: 1 – отожженная М1; 2 – холоднокатаная М1; 3 – отожженная Л63; 4 – холоднокатаная Л63; 5 – В95пчТ2; 6 – В95пчТ2 в коррозионной среде; 7 – 14Х17Н2 (0 %); 8 – 14Х17Н2 (25 %; $\dot{\epsilon} = 3,1 \cdot 10^{-3} \text{ c}^{-1}$); 9 – 14Х17Н2 (25 %; $\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-3} \text{ c}^{-1}$); 10 – 20Х13 (0 %)

Fig. 5. Effect of stress amplitude on the average crack growth rate at 20°C of materials:

1 – annealed M1; 2 – cold rolled M1; 3 – annealed L63; 4 – cold rolled L63; 5 – V95pchT2; 6 – V95pchT2 in corrosive media; 7 – 14Kh17N2 (0 %); 8 – 14Kh17N2 (25 %; $\dot{\epsilon} = 3,1 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$); 9 – 14Kh17N2 (25 %; $\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$); 10 – 20Kh13 (0 %)

$6 \cdot 10^3$ циклов и от $2,3 \cdot 10^5$ до $2,5 \cdot 10^4$ циклов, а скорость роста трещин возрастает от 0,051 до 0,318 мкм/цикл и от 0,024 до 0,163 мкм/цикл соответственно.

Важным является также то, что по кривым прогиба можно оценивать кинетику деструкции материа-

лов в условиях, когда прямое изучение структурного состояния поверхности образцов невозможно, например, в условиях криогенных и высоких температур, а также, например, в присутствии коррозионных сред.

Анализ поведения кривых прогиба в сочетании с фратографическими и металлографическими исследованиями процесса усталости на основании оценки стадий разрушения материалов позволяет проводить их выбор для конструктивных элементов автомобиля с учетом условий его эксплуатации, а также оптимизировать технологию изготовления деталей с целью повышения ресурса и ремонтпригодности автомобиля.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Пачурин Г.В., Кудрявцев С.М., Соловьев Д.В., Наумов В.И. Кузов современного автомобиля: материалы, проектирование и производство. – СПб.: Изд-во «Лань», 2016. – 316 с.
2. Ivanov Y., Alsaraeva K., Gromov V. etc. Evolution of Al-19.4Si alloy surface structure after electron beam treatment and high cycle fatigue // *Materials Science and Technology*. 2015. Vol. 31. No. 13a. P. 1523 – 1529.
3. Konovalov S.V., Atroshkina A.A., Ivanov Yu.F., Gromov V.E. Evolution of dislocation substructures in fatigue loaded and failed stainless steel with the intermediate electropulsing treatment // *Materials Science and Engineering A*. 2010. Vol. 527. No. 12. P. 3040 – 3043.
4. Konovalov S., Komissarova I., Ivanov Y. etc. Structural and phase changes under electropulse treatment of fatigue-loaded titanium alloy VT1-0 // *Journal of Materials Research and Technology*. 2019. Vol. 8. No. 1. P. 1300 – 1307.
5. Сартор М., Вунде М., Лемке А. и др. Применение покрытий для снижения потерь металла в результате окалинообразования при повторном нагреве // *Черные металлы*. 2016. № 11. С. 46 – 51.
6. Furuya Y., Matsuoka S. The effect of modified-ausforming on gigacycle fatigue properties in Si-Mn steels // *Tetsu to Hagan*. J. Iron and Steel Inst. Jap. 2003. Vol. 89. No. 10. P. 1082 – 1089.
7. Коль Т., Бретшнайдер М., Клинкберг Т. и др. Оптимизация поверхности оцинкованной стальной полосы за счет улучшения процесса дренсировки // *Черные металлы*. 2017. № 8. С. 44 – 48.
8. Lukas P., Kunz L., Navratilova L. etc. Fatigue damage of ultrafine-grain copper in very-high cycle fatigue region // *Materials Science and Engineering*. 2011. Vol. 528. P. 7036 – 7040.
9. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science // *Acta Materialia*. 2013. Vol. 61. P. 782 – 817.
10. Пачурин Г.В. Усталостное разрушение при нормальной температуре предварительно деформированных сплавов // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 1990. № 10. С. 35 – 38.
11. Анджело Зинути, Джанкарло Сапо. Волочение проволоки на станах // *Метизы*. 2003. № 2(03). С. 41 – 47.
12. Дзиро Томигана, Кинья Вахимото, Тошимичи Мори и др. Производство катанки с высокой способностью к удалению окалин // *Метизы*. 2008. № 2(18). С. 32 – 42.
13. Furuya Y. Visualization of internal small fatigue crack growth // *Mater. Lett.* 2013. Vol. 112. P. 139 – 141.
14. Filippov A.A., Pachurin G.V., Naumov V.I., Kuzmin N.A. Low-cost treatment of rolled products used to make long high-strength bolts // *Metallurgist*. 2016. Vol. 59. No. 9 – 10. P. 810 – 815.
15. Sosnovskiy L.A., Makhutov N.A., Troshchenko V.T. Evolution of ideas on fatigue of metals by volume loading and friction // *Тр. VI Междунар. симпозиума по трибофатике (ISTF 2010)*. – Минск: БГУ, 2010. С. 77 – 84.
16. Терентьев В.Ф. Усталость металлических материалов / Отв. ред. Н.П. Лякишев. – М.: Наука, 2003. – 254 с.
17. Партон В.З. Механика разрушения: От теории к практике. – М.: Наука, 1990. – 240 с.
18. Хеллан К. Введение в механику разрушения. – М.: Мир, 1988. – 364 с.
19. Терентьев В.Ф., Петухов А.Н. Усталость высокопрочных металлических материалов. – М.: ИМЕТ РАН, 2013. – 515 с.
20. Терентьев В.Ф., Кораблева С.А. Усталость металлов / Отв. ред. В.М. Блинов; Ин-т металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН. – М.: Наука, 2015. – 484 с.
21. Терентьев В.Ф. Усталостная прочность металлов и сплавов. – М.: Интермет Инжиниринг, 2002. – 288 с.
22. Серенсен С.В., Гарф М.Э., Кузьменко В.А. Динамика машин для испытаний на усталость. – М.: Машиностроение, 1967. – 460 с.
23. Пачурин Г.В. Коррозионная долговечность изделий из деформационно-упрочненных металлов и сплавов. – СПб.: Изд-во «Лань», 2014. – 160 с.

Поступила в редакцию 3 февраля 2019 г.

После доработки 30 июля 2019 г.

Принята к публикации 4 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 732–738.

FATIGUE PROCESS OF AUTOMOBILE MATERIALS

G.V. Pachurin¹, D.A. Goncharova¹, A.A. Filippov¹,
T.V. Nuzhdina¹, V.B. Deev^{2,3}

¹ Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev, Nizhny Novgorod, Russia

² Wuhan Textile University, Wuhan, China

³ National University of Science and Technology “MISIS” (MISIS), Moscow, Russia

Abstract. During operation, the structural elements of cars are exposed to temperatures and vibrations. Overwhelming majority of the destruction of metal structures is caused by their fatigue. It causes economic losses and often human casualties from accidents. Therefore, the task of ensuring the operability of parts and components of automobiles is one of the most relevant in the modern automotive industry. So it is necessary to know the patterns of behavior of metallic materials, obtained by different technologies, when they are exposed to vibration.

Destruction of the metal structure directly affects the behavior of the samples deflection, reflecting the competition of two mutually opposite phenomena – hardening and softening. It directly influences structural damageability of the metal. The article is devoted to the study of kinetics of fatigue failure of automotive materials using the calibration of structural damage to their surface with behavior of the curves of changes in current deflection under alternating loading. The paper considers automotive materials (steel grades 20Kh13, 14Kh17N2, 35KhGSA) and model metals and alloys (Copper M1, Brass L63T, aluminum alloy V95pchT2) in different structural state under cyclic loading for low, room and high temperatures with fixation of the sample deflection and structural damage corresponding to it. It is possible to study kinetics of fatigue destruction of the sample material by the deflection curves, which is an integral characteristic of destructive processes occurring under alternating loading. Using these processes, one can track the stages of damage during fatigue of metallic materials – damage to the structure at the initial stage, moment of the macroscopic

crack appearance, its subsequent advancement up to complete separation of the structural material. It is probable to identify ratio of the period duration before the appearance of a fatigue crack and its subsequent growth, as well as to determine the average rate at which the fatigue crack moves through the body of the metal sample. It is important that it is also possible to estimate the kinetics of materials destruction under the conditions when direct study of the structural state of the sample surface is impossible, for example, in conditions of cryogenic and high temperatures, and also, for example, in the presence of corrosive media. In combination with fractographic and metallographic analysis of the fatigue process, the deflection curves allow, based on the evaluation of the stages of materials destruction, to carry out selection of the latter for the structural elements of a car taking into account its operating conditions and optimizing the technology of parts manufacturing to increase serviceability and maintainability.

Keywords: automotive metals and alloys, curves of changes, samples current deflection, structural damageability of metallic materials, cyclic loading of metals and alloys, resistance to fatigue failure of materials at different temperatures.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-732-738

REFERENCES

1. Pachurin G.V., Kudryavtsev S.M., Solov'ev D.V., Naumov V.I. *Kuzov sovremennoy avtomobilya: materialy, projektirovaniye i proizvodstvo* [Body of a modern car: materials, design and production]. St. Petersburg: Izd-vo "Lan", 2016, 316 p. (In Russ.).
2. Ivanov Y., Alsaraeva K., Gromov V., Konovalov S., Semina O. Evolution of Al-19.4Si alloy surface structure after electron beam treatment and high cycle fatigue. *Materials Science and Technology*. 2015, vol. 31, no. 13a, pp. 1523–1529.
3. Konovalov S.V., Atroshkina A.A., Ivanov Yu.F., Gromov V.E. Evolution of dislocation substructures in fatigue loaded and failed stainless steel with the intermediate electropulsing treatment. *Materials Science and Engineering A*. 2010, vol. 527, no. 12, pp. 3040–3043.
4. Konovalov S., Komissarova I., Ivanov Y., Gromov V., Kosinov D. Structural and phase changes under electropulse treatment of fatigue-loaded titanium alloy VT1-0. *Journal of Materials Research and Technology*. 2019, vol. 8, no. 1, pp. 1300–1307.
5. Sartor M., Wunde M., Lemke A., Roth M. etc. Coating decreases material losses by scale formation during reheating. *Chernye Metally*. 2016, no. 11, pp. 46–51.
6. Furuya Y., Matsuoka S. The effect of modified-ausforming on gigacycle fatigue properties in Si-Mn steels. Tetsu to Hagane. *J. Iron and Steel Inst. Jap.* 2003, vol. 89, no. 10, pp. 1082–1089.
7. Koll' Th., Bretschneider M., Klinkberg T., Luter F., Maas B. Improvement of skin pass rolling to provide better surface quality of Zn-coated steel. *Chernye Metally*. 2017, no. 8, pp. 44–48.
8. Lukas P., Kunz L., Navratilova L. etc. Fatigue damage of ultrafine-grain copper in very-high cycle fatigue region. *Materials Science and Engineering*. 2011, vol. 528, pp. 7036–7040.
9. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science. *Acta Materialia*. 2013, vol. 61, pp. 782–817.
10. Pachurin G.V. Fatigue fracture at normal temperature of previously deformed alloy. *Metal Science and Heat Treatment*. 1990, vol. 32, no. 10, pp. 769–772.
11. Zinuti A., Saro D. Wire drawing on mills. *Metizy*. 2003, no. 2(03), pp. 41–47.
12. Tomigana D., Vakimoto K., Mori T., Murakami M., Ioshimura T. The production of wire rod with high ability to remove scale. *Metizy*. 2008, no. 2(18), pp. 32–42.
13. Furuya Y. Visualization of internal small fatigue crack growth. *Material Lett.* 2013, vol. 112, pp. 139–141.
14. Filippov A.A., Pachurin G.V., Naumov V.I., Kuzmin N.A. Low-cost treatment of rolled products used to make long high-strength bolts. *Metallurgist*. 2016, vol. 59, no. 9–10, pp. 810–815.
15. Sosnovskiy L.A., Makhutov N.A., Troshchenko V.T. Evolution of ideas on fatigue of metals by volume loading and friction. *Proc. of the 6th Int. Symp. on Tribofatigue (ISTF 2010)*, Minsk: BSU, 2010, pp. 77–84.
16. Terent'ev V.F. *Ustalost' metallicheskih materialov* [Fatigue of metallic materials]. Moscow: Nauka, 2003, 254 p.
17. Parton V.Z. *Mekhanika razrusheniya: Ot teorii k praktike* [Mechanics of destruction: From theory to practice]. Moscow: Nauka, 1990, 240 p.
18. Hellan K. *Introduction to Fracture Mechanics*. New York: McGraw-Hill, 1984. (Russ.ed.: Hellan K. *Vvedenie v mekhaniku razrusheniya*. Moscow: Mir, 1988, 364 p.).
19. Terent'ev V.F., Petukhov A.N. *Ustalost' vysokoprochnykh metallicheskih materialov* [Fatigue of high strength metallic materials]. Moscow: IMET RAN, 2013, 515 p. (In Russ.).
20. Terent'ev V.F., Korabev S.A. *Ustalost' metallov* [Metal fatigue]. Moscow: Nauka, 2015, 484 p. (In Russ.).
21. Terent'ev V.F. *Ustalostnaya prochnost' metallov i splavov* [Fatigue strength of metals and alloys]. Moscow: Internet Inzhiniring, 2002, 288 p. (In Russ.).
22. Serensen S.V., Garf M.E., Kuz'menko V.A. *Dinamika mashin dlya ispytaniy na ustalost'* [Dynamics of machines for fatigue testing]. Moscow: Mashinostroenie, 1967, 460 p. (In Russ.).
23. Pachurin G.V. *Korrozionnaya dolgovechnost' izdeliy iz deformatsionno-uprochnennykh metallov i splavov* [Corrosion durability of products from strain-hardened metals and alloys]. St. Petersburg: Izd-vo "Lan", 2014, 160 p. (In Russ.).

Information about the authors:

G.V. Pachurin, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair "Industrial Safety, Ecology and Chemistry"

D.A. Goncharova, Postgraduate of the Chair "Automobile Transport"
A.A. Filippov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair "Industrial Safety, Ecology and Chemistry"

T.V. Nuzhdina, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair "Materials Science, Technology of Materials and Heat Treatment of Metals"

V.B. Deev, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair "Foundry Technology and Art Processing of Materials" (deev.vb@mail.ru)

Received February 3, 2019

Revised July 30, 2019

Accepted August 4, 2019

К 100-ЛЕТИЮ БОРИСА ПЕТРОВИЧА БЕЛЬГОЛЬСКОГО

(04.08.1919 – 06.12.1994)



Научный принцип историзма требует не умалчивать, не предавать забвению вклад предшественников и учителей в становление и развитие науки. Одним из великих учителей в области организации, планирования, экономики и менеджмента металлургических предприятий является Борис Петрович Бельгольский, представитель послевоенной и постиндустриальной отечественной организационно-экономической науки.

Бельгольский Борис Петрович родился 4 августа 1919 г. в Павлограде Днепропетровской области в семье служащего. В 1936 г. поступил в ДМетИ на инженерно-экономический факультет, закончив его в 1941 г. Проработав полгода старшим экономистом планового отдела Магнитогорского металлургического комбината, ушел на фронт. Служил рядовым, комсоргом батальона, командиром взвода в составе I и III Беларусского фронтов. Награжден орденом «Отечественной войны I степени», 13 медалями, в том числе «За отвагу», «За освобождение Варшавы», «За Победу над Германией».

В 1946 г. вернулся в родной институт, где прошел путь от инженера-исследователя, ассистента, старшего преподавателя, доцента, профессора. Кандидатскую диссертацию на тему «Вопросы регламентированного режима работы в рельсобалочных цехах» защитил в 1953 г. Ученую степень доктора экономических наук Бельгольскому Б.П. присвоили в 1981 г. после успешной защиты диссертации на тему «Организационные проблемы повышения эффективности прокатного производства». С 1965 по 1970 гг. и 1975 по 1991 гг. возглавлял кафедру организации и планирования производства, был деканом инженерно-экономического факультета.

Борис Петрович внес весомый личный вклад в дальнейшее развитие металлургии, сформировав в 90-е

годы прошлого столетия новое научное направление в планировании и организации прокатного производства с учетом работы сопряженных с ним производств и отраслей промышленности.

Бельгольский Б.П. придавал большое значение прямым и обратным связям науки и производства. Всестороннее, глубинное, доскональное знание теории и практики прокатного и всех сопряженных с ним производств и отраслей на всех стадиях жизненного цикла предприятий закономерно позволило ему заложить основы комплексного системного подхода и анализа в металлургии, рассматривая в качестве объекта исследования единую систему прокатных станов страны с оптимизацией их загрузки по критерию максимальной эффективности их работы. Вскрытые в его личных исследованиях организационные резервы обеспечивали значительное повышение эффективности прокатного производства в черной металлургии и в металлургическом комплексе машиностроительных предприятий страны. Оригинальными для того времени были также проводимые под руководством Бориса Петровича научно-исследовательские работы по сетевому планированию и управлению ремонтами металлургического оборудования, внедренные на предприятиях и в ремонтных организациях.

Научные исследования профессора Б.П. Бельгольского получили полное отражение в учебном процессе. На их основе создавалось и осовременивалось учебно-методическое обеспечение читаемых кафедрами факультета дисциплин.

Бориса Петровича как ученого и человека отличало стремление постоянно поддерживать деловые и дружеские связи с основателями научных школ родственных вузов, профессорами: Аптекарем С.С., Банным Н.П., Глуховым В.В., Ивановым И.Н., Метсом А.Ф., Коноваловым Л.А., Роменцом В.А., Степановым И.Г., Ширяевым П.А., Штецом К.А., Щепиловым Ф.И., а также с академиком НАН Украины Чумаченко Н.Г. и др.

Тесные контакты и взаимовыгодное сотрудничество осуществлялось с центральными и с отраслевыми органами и отраслевой наукой: МЧМ, центральным и республиканским МВиССО, ЦНИИЧМ, ВНИИОЧермет, ВНИТИ, НИИЧМ, центральным и украинским ГИПРОМЕЗами и др. Кроме связей с отраслевой и вузовской наукой, наш учитель всегда интересовался академической наукой. Он с удовольствием и несомненной пользой стажировался в Институте экономики промышленности НАН Украины, в его Днепропетровском отделении по управлению качеством металлопродукции.

Борис Петрович принимал активное участие в работе Методической комиссии МВиССО по экономическим

специальностям металлургических и политехнических вузов. Он всегда вносил конструктивные предложения по совершенствованию структуры и содержания учебных планов и типовых программ дисциплин, при обсуждении которых использовались в основном метод мозгового штурма и передовой опыт выпускающих кафедр вузов страны. Сотрудники кафедры помнят о его настойчивых требованиях интересоваться передовым опытом в технологии, организации, планировании и управлении производством для практического использования в учебном процессе.

Б.П. Бельгольский – организатор и координатор научной деятельности. Первый опыт руководства и управления, а так же организаторские умения и навыки, как и чувство личной ответственности, практически после студенчества он приобрел на фронтах Великой Отечественной войны. Это пригодилось ему в организации и непосредственном руководстве научными коллективами кафедры, факультета, созданной и возглавляемой им Отраслевой лабораторией научной организации труда и управления министерства черной металлургии Украины. По его инициативе, при его поддержке и научно-методическом руководстве в нашем вузе была создана Межкафедральная лаборатория творчества инженерного труда. В ней немалую долю персонала (по совместительству) составили профессора и доценты кафедры организации и планирования производства (ОПП), в том числе и авторы статьи.

Под руководством профессора Бельгольского Б.П. на факультете экономики и менеджмента были открыты три новые специальности: «Менеджмент организаций», «Менеджмент внешнеэкономической деятельности» и «Учет и аудит». Борис Петрович разработал и читал курс «Основы научных исследований». Он всегда уделял большое внимание организации студенческой науки на кафедре и факультете, привлекая способных студентов к участию в научно-исследовательских работах, обеспечивая лучших из них рабочими местами в период производственной и преддипломной практик.

Борис Петрович – не только организатор и координатор науки, но и ее активный популяризатор. Он вносил весомый вклад в просветительскую деятельность и настоятельно приобщал к ней ведущих сотрудников кафедры и факультета. Как человек со стойкой и активной жизненной позицией, он был прирожденным просветителем и популяризатором науки. Накопленными многосторонними глубокими знаниями и богатым опытом он щедро делился с коллегами, заводчанами, аспирантами, студентами.

Вторая половина XX в. ознаменовалась многими экономическими реформами и экспериментами, что потребовало не только научного и методического их сопровождения, но и необходимости овладения работниками инженерно-технических служб предприятий и учреждений новыми организационно-экономическими

и управленческими знаниями. Под руководством и при непосредственном участии Бориса Петровича коллективом кафедры создавалось методическое обеспечение и читались лекции на предприятиях Днепропетровской области, в Институте повышения квалификации руководителей и специалистов черной металлургии. Профессор Б.П. Бельгольский был также председателем Ревизионной комиссии Украинского республиканского научно-технического общества черной металлургии. Он активно приобщал сотрудников кафедры к общественной работе по народному контролю на металлургических предприятиях города.

Борис Петрович был всегда в авангарде инноваций, его отличали:

- приверженность к системному подходу при рассмотрении объекта и предмета исследования;
- глубина исследований по интенсификации инженерного труда;
- философская направленность излагаемого материала, что обеспечивало фундаментальность в подготовке специалистов;
- проблемное изложение лекций с реальными примерами из практики и конкретными предложениями по совершенствованию металлургического производства и управленческих функций;
- лидерство кафедры в разработке и внедрении передовых методов активного обучения и инновационных технологий в преподавании;
- оригинальная, в форме беседы, методика приема экзамена у студентов, элементами которой целесообразно было бы дополнить нынешний тестовый контроль знаний;
- умение объективно оценить оппонируемые диссертации и авторефераты, рецензируемые учебники, отчеты по НИР, научные статьи и др., за что Борис Петрович был всегда востребованным членом многочисленных ученых советов, редакций ведущих металлургических и экономических журналов и издательств, оргкомитетов научных конференций.

По инициативе и участии профессора Б.П. Бельгольского была спроектирована, создана и оснащена предметная аудитория 418, которая по праву должна носить имя ее создателя. Кроме того, целесообразно было бы переиздать его основные труды по организации производства, методологии научных исследований и инженерного творчества, не утратившие своей актуальности и в настоящее время.

Борис Петрович Бельгольский на протяжении всей своей научно-производственной, педагогической и общественной жизни был связан с коллегами узами тесного сотрудничества и профессиональной дружбы.

Высоко оценивая коллективный разум и учитывая достижения других вузов в решении конкретных научных проблем и созданные на их основе инновационные технологии обучения, Борис Петрович был инициатором подготовки совместных учебников и

учебных пособий и их публикации в центральных изданиях, продолжая традицию основателя кафедры ОПП ДМетИ и его первого заведующего Гликмана Эммануила Соломоновича. Опыт коллективного взаимодействия при подготовке и издании научно-методического обеспечения учебного процесса он передавал кафедральному коллективу, распределяя главы между ведущими преподавателями в соответствии с их научными интересами и специализацией учебной нагрузки, консультировал всех и контролировал ход и сроки. В 1992 г. Минвузом страны и центральным издательством «Металлургия» был проведен конкурс на учебное пособие для вузов «Технико-экономические расчеты по организации, планированию и управлению металлургическим предприятием». Возглавляемый Борисом Петровичем, авторский коллектив кафедры был одним из призеров.

Профессор Бельгольский Б.П. автор более 200 научных трудов, в том числе 15 учебников (в соавторстве): «Научная организация и техническое нормирование на предприятиях черной металлургии», «Организация труда и планирование ремонтов на металлургических предприятиях», «Организация и планирование производства на металлургических предприятиях», «Эко-

номика, организация и планирование производства на предприятиях черной металлургии», «Математические методы и ЭВМ в экономической работе на металлургических предприятиях», «Технико-экономические расчеты по организации, планированию и управлению металлургическим предприятием» и др. Бельгольский Б.П. опубликовал 20 монографий (в соавторстве): «Повышение производительности прокатных станов», «Совершенствование организации, планирования и управления в прокатном производстве», «Сетевое планирование ремонтов черной металлургии», «Экономия металла в прокатном производстве», «Интенсификация инженерного творчества: потребности, методы, организация» и др. Под его руководством защищено 15 кандидатских диссертаций.

Он является для нас образцом мудрости, толерантности, беззаветного и преданного служения любимому делу, высокого профессионализма и скромности.

*Член-корреспондент АЭНУ,
почетный профессор НМетАУ Шпанковская Н.Г.,
заведующий кафедрой менеджмента НМетАУ,
профессор Козенков Д.Е.*

Над номером работали:

Леонтьев Л.И., главный редактор

Ивани Е.А., заместитель главного редактора

Потапова Е.Ю., заместитель главного редактора по развитию

Долицкая О.А., научный редактор

Расенец В.В., верстка, иллюстрации

Кузнецов А.А., системный администратор

Острогорская Г.Ю., менеджер по работе с клиентами

Подписано в печать 25.09.2019. Формат 60×90 ¹/₈. Бум. офсетная № 1.
Печать цифровая. Усл. печ. л. 10. Заказ. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского Дома МИСиС.
119049, г. Москва, Ленинский пр-т, 4.
Тел./факс: (499) 236-76-17, 236-76-35

IZVESTIYA

FERROUS METALLURGY

METHOD FOR CALCULATION THE MODES OF STRIPS COLD ROLLING ON MULTIPLE-STAND ROLLING MILL ENSURING COST REDUCTION OF SHEET ROLLING SHOP PRODUCTION. REPORT 2. AN EXAMPLE OF THE METHOD PRACTICAL USE ON FOUR-STAND ROLLING MILL 1400

STRAIGHTENING OF LOW-RIGID CYLINDRICAL DETAILS. PART 2. STRESSED STATE OF CYLINDRICAL BILLETS AT TRANSVERSE CHEESING BY FLAT PLATES

CHOICE OF TEMPERATURE AND TIME CONDITIONS OF HEATING FOR THE COMBINED PROCESS OF BORATING AND VOLUME TRAINING OF LARGE STAMPS OF 5KhNM STEEL

SCREW ROLLING OF PIPES IN A FOUR-HIGH ROLLING MILL

REGULARITIES OF DISTRIBUTION OF WIRE DEFORMATION IN MULTILAYERED STRAND AT CIRCULAR CALIBRATION COMPRESSION

USE OF EXPANDER-GENERATOR UNIT AT CHP OF METALLURGICAL PLANT FOR PRODUCING ELECTRIC POWER AND INCREASING EFFICIENCY OF COMPRESSOR

CHEMICAL REACTIONS IN PROCESSES OF CARBON GASIFICATION

THERMODYNAMIC INTERACTION COEFFICIENTS IN LOW-CONCENTRATED LIQUID BINARY ALLOYS

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF THE MELT OF OXIDE-FLUORIDE INDUSTRIAL SLAG-FORMING MIXTURE

CALCULATION OF THE THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF Fe–P SYSTEM BY METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

FATIGUE PROCESS OF AUTOMOBILE MATERIALS

TO THE 100TH ANNIVERSARY OF BORIS PETROVICH BEL'GOL'SKII