го состава марганцевой руды Никопольского месторождения / В. И. Грязнов, Л. В. Червоноокая, К. И. Тищенко [и др.] // Марганец - 1965. -Nº 3 (7). - C. 12-14.

- 3. Шуваев С. П. Модернизация агломашины, агломерационного оборудования, совершенствование технологии производства марганцевого агломерата и внедрение новых пылеочистных установок на БОАФ / С. П. Шуваев, В. И. Бондарец, Л. Л. Куцевол // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 2016. -№ 1. - C. 34-39.
- 4. Войтаник С. Т. Технология производства и качество агломерата из концентратов окисной марганцевой руды / С. Т. Войтаник, В. А. Куксенко, Д. А. Киссин // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 1975. - № 3 (93). -C. 22-27.
- 5. Гасик М. И. Марганец. Гл. 18. Агломерация, брикетирование и окомкование марганцевых концентратов / М. И. Гасик. - М.: Металлургия, 1992. - 608 с.
- 6. Куцин В. С. Разработка сквозной технологической схемы получения марганцевого магнезиального агломерата и выплавки ферросиликомарганца / В. С. Куцин, М. И. Гасик // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 2011. - № 6. - С. 12-16.

- 7. Ганина Д. Р. Обзор и анализ математических моделей производительности агломерационных машин / Д. Р. Ганина, В. Г. Дружков, А. А. Панычев, А. Н. Шаповалова // Теория и технология металлургического производства. -2014. - № 2. - С. 20-28. (Металлургия, 2015. реф. 15.07-158.47).
- 8. Куцевол Л. И. Об устойчивости минеральных ассоциаций в окисленных марганцевых рудах Никопольского месторождения / Л. И. Куцевол, П. А. Егоров // Геология и геохимия минералов. - М.: Наука, 1982. - С. 154-157.
- 9. Хитрик С. И. Кинетика процессов термической диссоциации природных рудных образцов марганцевых минералов / С. И. Хитрик, Ю. В. Беликов, Л. П. Палюх, Ю. П. Пашков // Восстановительные процессы в производстве ферросплавов; под науч. ред. С. Т. Ростовцева и М. И. Гасика. - М.: Наука, 1977. - С. 112-116.
- 10. Величко Б. Ф. Металлургия марганца Украины / Б. Ф. Величко, В. А. Гаврилов, М. И. Гасик, С. Г. Грищенко [и др.]; под общей и научной редакцией акад. НАН Украины М. И. Гасика. - Киев: Техника, 1996, - 472 с.

Поступила 27.01.2016



УДК: 669.141.24:669.14.018.294.3

Наука

- А. И. Бабаченко /д. т. н./, Д. Н. Тогобицкая /д. т. н./,
- А. С. Козачёк, А. А. Кононенко /к. т. н./,
- А. В. Кныш /к. т. н./; И. Р. Снигура

Институт черной металлургии имени 3. И. Некрасова

НАН Украины

Оптимизация химического состава стали для железнодорожных колес, обеспечивающего стабилизацию механических и повышение эксплуатационных свойств

На основе параметров межатомного взаимодействия выявлено влияние элементов матричной и микролегирующей подсистем на формирование механических свойств сталей для железнодорожных колес, производимых в условиях ПАО «ИНТЕРПАЙП НТЗ». На базе вычислительного и лабораторного экспериментов обоснованы «суженные» пределы и соотношения элементного состава, обеспечивающие требуемые механические свойства и повышение стойкости к термическому воздействию. (Ил. 8. Библиогр.: 10 назв.).

Ключевые слова: железнодорожные колеса, химический состав, механические свойства металлопродукции, термодинамическое воздействие, «суженные» диапазоны, интегральные параметры межатомного взаимодействия.

© А. И. Бабаченко /д. т. н./, Д. Н. Тогобицкая /д. т. н./, А. С. Козачёк, А. А. Кононенко /к. т. н./, А. В. Кныш /к. т. н./; И. Р. Снигура, 2016 г.

Based on the parameters of the interatomic interaction were revealed the influence of elements of the matrix and micro-alloying subsystems on the formation of mechanical properties of steel for railroad wheels produced under conditions of PJSC «INTERPIPE NTRP». On the basis of the computing and laboratory experiments are proved the «narrowed» limits and ratios of elemental composition, providing the required mechanical properties and increasing resistance to thermal influence.

Key words: railway wheels, chemical composition, the mechanical properties of steel products, thermodynamic influence, «narrowed» ranges, integral parameters of the interatomic interaction.

Состояние вопроса

При эксплуатации колес в каждом их элементе возникает сложная быстро изменяющаяся во времени система сжимающих и растягивающих напряжений. Напряжения в контакте «колесо рельс» приводят к повреждениям, подавляющее большинство которых можно классифицировать как износ поверхности катания, дефекты теплового характера, дефекты усталостного происхождения и хрупкое разрушение металла. К тому же при торможении в зоне контакта колеса с рельсом может происходить быстрый высокотемпературный разогрев металла обода выше критической температуры Ас, с последующим ускоренным охлаждением, в результате которого в этих областях возможна фазовая перекристаллизация металла с образованием новой структурной составляющей - мартенсита. Структурные превращения в локальных областях обода колеса вызывают внутренние напряжения и, как следствие, появление микротрещин, которые под действием ударных нагрузок и формирующегося очага напряжений в их вершинах развиваются вглубь обода и распространяются вдоль границы между микрообъемом металла, претерпевшим превращение, и основным металлом. Это приводит к образованию выщербин термического происхождения.

Поэтому жесткие требования предъявляются не только к конструкции колеса, но и к качеству материала, применяемого для его изготовления. Колесо должно обладать высоким уровнем прочностных, пластических свойств, ударной вязкости и вязкости разрушения при низкой чувствительности к тепловому воздействию.

Необходимое сочетание свойств достигается главным образом за счет выбора оптимального структурного состояния металла, которое определяется химическим составом колесной стали и режимами термической обработки колес. При выборе материала исходят из конкретных условий эксплуатации колес, их назначения. В настоящее время в связи с планируемым увеличением на железных дорогах Украины осевых нагрузок грузовых вагонов до 25 т и увеличением скорости движения пассажирских поездов, существенно повышаются требования к металлу колес. На первое место выдвигается проблема их износа и стойкости к тепловому воздействию.

Таким образом, разработка новых и оптимизация существующих составов колесных сталей за счет снижения содержания углерода путем компенсации его как упрочнителя элементами матричной микролегирующей систем (Si, Mn, V) является актуальной задачей.

Сложность разработки новых марок сталей для колес заключается в том, что необходимо при этом удовлетворить ряд особых требований. Колесная сталь должна обладать, прежде всего, высокой износостойкостью и контактной прочностью. Наиболее простым путем улучшения этих характеристик является повышение содержания углерода. Однако для повышения сопротивления колесной стали образованию на поверхности катания «белого слоя», способствующего возникновению дефектов тормозного (теплового) происхождения, и с целью уменьшения склонности стали к термическому растрескиванию и хрупкому разрушению содержание углерода в ней должно быть снижено. При этом имеющее место разупрочнение стали необходимо компенсировать введением недорогих легирующих элементов и применением более эффективных процессов термической обработки [1-3].

Повышение эффективности управления процессами, обеспечивающими получение качественной колесной стали, требует разработки информационно-математического обеспечения, основанного на адекватной связи химического состава стали со служебными свойствами металлопродукции.

Эффективность решения стратегических задач обеспечения конкурентоспособности металлопродукции в конкретных промышленных условиях в значительной степени определяется степенью компьютеризации научно-технических служб и производственных участков, наличием работоспособных информационно-аналитических систем комплексного анализа текущих производственных данных.

Развиваемая в ИЧМ НАН Украины методология создания и практического использования информационно-аналитических систем [4; 5] на основе баз данных и моделей металлических расплавов является основой для автоматизации многопланового поиска оптимальных решений. Современные информационные технологии позволяют решать проблемы с различными типами данных и получать выборки для любых срезов информации, обеспечивающие решение прогнозных задач на основе комплексного анализа и интерпретации разнотипных данных.

С целью выявления основных закономерностей, влияния состава сталей для железнодорожных колес на комплекс их свойств с учетом технологии термообработки сформирован представительный массив опытных данных. В его состав включена информация о характеристиках 69 плавок стали марки Т (мартеновского производства), ER7 (n=20), ER8 (n=5) и марки Т (n=36), (НЛЗ) в условиях ПАО «ИНТЕРПАЙП НТЗ».

Механические свойства металлопродукции и химический состав стали целевого назначения обычно имеют широкую колеблемость, зашумленность, зачастую и неполноту данных. В связи с этим принята концепция оценки достоверности данных путем последовательного уточнения областей (по принципу «микроскопа») на основе поэтапного анализа исходной информации.

С целью многопланового анализа данных сгенерировано математическое обеспечение, включающее наряду с традиционным программным обеспечением первичного анализа данных оригинальные методы целенаправленного проецирования данных, поиска скрытых закономерностей на основе методов физико-химического моделирования многокомпонентных металлических расплавов, охваывающих широкий спектр легирующих элементов.

Использование современных информационных технологий является эффективным средством решения задач оптимизации качества металлопродукции целевого назначения.

Изложение основных материалов исследования

С целью оценки влияния химического состава колесной стали на ее механические свойства и температуры фазовых превращений использована разработанная в ИЧМ НАНУ методика физико-химического моделирования, принцип которой заключается в описании химического состава расплава комплексом интегральных модельных параметров межатомного взаимодействия, характеризующих его химическое и структурное состояние.

Реализация разработанной методики включает [6; 7]:

1. Расчет модельных параметров межатомного взаимодействия для данного химического состава зарядового Z^Y (e) и структурного d (10^{-1} нм) состояния, которые определяются как результат попарного взаимодействия всех его (m) ком-

понентов путем решения системы нелинейных $m^2 - m + 1$ уравнений:

$$\begin{cases} a - f(\Delta e_{ij}^{'}) = 0, \\ d - f(\Delta e_{ij}^{''}) = 0, & i = 1, 2, ..., m - 1, j = i + 1, ..., m, \\ 4 \cdot Z^{X}(a, \Delta e^{'}) + Z^{Y}(d, \Delta e^{''}) = 0, \end{cases}$$
(1)

где $\Delta e_{ij}^{'}$ – количество электронов, которые локализуются при взаимодействии в направлении связи i-j на расстоянии a (по диагонали ОЦК или ГЦК-решеток), $\Delta e_{ij}^{''}$ – на расстоянии $d=0.866\cdot a$ по грани,

$$\Delta e^{'} = (\Delta e_{12}^{'}, \Delta e_{13}^{'}, \Delta e_{ij}^{'}, \Delta e_{m-1,m}^{'}),$$

$$\Delta e^{''} = (\Delta e_{12}^{''}, \Delta e_{13}^{''}, \Delta e_{ij}^{''}, \Delta e_{m-1,m}^{''})$$

В результате решения указанной нелинейной системы уравнений определяются

$$a, \Delta e_{ij}^{'}, \Delta e_{ij}^{"}, i = 1,...,m-1, j = i+1,...,m.$$

Параметр Z^Y определяется путем усреднения эффективных зарядов всех типов связей i-j с длиной связи d:

$$Z^{Y} = \sum_{k=1}^{m} \frac{\lg R u_{k}^{o} - \lg(d/2)}{\lg \alpha_{k}} \cdot n_{k}^{2} + 2 \cdot \sum_{k=1}^{m-1} \sum_{l=k+1}^{m} n_{k} \cdot n_{l} \cdot \Delta e_{kl}^{"}, \quad (2)$$

где n_k – мольная доля, Ru_k^o – радиус неполяризованного атома, $tg\alpha_k$ – параметр, который характеризует изменение электронной плотности при ионизации атома k-того компонента;

- 2. Построение на основе экспериментальных данных прогнозных моделей для основных механических характеристик ($\sigma_{\scriptscriptstyle B}$, δ , HB и др.) как функций отдельных модельных параметров, так и их сочетаний;
- 3. Определение рекомендуемых диапазонов изменения интегральных параметров, обеспечивающих требуемый уровень свойств.
- 4. Определение химического состава стали, удовлетворяющего выполнению требуемых диапазонов интегральных параметров на основе методов оптимизации.

Использование интегральных параметров Z^Y и d в качестве «свертки» химического состава многокомпонентного расплава позволяет увеличить информационную мощность моделей и снизить их параметричность. На базе указанных выше экспериментальных данных об углеродистых сталях для железнодорожных колес получены регрессионные уравнения, описывающие их механические свойства ($r \ge 0.85$):

$$\sigma_{\beta} = 2808 + 6685 \cdot Z^{Y} - 3646 \cdot d$$

$$HB30_{MM} = 2091 + 1502 \cdot Z^{Y} - 1331 \cdot d$$

$$\delta = 86 \cdot d - 36 \cdot Z^{Y} - 178$$

Высокая точность моделей позволяет использовать методологию вычислительного эксперимента для определения оптимального состава колесной стали. Для определения граничных условий использовалась зависимость прочностных свойств углеродистых сталей для железнодорожных колес от интегрального параметра зарядового состояния Z^Y (рис. 1).

Как следует из рис. 1, изменение параметра, 1,235≤ Z^Y ≤1,24 обеспечивает требуемые свойства колесных марок сталей. Для выявления поэлементного влияния на служебные свойства выполняется структуризация состава стали как химически единой системы, которая осуществляется на основе факторного и физико-химического анализов с разделением их на подсистемы: матричная, легирующая, микролегирующая и примесная. При таком подходе влияние каждой из подсистем рассматривается комплексно, через физико-химические параметры «свертки» химического состава каждой из них, что обеспечивает снижение размерности прогнозных моделей и позволяет получить адекватные и устойчивые модели по схеме «состав - структура - термическая обработка - механические свойства».

Отличительной особенностью разрабатываемой модели является то, что в качестве критериев оптимизации задаются не физикомеханические свойства, а набор соответствующих параметров межатомного взаимодействия, характеризующих расплав и его составные части как химически единую систе-

му. Накладывая ограничения на эти параметры, можно добиться определенной внутренней структуры расплава, которая, в свою очередь, обеспечит заданный комплекс механических свойств.

На рис. 2 представлен пример результатов структуризации химического состава стали для железнодорожных колес марок «2», «Т», «ER7», «ER8».

На основе выделенных факторов и соответствующей их физико-химической интерпретации экспертом принимается решение о представленных вариантах структуризации выбора модельных параметров для построения прогнозных моделей и обоснования граничных условий параметров оптимизации. Так, если физический смысл группировки химического состава матричной (фактор F1) и примесной (фактор F4) подсистем очевиден, то структура факторов F2 и F3, нагружаемых примесными микролегирующими элементами, требует соответствующей интерпретации. Значимые нагрузки микролегирующих элементов Cr, Ni и Ti, V, Мо являются, в соответствии с современными данными о физико-химических свойствах и реакционной способности в твердых растворах и расплавах, карбо- и нитридообразующими, что объясняет логику их объединения в одну группу.

Наиболее характерными параметрами при нагреве (охлаждении) стали являются критические температуры фазовых превращений (Ac_1 и Ac_3). В соответствии с величинами температурных значений Ac_1 и Ac_3 назначаются и режимы

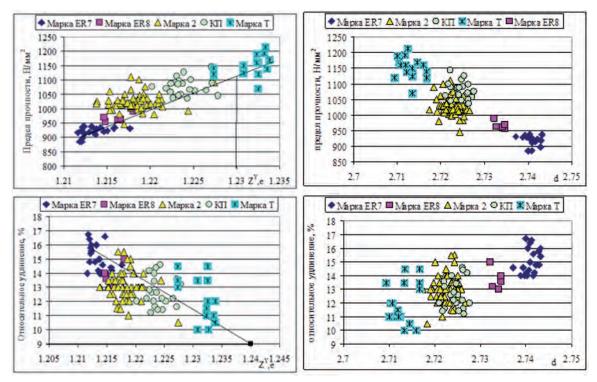


Рис. 1. Зависимость механических свойств колесных марок сталей от модельных параметров

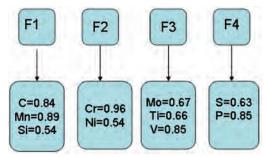


Рис. 2. Значимые нагрузки переменных на интегральные факторы

термической обработки для придания сталям необходимых эксплуатационных свойств. Для повышения устойчивости сталей к тепловым воздействиям обоснованным является такое их легирование, которое повышает значения критических температур превращения аустенита и расширяет межкритический интервал.

На основе анализа справочных экспериментальных данных [8; 9] для прогнозирования величин критических температур и значений межкритического интервала Δ Ac с использованием интегральных параметров межатомного взаимодействия получены уравнения:

$$Ac_3$$
, °C = 301480, 86 – 96, 01 Z^Y – 1572, 26 d – 296435 $tg\alpha$
r = 0,8 (3)

$$\Delta Ac$$
, °C = 21255 + 143,55 Z^{Y} - 595,1 d - 222770 $tg\alpha$ r = 0,89 (4)

Использование графических зависимостей, представленных на рис. 1, а также экстремальный характер кривых для критических температур позволяют определить граничные условия для решения задачи выбора оптимального состава элементов матричной подсистемы из со-

отношений:
$$0.8 \le \frac{Si}{Mn} \le 1.0$$
 , $1.6 \le Si + Mn \le 1.8$. Как следует из рис. 3, требуемой системе ограниче-

ний соответствуют все соотношения кремния и марганца, удовлетворяющие граничным условиям, определяющим наиболее широкий интервал температур фазовых превращений, что обеспечивает предотвращение фазовых превращений при перегреве обода колеса при торможении.

Решение представленных неравенств реализовано в графическом виде (рис. 4). Показанным граничным условиям соответствуют значения для кремния 0,7–0,9 %; марганца 0,8–1,0 %.

Ограничения по углероду 0,55–0,6 получаем из сопоставительного анализа его влияния на интегральный параметр Z^Y при обеспечении ограничения 1,6 \leq $Si+Mn \leq$ 1,8 (рис. 5).

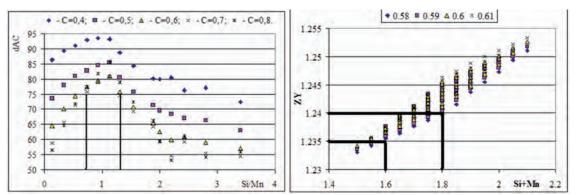


Рис. 3. Зависимость температур фазовых превращений и параметра зарядового состояния Z^Y углеродистых сталей для производства железнодорожных колес от их химического состава

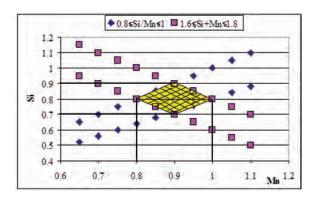


Рис. 4. Графическая интерпретация решения соотношений $0.8 \le \frac{Si}{Mn} \le 1.0$ и $1.6 \le Si + Mn \le 1.8$

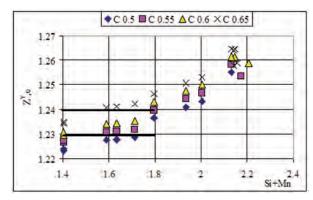


Рис. 5. Обоснование концентрации углерода при заданных ограничениях на показатель Z^Y в зависимости от содержания кремния и марганца

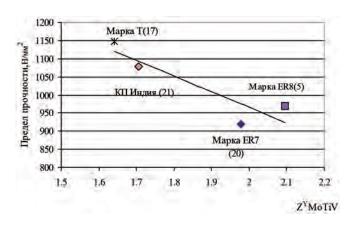


Рис. 6. Зависимость показателя предела прочности от модельных параметров микропримесной подсистемы

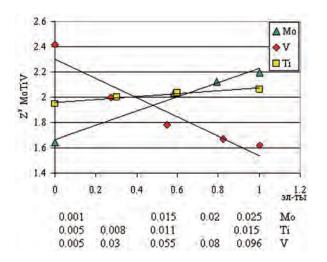


Рис. 7. Влияние элементов примесномикролегирующей подсистемы $Z_{\text{мотіv}}^{Y}$ на изменение параметров межатомного взаимодействия

В ходе вычислительного эксперимента получены диапазоны изменения элементов матричной системы, обеспечивающие требуемые технологические свойства: углерод (0,55–0,60 %); марганец (0,8–1,0 %); кремний (0,7–0,9 %).

На рис. 6 представлена зависимость между пределом прочности и параметром зарядового состояния подсистемы (Мо, Ті, V). С увеличением значения показателя $Z_{\text{мотіу}}^{Y}$ снижаются значения предела прочности.

В ходе вычислительного эксперимента (рис. 7) выявлено, что дополнительное микролегирование ванадием до 0,08 % приводит к уменьшению показателя $Z_{\text{мотіу}}^{Y}$ до 1,6е, что, в свою очередь, положительно сказывается на прочностных свойствах стали.

Построение картограмм изменения механических свойств сталей производства ПАО «ИНТЕРПАЙП НТЗ» (рис. 8) позволяет вычислить предполагаемую область механических свойств для стали ER7, дополнительно легированной ванадием.

При повышении термостойкости стали за счет микролегирования ванадием в структуре образуются дисперсные карбидные или интерметаллидные фазы большой устойчивости, не склонные к укрупнению при повышенных температурах. Ванадий более сильно упрочняет феррит, чем вольфрам и хром, и приближается по степени влияния на прочность к молибдену. Ванадий затрудняет коагуляцию карбидной фазы. Образование дисперсных равномерно распределенных карбидов, содержащих ванадий, и уменьшение диффузионной подвижности атомов углерода, вследствие присутствия в растворе ванадия, значительно повышают прочность стали с ванадием при повышенных температурах [10]. После отпуска

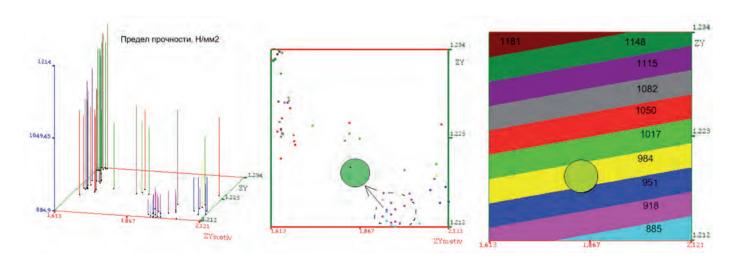


Рис. 8. Эффект микролегирования ванадием стали ER7

стали при температурах 400–660 °С процессы карбидообразования развиваются довольно медленно, причем в металле присутствуют карбиды VC и $\mathrm{Me_7C_3}$ в виде дисперсных выделений, упрочияющих сталь. Ванадий рекомендуется для микролегирования как элемент, эффективно измельчающий зеренную структуру стали.

Выводы

- 1. Предложена методика, позволяющая выявить скрытые закономерности влияния химического состава на физико-механические свойства колесных сталей на уровне межатомного взаимодействия.
- 2. На основе лабораторных исследований, вычислительного эксперимента и оптимизационных процедур программного комплекса «Оптимизация», а также графической интерпретации полученных зависимостей на основе экспериментальных данных о составе и свойствах железнодорожных колес, производимых в условиях ПАО «ИНТЕРПАЙП НТЗ», определены «суженные» диапазоны изменения элементов матричной системы (С = 0,55-0,60 %; Мп = 0,8-1,0 %; Si = 0,7-0,9 %), обеспечивающие требуемые механические свойства железнодорожных колес, соответствующие ГОСТ 10791-2011.
- 3. На основе методики структуризации общего состава стали (матричной, легирующей, микролегирующей) выявлено влияние элементов примесно-микролегирующей подсистемы в формировании прочностных свойств. Обоснован вклад ванадия, как одного из эффективных элементов микролегирования, в формирование прочностных свойств цельнокатаных железнодорожных колес.

Библиографический список

- 1. Узлов И. Г. Колесная сталь / И. Г. Узлов, М. И. Гасик, А. Т. Есаулов [и др.]. К.: Техник, 1985. 168 с.
- 2. Бабаченко А. И. Исследование причин образования дефектов на поверхности катания высокопрочных колес в процессе эксплуатации и разработка рекомендаций по их умень-

- шению / А. И. Бабаченко // Сборник докладов Всемирного конгресса по железнодорожным колесам (г. Кейптаун, ЮАР, 2010 г.).
- 3. Узлов И. Г. Опытно-промышленное опробование высокопрочных легированных сталей для цельнокатаных железнодорожных колес / И. Г. Узлов, Т. В. Ларин, Н. Г. Мирошниченко [и др.] // Термическое упрочнение проката: сб. науч. тр. Вып. 36. М.: Металлургия, 1970. С. 99–103.
- 4. Тогобицкая Д. Н. Информационно-математическое обеспечение оценки влияния химического состава на свойства колесной стали / Д. Н. Тогобицкая, А. И. Бабаченко, А. С. Козачёк, А. А. Кононенко, Л. А. Головко // Наукові вісті. Сучасні проблеми металургії. Дніпропетровськ: НМетАУ, 2014. № 16. С. 51–57.
- 5. Тогобицкая Д. Н. Оптимизация химического состава колесных марок сталей на основе параметров межатомного взаимодействия / Д. Н. Тогобицкая, А. И. Бабаченко, А. С. Козачёк, А. А. Кононенко, Л. А. Головко // Математичне моделювання. Днепродзержинск, 2014. № 1 (30). С. 44–47.
- 6. Приходько Э. В. Металлохимия многокомпонентных систем / Э. В. Приходько. - М.: Металлургия, 1995. - 320 с.
- 7. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов / Э. В. Приходько. Киев: Наукова думка, 1995. -292 с.
- 8. Попов А. А. Изотермические и термомеханические диаграммы распада переохлажденного аустенита / А. А. Попов, Л. Е. Попова // Справочник термиста. М.: Металлургия, 1965. 496 с.
- 9. Романов П. В. Превращения аустенита при непрерывном охлаждении стали / П. В. Романов, Р. П. Радченко // Атлас термокинетических диаграмм. Новосибирск, 1960.
- 10. Голиков И. Н. Ванадий в стали / И. Н. Голиков, М. И. Гольдштейн, И. И. Мурзин. М.: Металлургия, 1968. 291 с.

Поступила 04.02.2016

