

Критерии и модели для прогнозирования механических свойств для железнодорожных колес

Д. Н. ТОГОБИЦКАЯ, А. И. БАБАЧЕНКО, А. С. КОЗАЧЁК, А. А. КОНОНЕНКО, Л. А. ГОЛОВКО

Украина, Институт черной металлургии НАН Украины

Рассмотрена методика моделирования металлических расплавов на уровне межатомного взаимодействия. Интегральные параметры структуры и зарядового состояния предложено использовать в качестве модельных при разработке моделей для прогнозирования механических свойств стали для железнодорожных колес. Полученные модели позволяют с высокой точностью прогнозировать механические свойства на основе параметров межатомного взаимодействия с учетом режимов термической обработки.

Розглянута методика моделювання металевих розплавів на рівні межатомного взаємодії. Інтегральні параметри структури і зарядового стану запропоновано використовувати як модельні при розробці моделей для прогнозування механічних властивостей колісної сталі. Отримані моделі дозволяють з високою точністю прогнозувати механічні властивості на основі параметрів міжатомної взаємодії з урахуванням режимів термічної обробки.

The method of simulation of metal melts at interatomic interaction was considered. Integral parameters of the structure and charge state proposed used as a model in the development of models to predict the mechanical properties of the steel wheel. These models allow us to accurately predict the mechanical properties based on the parameters of the interatomic interaction in view of heat treatment.

Состояние вопроса. Обеспечение 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 [1,2].

Для создания моделей оперативной оценки механических свойств стали для железнодорожных колес с различным режимом термической обработки сформулирована выборка из базы текущих производственных данных (n=71) (таблица 1).

Таблица 1. Химический состав, режимы термической обработки (ТО) и механические свойства для некоторых плавок железнодорожных колес.

№	C, %	Mn, %	Si, %	P, %	S, %	Cr, %	T _{закалки} , °C	T _{отпуска} , °C	σ _B , Н/мм ²	δ ₅ , %	ψ, %
1	0,53	0,68	0,67	0,005	0,006	0,17	920	520	980	14,5	33
2	0,57	0,8	1,31	0,008	0,006	0,08	900	500	1136,8	9	12
3	0,59	0,79	1,09	0,008	0,007	0,08	900	500	1127	12,5	22,5
4	0,59	0,75	1,26	0,01	0,011	0,11	900	500	1146,6	9,8	15,5
5	0,53	0,69	0,62	0,005	0,007	0,17	890	520	970	16	30

Процедура «свертки» химического состава сталей и выявление скрытых закономерностей для генерации моделей оптимальной структуры. Существующие подходы к оптимизации химического состава стали, обеспечивающего требуемые механические свойства сталей, как правило, базируются на статистических моделях состав-свойство, не отражающих физико-химические аспекты поведения многокомпонентного расплава на заключительных стадиях технологии получения готовой продукции (фазовые превращения, механизм упрочнения и т.д.)

Решение проблемы снижения размерности задач прогнозирования на основе теории направленной химической связи [3], рассматривающий металлический расплав, как химически единую систему и факторного анализа является основной методикой данного исследования. Поскольку фазовые превращения являются следствием межатомного взаимодействия в многокомпонентном расплаве, на первом этапе осуществляется «свертка» химического состава через интегральные параметры зарядового Z^Y (e) и структурного d (нм 10^{-1}) состояния,

которые рассчитываются как результат попарного взаимодействия все его m компонент путем решения системы нелинейных m^2-m+1 уравнений:

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

где $\Delta e'_{ij}$ - количество электронов, которые локализируются 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

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

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

$$Z^Y = \sum_{k=1}^m \frac{\lg Ru_k^0 - \lg(d/2)}{\text{tg} \alpha_k} \cdot n_k^2 + 2 \cdot \sum_{k=1}^{m-1} \sum_{l=k+1}^m n_k \cdot n_l \cdot \Delta e_{kl}^m, \quad (2)$$

где n_k - мольная доля, Ru_k^0 - радиус неполяризованного атома, $\text{tg} \alpha_k$ - параметр, который характеризует изменение электронной плотности при ионизации атома k -того компонента. Использование интегральных параметров Z^Y и d в качестве «свертки» химического состава

Таблица 2. Интегральные параметры межатомного взаимодействия общей, матричной и примесных подсистем для представленных в табл.1 некоторых составов сталей железнодорожных колес.

№	Z^Y, e	$d, \text{нм} \cdot 10^{-1}$	Z^Y, m	d, m	$Z^Y, \text{CrTiCuAl}$	d_{CrTiCuAl}	Z^Y, PS	d_{PS}
1	1,923	2,817	1,577	1,728	1,840	2,821	1,534	2,467
2	1,893	2,831	1,623	1,786	1,748	2,858	1,530	2,446
3	1,889	2,828	1,611	1,762	1,744	2,855	1,538	2,453
4	1,944	2,824	1,610	1,765	1,804	2,840	1,538	2,463
5	1,932	2,817	1,571	1,725	1,847	2,823	1,528	2,472

ва многокомпонентного расплава позволяет увеличить информационную мощность моделей и снизить их параметричность.

Реализация процедур «свертки» химического состава многокомпонентных железоуглеродистых расплавов по предложенной методике осуществляется в программном модуле «Металл» (таблица 2). На рис. 1 представлены зависимости предела прочности (σ_B) и относительного удлинения (δ) от показателя химического эквивалента состава, суммирующего расчетную информацию об эффективных зарядах компонентов - Z^Y и структурного параметра - d с учетом режимов термической обработки.

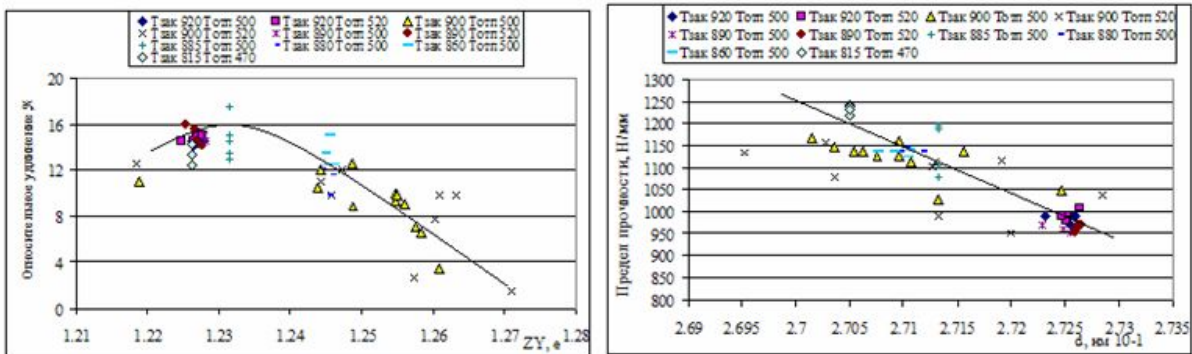


Рис. 1. Зависимость механических свойств железнодорожных колес от их химического состава с учетом режимов термической обработки.

Учитывая высокую корреляционную связь механических свойств, с параметрами межатомного взаимодействия и режимом термической обработки, предложены прогнозные модели для прогнозирования комплекса свойств в виде: $\sigma_B, \delta, \psi = f(Z^Y, d, T_{\text{отп}}, T_{\text{зак}})$ ($r \approx 0,8$) (3-5). Это дает нам основание для использования параметров межатомного взаимодействия в качестве критериев оптимизации.

$$\sigma_B = 1860 - 6147 \cdot d - 0,185 \cdot T_{\text{зак}} - 1,424 \cdot T_{\text{отп}} \quad (3)$$

$$\delta_5 = -10729 + 17487 \cdot Z^Y - 0,007 \cdot T_{\text{зак}} + 0,003 \cdot T_{\text{отп}} \quad (4)$$

$$\psi = 1035 - 628 \cdot Z^Y - 0,149 \cdot T_{\text{зак}} - 0,192 \cdot T_{\text{отп}} \quad (5)$$

С целью выявления вклада в формирование механических свойств структурных подсистем – матричной и примесных (P,S) и (Cr, Ti, Cu, Al) выполнен факторный анализ [4]. С учетом выделенных интегральных факторов и соответствующей группировки компонентов по их факторным нагрузкам (рис. 2) многокомпонентная система структурируется на подсистемы:

а) матричная подсистема, включает: углерод, марганец, кремний;

б) примесная подсистема, включает, как вредные примеси: серу, фосфор, азот так и полезные тугоплавкие металлы, например хром, никель, титан и др.

При таком подходе влияние примесных и матричной подсистем, оценивается комплексно через их физико-химические критерии (химические эквиваленты).

На рис. 2 представлен пример результатов структуризации химического состава стали для железнодорожных колес, выплавляемой в условиях ПАО «ИНТЕРПАЙП НТЗ».

На основе факторного анализа рассчитаны интегральные параметры для матричной и примесных подсистем. На рис. 3 представлены зависимости между механическими свойствами и параметрами межатомного взаимодействия примесных подсистем.

Из приведенных зависимостей, следует что, существенный вклад в формирование относительного

удлинения оказывает примесная подсистема (Cr, Ti, Cu, Al), а для предела прочности – (S,P).

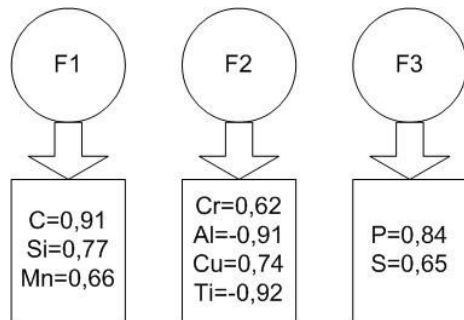


Рис. 2. Значения факторных нагрузок на интегральные факторы

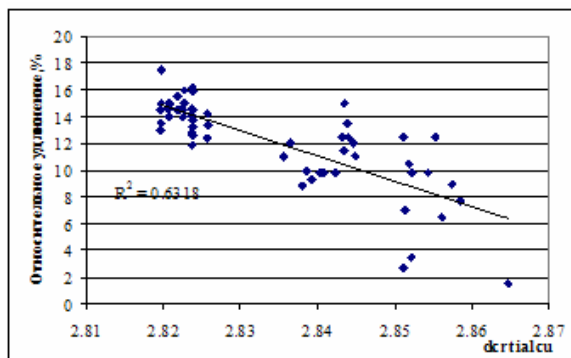


Рис.3 Взаимосвязь механических свойств сталей для железнодорожных колес и параметров межатомного взаимодействия примесных подсистем.

Для повышения точности прогноза относительного удлинения и сужения было принято решение дополнить модель параметром структурного состояния $d_{(Cr, Ti, Cu, Al)}$. Однако из-за высокого сродства между параметром Z^Y общей подсистемы и параметром $d_{(Cr, Ti, Cu, Al)}$ примесной ($r^2=0,78$), в качестве модельного предлагается использовать параметр d .

$$\sigma_B = 1794 - 5402 \cdot d - 511 \cdot d_{S,P} - 0,092 \cdot T_{зак} - 2,04 \cdot T_{отп} \quad r=0,86 \quad (6)$$

$$\delta_5 = 550 - 188 \cdot d_{CrTiCuAl} - 0,016 \cdot T_{зак} + 0,017 \cdot T_{отп} \quad r=0,8 \quad (7)$$

$$\psi = 1501 - 271 \cdot d_{CrTiCuAl} - 0,147 \cdot T_{зак} - 0,164 \cdot T_{отп} \quad r=0,87 \quad (8)$$

Выводы

Для обеспечения физичности моделей прогнозирования механических свойств сталей для железнодорожных колес предложено использовать интегральные физико-химические критерии – структурный параметр d (нм 10^{-1}) и физико-химический эквивалент $Z^Y(e)$.

Использование параметров межатомного взаимодействия наряду с факторным анализом обеспечивает оценку влияния матричной и примесных подсистем на

формирование механических свойств и высокую точность прогнозных моделей с целью неразрушающего контроля качества металлпродукции.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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. Головки // Математичне моделювання. — №1 (30). — Днепродзержинськ. 2014 — С. 44—47
2. Тогобицкая Д. Н. Информационно-математическое обеспечение оценки влияния химического состава на свойства колесной / Д. Н. Тогобицкая, А. И. Бабаченко, А. С. Козачёк, А. А. Кононенко, Л. А. Головки // Сучасні проблеми металургії. — №16. — Днепропетровск, 2014. — С. 51—56
3. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов / Э. В. Приходько. Киев : Наукова думка. — 1995. — 292 с.
4. Иберла К. Факторный анализ. Пер. с нем. Ивановой В. М. / К. Иберла К. М. : Статистика. — 1980. — 399 с.