

## Оптимизация химического состава колесных марок сталей на основе параметров межатомного взаимодействия

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

Украина, Институт черной металлургии НАН Украины

В качестве интегральных параметров для разработки прогнозных моделей оценки технологических свойств колесных марок стали предложены физико-химические критерии, характеризующие межатомное взаимодействие в расплаве. На основе вычислительного эксперимента обоснован рекомендуемый состав стали, обеспечивающий требуемые механические свойства.

В якості інтегральних параметрів для розробки прогнозних моделей оцінки технологічних властивостей колесних марок сталі запропоновані фізико-хімічні критерії, що характеризують міжатомну взаємодію в розплаві. На основі обчислювального експерименту обґрунтований рекомендований склад сталі, що забезпечує необхідні механічні властивості.

By the way of integral parameters for the development of predictive models for assessing the technological properties of wheel steels physicochemical criteria characterizing the interatomic interaction in the melt. On the basis of numerical experiments justified the recommended composition of the steel, which provides the required mechanical properties.

**Состояние вопроса.** Железнодорожные колеса в процессе эксплуатации постоянно испытывают воздействие статистических, динамических и циклических нагрузок. Высокие термические напряжения приводят к возникновению трещин и других дефектов теплового воздействия. В этой связи особо актуальными являются вопросы, направленные на изучение поэлементного влияния химического состава на физико – механические свойства колесных марок сталей, такие как временное сопротивление, предел текучести, относительное удлинение и сужение, ударная вязкость. Так как обод колеса работает в паре трения с рельсом, то он должен обладать высокой твердостью. К тому же при эксплуатации в процессе торможения колеса в зоне контакта с рельсом происходит высокотемпературный быстрый нагрев металла обода выше критической температуры АСЗ и последующее его охлаждение. В этих областях происходит фазовая перекристаллизация металла и образуется новая структурная составляющая.

Структурные превращения в локальных областях обода колеса вызывают внутренние напряжения и, как следствие, появление микротрещин, которые под действием высоких ударных нагрузок и формирующегося очага напряжений в зоне контакта трещины протекают в глубь обода и распространяются вдоль границы между поврежденным слоем и металлом. Это приводит к образованию выщерблин различной природы и размера, что обуславливает необходимость преждевременной обточки колесных пар.

Достижение высоких значений комплекса свойств при низкой чувствительности к тепловому воздействию достигается при использовании легированных сталей. Одним из возможных путей повышения качества колес является применение сталей, в которых содержание углерода снижено, а имеющее место при этом разупрочнение стали компенсировано введением недорогих легирующих элементов матричной системы, в частности, кремния и марганца. При этом эти легирующие элементы оказывают различное и во многом противоположное влияние на структуру и свойства сталей. Так марганец понижает значение критических точек АС1 и АС3, стабилизирует аустенит, повышает его устойчивость, а кремний, наоборот, повышает значения

этих критических точек, снижает устойчивость аустенита, стабилизируя феррит. Поэтому следует учитывать взаимное влияние этих элементов при совместном введении в сталь и правильно определять их оптимальное содержание в стали

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

Развиваемая в ИЧМ НАН Украины методология создания и практического использования информационно-аналитических систем [1, 2] на основе баз данных, моделей шлаковых и металлических расплавов обеспечивает многоплановый поиск оптимальных решений.

Информационные системы (ИС) позволяют хранить различные виды информации: библиографические и фактографические данные, полнотекстовые документы, справочные данные, математические или численные (цифровые, табличные) данные, графические данные. Хранение информации в документально-фактографических базах позволяет решать проблемы с различными типами данных и получать выборки для любых срезов информации, обеспечивающие решение прогнозных задач на основе анализа и комплексной интерпретации разнотипных данных.

Сочетание документальной и фактографической частей наиболее удачно вписывается в документально-фактографические ИПС, позволяющие максимально использовать заложенные в ней возможности для последующей обработки информации.

Организации и вводу информации в базы должны предшествовать строгие правила ее формализации (паспортизации) без потери смысла информации, вырванной из контекста исходных сообщений. Структурированный документ состоит из отдельных частей (фрагментов), каждой из которых присваивается имя. Машинный паспорт экспериментальных данных (ПЭД) должен включать всю полноту информации без каких-либо предварительных обработок и "сглаживаний".

Обработка разнотипной информации обеспечивает:

- хранение информации в документально-фактографических базах данных с сохранением оригинальности их исходного представления;
- использование интерактивных диалоговых средств комплексного анализа для решения вопросов оценки достоверности экспериментальной информации и работоспособности моделей;
- использование теоретических и эмпирических моделей для прогнозирования свойств по выборкам из баз;
- использование разнопланового графического представления информации для интерактивной экспертной оценки зашумленных областей данных.

Механические свойства и химический состав стали целевого назначения обычно имеют широкую колеблемость, зашумленность, зачастую и неполноту. В связи с этим была принята концепция поэтапной оценки достоверности данных путем последовательного уточнения областей на основе прогноза свойств по ранее разработанным моделям и получении новых исследуемых данных.

Для переработки “информационного сырья” с целью организации документально-фактографических баз данных используется программа WinPipe, разработанная в отделе физико-химических проблем ИЧМ НАНУ. Программа предназначена для создания и работы с документально-фактографическими базами данных, позволяет вводить документальную (текстовую), фактографическую (табличную) и графическую информацию. Для документальной информации существует возможность поиска по индексированным полям. Поиск документов осуществляется по лексическим единицам (словам, числам, датам и их интервалам) или фразам, содержащимся в текстах документов. Для фактографической информации предусмотрен просмотр в виде таблиц. К настоящему времени в базе «Металл» накопленные данные о составах и свойствах свыше 800 марок сталей.

**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 [3, 4]:

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

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

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

$$a, \Delta e'_{ij}, \Delta e''_{ij}, i = 1, \dots, m-1, j = i+1, \dots, m.$$

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

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

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;

2. Построение на основе экспериментальных данных прогнозных моделей для основных механических характеристик ( $\sigma_b$ ,  $\delta$ , НВ 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 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 экспериментальных данных об углеродистых сталях для железнодорожных колес, получены регрессионные уравнения, описывающие их механические свойства ( $r \geq 0,8$ ):

$$\sigma_b = 2808 + 6685 \cdot Z^Y - 3646 \cdot d$$

$$\text{HB30mm} = 2091 + 1502 \cdot Z^Y - 1331 \cdot d$$

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

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).

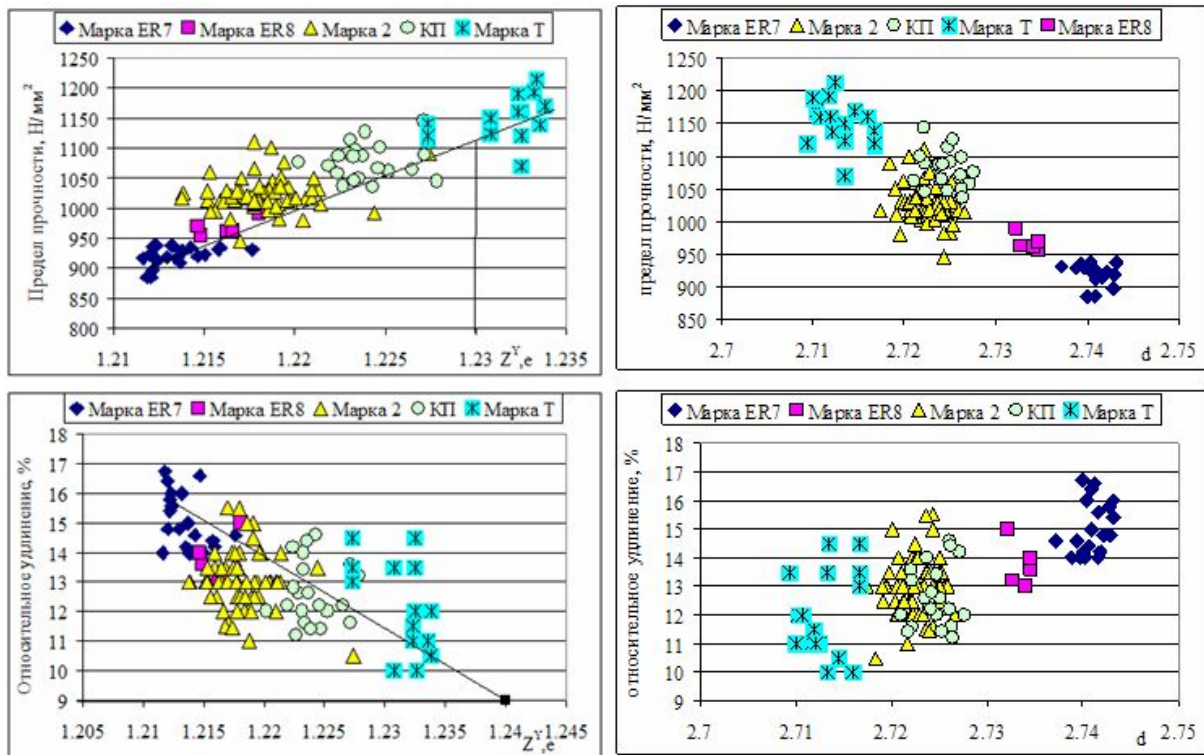


Рис.1. Зависимость механических свойств колесных сталей от модельных параметров.

Как следует из рис. 1 изменение параметра,  $1,235 \leq Z^Y \leq 1,24$  обеспечивает требуемые свойства.

Использование графических зависимостей, представленных на рис. 1—2, а также их экстремальный характер позволяют определить граничные условия для решения задачи выбора оптимального состава ста-

ли:  $0,8 \leq \frac{Si}{Mn} \leq 1,0$ ,  $1,6 \leq Si + Mn \leq 1,8$ . Как следует из рис.

2, требуемой системе ограничений соответствуют все соотношения кремния и марганца удовлетворяющие, граничным условиям.

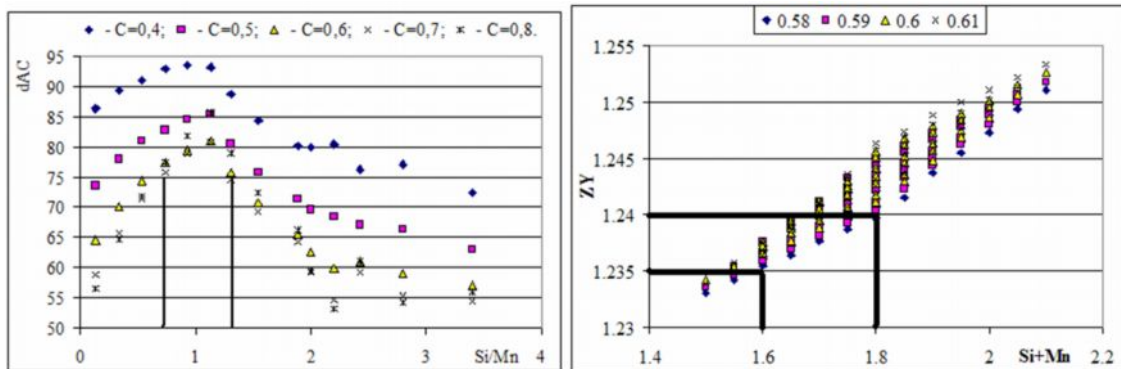


Рис.2. Зависимость температур фазовых превращений и параметра зарядового состояния  $Z^Y$  углеродистых сталей для производства железнодорожных колес от их химического состава.

Решение представленных неравенств реализовано в графическом виде (рис.3). Граничным условиям для кремния 0,7-0,9% и 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.4).

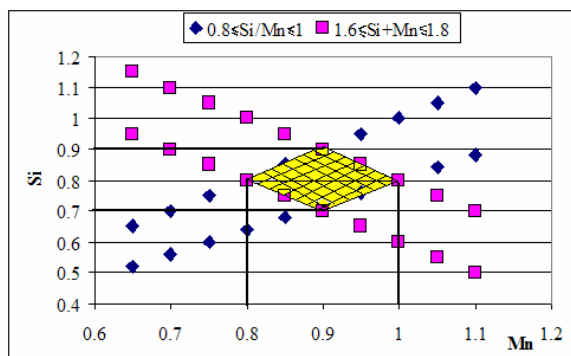


Рис.3. Графическая интерпретация решения соотношений  $0,8 \leq \frac{Si}{Mn} \leq 1,0$  и  $1,6 \leq Si + Mn \leq 1,8$ .

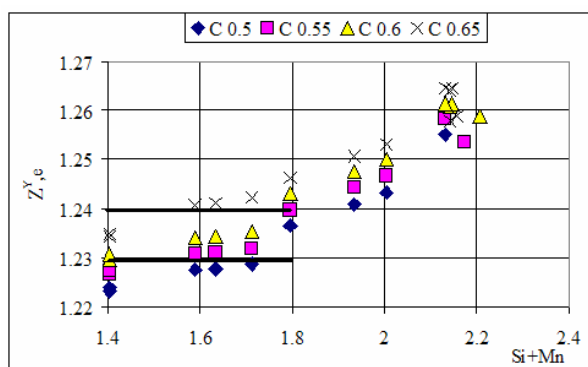


Рис. 4. Обоснование концентрации углерода при заданных ограничениях  $Z^Y$  от содержания кремния и марганца.

### Выводы

Использование современных информационных технологий создания информационно-аналитических

систем, обеспечивающих функционирование баз данных и базы моделей в тандеме взаимной дополнительности позволяет выявить скрытые закономерности влияния химического состава на физико – механические свойства сталей целевого назначения на уровне межатомного взаимодействия и получить адекватные полуперические модели для их прогнозирования. На основе вычислительного эксперимента углеродистых сталей для производства железнодорожных колес производимых в условиях ОАО ИНТЕРПАЙП НТЗ определены диапазоны изменения элементов матричной системы, обеспечивающие требуемые технологические свойства, соответствующие ГОСТ 10791-2004: углерод (0,55-0,60%); марганец (0,8-1,0%); кремний (0,7-0,9%)

### ЛИТЕРАТУРА

1. Приходько Э. В. Информационно–математическое обеспечение оценки влияния химического состава на свойства готового проката. / Э. В. Приходько, Д. Н. Тогобицкая, А. С. Козачёк, В. Г. Раздобреев, Л. А. Головки // Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных работ.— Выпуск 3 (68). — Днепропетровск, 2010. — С. 33—39.
2. Приходько Е. В. Інформаційно-аналітична система стабілізації властивостей прокату / Е. В. Приходько, Д. М. Тогобицька, О. С. Козачок // Металознавство та обробка металів. — Киев. — 2011. — №1. — С.39—43.
3. Приходько Э. В. Металлохимия многокомпонентных систем / Э. В. Приходько. М. : металлургия. — 1995. — 320 с.
4. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов / Э. В. Приходько. Киев : Наукова думка. — 1995. — 292 с.