

УДК 621.771.2:54.06:681.3.003.12.

Д.Н. Тогобицкая, А.И. Бабаченко,
А.С. Козачёк, А.А. Кононенко, Л.А. Головки

ИНФОРМАЦИОННО – МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НА СВОЙСТВА КОЛЕСНОЙ СТАЛИ

Рассматривается методика оценки влияния химических элементов на механические свойства колесных сталей. Для генерации прогнозных моделей оптимальной структуры предложены в качестве интегральных параметров физико-химические критерии, характеризующие межатомное взаимодействие в расплаве. На основе многопараметрической оптимизации обоснован рекомендуемый состав стали, обеспечивающий требуемые механические свойства.

Ключевые слова: Колесная сталь, параметры межатомного взаимодействия, предел прочности, твердость.

Розглядається методика оцінки впливу хімічних елементів на механічні властивості колесних сталей. Для генерації прогнозних моделей оптимальної структури запропоновано в якості інтегральних параметрів фізико-хімічні критерії, що характеризують міжатомну взаємодію в розплаві. На основі багатопараметричної оптимізації обґрунтовано рекомендований склад сталі, що забезпечує необхідні механічні властивості.

The method of assessment of the impact of chemical elements on the mechanical properties of the steel wheel. To generate predictive models of optimum structure proposed as integral parameters of physico-chemical criteria characterizing the interatomic interaction in the melt. Based multiparameter optimization substantiated recommended composition of the steel, which provides the required mechanical properties.

Состояние вопроса. Высокие требования, предъявляемые к эксплуатационным свойствам железнодорожных колес предопределяются их ответственным назначением в структуре подвижного состава, непосредственным влиянием на безопасность движения и сложными специфическими условиями эксплуатации.

Существенная модернизация пути за последние десятилетия изменила условия работы колесных пар. Увеличившаяся жесткость полотна отразилась на состоянии рабочих поверхностей колес. Выщербины и контактно-усталостные трещины являются основными причинами выхода из строя колесных пар. Восстановление геометрии профиля катания колес обточкой в большинстве случаев ведет к существенному сокращению расчетного срока службы колесной пары.

На образование выщербин влияет целый ряд факторов эксплуатационного и материаловедческого характера. К первым относятся интенсивность торможения, скорость движения вагона, состояние тормозной системы и др. Материаловедческими факторами в первую очередь являются химический состав колесной стали и уровень твердости

колеса. В создании адекватных математических моделей, описывающих механические свойства колесных сталей, принципиальное значение имеет разработка физико-химических критериев, снижающих параметричность описательных моделей, обеспечивающих требуемую точность.

Постановка задачи. Разработать методику генерации прогнозных моделей оптимальной структуры с целью учета поэлементного влияния состава колесных сталей на их механические свойства для принятия управляющих решений.

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

Реализация разработанной методики включает [1,2]:

1. Расчет модельных параметров межатомного взаимодействия для данного химсостава зарядового Z^Y и структурного d состояния, которые определяются как результат попарного взаимодействия всех его m компонентов путем решения системы нелинейных $m^2 - m + 1$ уравнений:

$$\begin{cases} a - f(\Delta e_{ij}^{\cdot}) = 0, \\ a - f(\Delta e_{ij}^{\ddot{}}) = 0, & i = 1, 2, \dots, m - 1, j = i + 1, \dots, m, \\ 4 \cdot ZX(a, \Delta e^{\cdot}) + ZY(d, \Delta e^{\ddot{}}) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где Δe_{ij}^{\cdot} – количество электронов, которые локализуются при взаимодействии в направлении связи $i - j$ на расстоянии a (по диагонали ОЦК или ГЦК-решеток), $\Delta e_{ij}^{\ddot{}}$ – на расстоянии $d = 0,866 \cdot a$ по грани, $\Delta e^{\cdot} = (\Delta e_{12}^{\cdot}, \Delta e_{13}^{\cdot}, \Delta e_{ij}^{\cdot}, \Delta e_{m-1,m}^{\cdot})$, $\Delta e^{\ddot{}} = (\Delta e_{12}^{\ddot{}}, \Delta e_{13}^{\ddot{}}, \Delta e_{ij}^{\ddot{}}, \Delta e_{m-1,m}^{\ddot{}})$.

В результате решения указанной нелинейной системы уравнений определяются a , Δe_{ij}^{\cdot} , $\Delta e_{ij}^{\ddot{}}$, $i = 1, \dots, m - 1$, $j = i + 1, \dots, m$.

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

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

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 (σ_b , δ , НВ и др.) как функций отдельных модельных параметров, так и их сочетаний;

3. Определение рекомендуемых диапазонов изменения концентраций компонентов состава, обеспечивающих требуемый уровень свойств на основе методов, принятых в теории оптимизации.

Использование интегральных параметров Z^Y и d в качестве «свертки» химического состава многокомпонентного расплава позволяет снизить параметричность моделей. Реализация процедур «свертки» химического состава многокомпонентных железоуглеродистых расплавов по предложенной методике осуществляется в программном модуле «Металл».

Для проведения исследований о влиянии основных химических элементов (C , SI , MN) на механические свойства стали были отобраны колеса из стали марки Т и марки 2 с дефектами на поверхности катания. Поступившие на анализ данные о 764 составах колесной стали (КП-Т, КП-2) хранятся в определенных типизированных файлах. На основе информационно-поисковой системы осуществляется накопление указанных данных в базах (БД), обеспечивающее отображение информации, их анализ и комплексную интерпретацию данных, прогнозирование и моделирование ситуаций для совместной интерпретации и представления в терминах конечного целевого свойства.

Пример паспорта технологических данных

!Документ № 1;

Ключевые слова=№ плавки, обод, σ_b , Н/мм², δ , %, Ψ , %, КСУ+20, Н/см², НВ гл 30мм, НВ тА, химсостав $C, SI, MN, P, S, CR, MO, NI, AL, CU, V$;

Материал= колесная сталь;

#\$1**Мехсвойства**;

№плавки=; σ_b =; δ =; Ψ =; КСУ+20=; НВ гл 30мм=; НВ тА=;

41004 1019.2 13 29 0 285 229

32001 989.8 16 44 41.2 298 235

21002 1033.6 12 32 38.6 298 229

42008 1015 13 33 37.9 298 235

31002 990 11 28 40.3 293 235

#\$1**Химсостав**;

№плавки=; C =; SI =; MN =; P =; S =; CR =; NI =; AL =; CU =;

41004 0.61 0.35 0.74 0.007 0.005 0.09 0.04 0.030 0.05 0.005

32001 0.61 0.32 0.68 0.007 0.013 0.07 0.05 0.028 0.08 0.006

21002 0.58 0.32 0.72 0.012 0.007 0.1 0.08 0.018 0.08 0.007

42008 0.59 0.31 0.74 0.011 0.011 0.1 0.08 0.023 0.09 0.007

31002 0.59 0.31 0.72 0.019 0.005 0.13 0.07 0.02 0.09 0.006

Совокупность информации о составе и свойствах структурируется согласно формированию документально-фактографических баз банка данных «Металлургия» [3]. При этом ключевые слова -Предприятие,

Материал- описывають документальну частину, а -Мехсвойства, Химсостав- описывають фактографічну частину.

Для вказаних марок сталей суттєве впливання на їх фізическіє свойства оказыває параметр d – характеризуючий середнестатистическое межъядерное расстояние между взаимодействующими атомами исследуемой стали (рис.1).

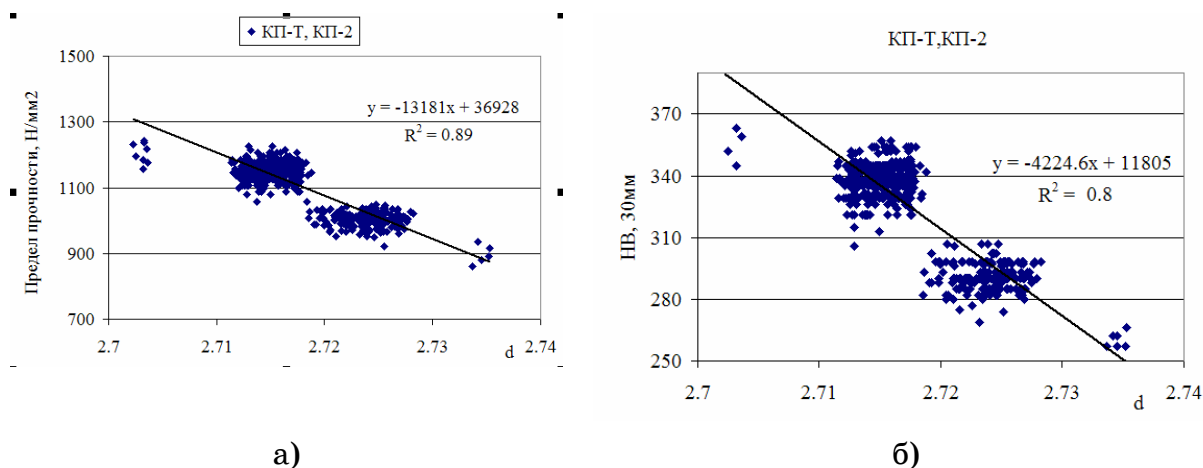


Рисунок 1. – Зависимость а – предела прочности, б – твердости от структурного параметра d

Дополнительный учет параметра Z^Y обеспечивает описательную точность прогнозных моделей на уровне $R \geq 0,9$. Использование параметров межатомного взаимодействия снижает параметричность моделей и повышает их физичность. Это позволяет исследовать влияние различных сочетаний концентраций кремния, марганца и углерода на прочностные и пластические свойства колесных сталей КП-Т и КП-2. На базе экспериментальных данных получены регрессионные уравнения, описывающие механические свойства колесных сталей ($R \geq 0,9$):

$$\sigma_B = 36911 - 13171 \times d + 11843 \times Z^Y, \quad (3)$$

$$HB, 30мм = 12046 - 4313 \times d + 5861 \times Z^Y, \quad (4)$$

$$\delta = 130,1 \times d - 203,6 \times Z^Y - 342,5, \quad (5)$$

где σ_B – предел прочности, Н/мм², δ – относительное удлинение,%, НВ, 30мм – твердость. Из рисунка 1 и моделей (3-4) следует, что для колесных сталей марок КП-Т и КП-2 с возрастанием физико-химического эквивалента Z^Y производственные свойства увеличиваются. Как следует из литературы, с повышением легирующих элементов (Si, Mn и др.), физико-химический эквивалент Z^Y возрастает, а характер зависимости $\sigma_B, HB=f(Z^Y)$ имеет четко выраженный оптимум [4]. Для уточнения диапазона изменения параметра Z^Y , обеспечивающего оптимальные прочностные свойства исследуемых сталей дополнительно использовались лабораторные экспериментальные данные с повышенным содержанием кремния и марганца (табл.1). Представленная зависимость на рисунке 2 дает нам

основание для уточнения ограничений по изменению интегрального параметра Z^Y с диапазоном [1,235-1,245(e)] для их использования в программном комплексе «Оптимизация» [2].

Изменение основных элементов осуществлялось в следующем диапазоне: углерод: 0,51-0,7%, кремний: 0,4-1,7%, марганец: 0,6-1,5%.

На рисунке 3 представлен фрагмент видеокadra работы программного комплекса «Оптимизация» с выдачей рекомендуемого состава колесной стали в заданной системе ограничений.

Таблица

Содежание основных химических элементов и механические свойства колесной стали для лабораторных экспериментальных данных

№	Содержание, %			Механические свойства		
	C	Si	Mn	σ_B , Н/мм ²	δ , %	НВ, 30мм
1	0,57	1,27	0,78	1137	10	326
2	0,59	1,26	0,75	1147	9,8	331
3	0,57	1,31	0,8	1137	9	335
4	0,58	1,33	0,79	1078	4,7	341
5	0,57	0,97	1,46	1137	7	326
6	0,59	1,36	0,78	1166	6,5	345
7	0,57	1,73	0,79	1156	7,7	331
8	0,58	1,02	1,5	989	10,7	335

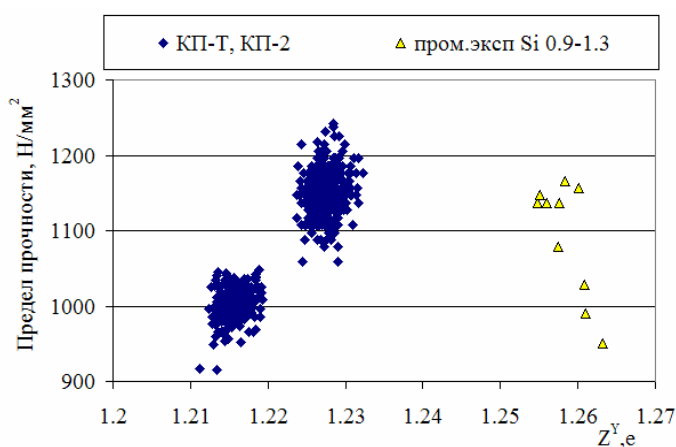


Рисунок 2. – Зависимость предела прочности от зарядового состояния Z^Y

Элементы				
Элемент	Группа	Min	Max	Рекоменд
C	общ	0.59	0.7	0.6000
Al	общ	0.01	0.03	0.0200
Si	общ	0.4	1.7	0.7591
P	общ	0.002	0.1	0.0502
S	общ	0.003	0.09	0.0464
Ti	общ	0.002	0.009	0.0055
V	общ	0.07	0.12	0.0951
Cr	общ	0.05	0.24	0.1459
Mn	общ	0.6	1.5	0.9517
Fe	общ	96.061	98.48	97.3865

Группы						
Группа	Z _{Ymin}	Z _{Ymax}	Z _Y	D _{min}	D _{max}	D
общ	1.235	1.245	1.24000	2.71	2.74	2.70999

Рисунок 3. – Кадр выходного документа решения

Выводы. Выполнена оценка поэлементного влияния основных химического состава на механические свойства колесных сталей и предложены модели для их прогнозирования. В качестве модельных параметров обоснованы физико-химические критерии, характеризующие межатомное взаимодействие в расплаве. На основе многопараметрической оптимизации обоснован рекомендуемый состав стали: углерод (0,57-0,61%); марганец (0,9-1,1%); кремний (0,7-0,9%), соответствующий ГОСТ 10791-2004.

ЛИТЕРАТУРА

1. Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Козачёк А.С., Раздобреев В.Г., Головки Л.А. Информационно – математическое обеспечение оценки Влияния химического состава на свойства готового проката. Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных работ.- Выпуск 3 (68). – Днепропетровск, 2010. – С.33-39.
2. Приходько Е.В., Тогобицька Д.М., Козачок О.С. Інформаційно-аналітична система стабілізації властивостей прокату // Металознавство та обробка металів. – Киев. – 2011. -№1. – С.39-43.
3. Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н. Методология создания базы знаний о свойствах сталей и сплавов. //Металлопроизводство и обработка металлов. – Киев. – 1996. – №3. – с. 50-55.
4. Приходько Э.В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов. – Киев: Наукова думка. – 1995. – 292 с.