

УДК 621.771

Соколов Д. Ф.  
Васильев А. А.  
Колбасников Н. Г.  
Соколов С. Ф.

## РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗМЕРА ЗЕРНА ФЕРРИТА С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ ТОЧНОСТИ МОДЕЛИ ГОРЯЧЕЙ ПРОКАТКИ

Размер зерна феррита является одним из наиболее важных микроструктурных параметров, определяющих прочностные характеристики феррито-перлитных сталей. Поэтому значительное внимание уделяется разработке количественных моделей для предсказания этого размера в зависимости от химического состава стали, размера зерна аустенита и скорости его охлаждения в процессе распада. В работах [1–4] расчет размера зерна феррита выполняется с использованием эмпирической модели, связывающей величину этого параметра с температурой старта ферритного превращения. Температура старта, в свою очередь, предсказывается с использованием другой эмпирической модели («модель зарождения и раннего роста феррита»), параметрами которой являются химический состав, размер зерна аустенита и скорость охлаждения. Следует отметить, что в указанных работах эмпирические параметры моделей были определены для конкретных сталей (базовые марки), что делает их применимыми только для сталей с близкими составами. Модели для расчета размера зерна и температуры старта феррита [1–4] входят в набор микроструктурных моделей одной из хорошо известных интегральных моделей горячей прокатки (HSMM) [2]. Отмеченные ограничения моделей, используемых при расчетах размера зерна феррита, значительно снижают точность HSMM в случае ее применения для предсказания механических свойств сталей, существенно отличающихся по химическому составу от сталей базовых марок.

Целью работы является повышение точности моделей горячей прокатки HSMM в случае их применения для предсказания механических свойств сталей.

В связи с изложенным в настоящей работе на основании подхода, сформулированного ранее [1–4], предложены новые эмпирические модели, которые позволяют проводить вычисления температуры старта и размера зерна феррита для сталей с широко варьируемым химическим составом (прежде всего по содержанию углерода и марганца). Калибровка моделей выполнена с использованием обширной базы экспериментальных данных для сталей различного состава. Разработанные модели интегрированы в программную среду HSMM, что позволило значительно повысить точность ее предсказаний для большой группы марок низколегированных сталей.

Модель для расчёта температуры старта ферритного превращения. Аналогично работам [1–4], будем считать, что зарождение зёрен феррита по границам аустенитных зерен заканчивается при температуре  $T_s$  (температура старта ферритного превращения), за которую примем температуру, соответствующую распаду 5 % аустенита. Для скорости роста сферических зерен феррита на ранней стадии превращения можно записать:

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = D_C \frac{c_\gamma - c_0}{c_\gamma - c_\alpha} \frac{1}{R_\alpha}, \quad (1)$$

где  $R_\alpha$  – радиус зерна феррита;

$D_C$  – коэффициент объемной диффузии углерода в аустените;

$c_0$  – средняя концентрация углерода в аустените;

$c_\gamma; c_\alpha$  – соответственно, равновесные концентрации углерода (масс. %) в аустените и феррите, которые будем вычислять при условии паравравновесия этих фаз;

$t$  – время.

В рассматриваемой модели предполагается, что зарождение зёрен феррита происходит к моменту достижения некоторой температуры  $T_N$  (температура зарождения), которая, естественно, находится ниже температуры термодинамического равновесия рассматриваемых фаз ( $A_3$ ). В соответствии с подходом, предложенным в [1–4], температура  $T_S$  может быть определена с использованием следующего уравнения:

$$R_\alpha(T_S) = \frac{d_\gamma^{eff} (c^* - c_0)}{\sqrt{2} (c_\gamma - c_\alpha)}, \quad (2)$$

где  $d_\gamma^{eff}$  – эффективный размер зерна аустенита, связанный с его действительным размером  $d_\gamma$  соотношением:  $d_\gamma^{eff} = d_\gamma \exp(-\varepsilon_r)$ ;

$\varepsilon_r$  – остаточная деформация аустенита;

$c^*$  – критическая средняя концентрация углерода в аустените, достижение которой, согласно используемым предположениям, соответствует его 5 % распаду.

Уравнение (2) записывается, исходя из условия, что вся поверхность зерен аустенита покрывается слоем растущего феррита при непрерывном охлаждении материала от температуры  $T_N$ .

Для расчёта критической концентрации и температуры  $T_N$  в работах [1–2] используются соотношения, установленные отдельно для каждой марки стали. Например, для сталей A36 (0,17C; 0,74Mn) и DQSK (0,038C; 0,3Mn) эти соотношения имеют вид:

$$\begin{aligned} \text{A36:} \quad c^* &= c_0 \left[ 1,08 + \frac{1,7}{d_\gamma} + 0,2 \exp(-0,02(T_N - T)) \right]; \quad T_N = 764^\circ \text{C}. \\ \text{DQSK:} \quad c^* &= c_0 \left[ 1,15 + \frac{9,1}{d_\gamma} + 0,15 \exp(-0,0003(T_N - T)^{2,2}) \right]; \quad T_N = 843^\circ \text{C}. \end{aligned} \quad (3)$$

На первом этапе разработки обобщенных уравнений для расчета параметров модели  $c^*$  и  $T_N$  эти уравнения были найдены с использованием экспериментальных данных для двух отмеченных выше сталей (A36 и DQSK) [5]. В модифицированной модели расчета температуры старта [5] вычисление коэффициента диффузии углерода проводилось с учетом влияния содержания легирующих элементов замещения с использованием формул, полученных в работе [6]. Получены следующие формулы для вычисления  $c^*$  и  $T_N$ :

$$\begin{aligned} c^* &= \left( 1,107 + \frac{0,497}{d_\gamma^{eff}} + 0,66 \times \exp[-0,02 \times (T_N - T)] \right) \times c_0; \\ T_N &= 0,00715 (A_3^{PE})^2 - 10,79339 A_3^{PE} + 4801,3 (^\circ \text{C}), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $A_3^{PE}$  – температура термодинамического паравравновесия между ферритом и аустенитом, вычисляемая с помощью программы Thermo-Calc.

Применение описанного способа расчета обсуждаемых параметров модели показало, что формулы (3) не обеспечивают требуемой точности для сталей с более сложным химическим составом. В связи с этим на втором этапе разработки обобщенной модели опорная база экспериментальных данных была значительно расширена. Для этой цели были использованы

литературные данные для 13 сталей различного химического состава [1, 3, 4, 7–10]. Содержание углерода в данных сталях варьировалось от 0,04 до 0,5 %, а основных легирующих элементов замещения (Mn, Si) – от 0 до 1,5 %.

В разработанной обобщенной версии модели для расчёта температуры старта ферритного превращения интегрирование уравнения роста зерна феррита (2) проводится, начиная не с некоторой температуры  $T_N$ , а с температуры  $A_3^{PE}$ . Такой подход представляется физически обоснованным и позволяет сократить число эмпирических параметров модели, поскольку в этом случае нет необходимости иметь формулу для вычисления температуры  $T_N$ . Для расчёта критической концентрации углерода в аустените была найдена новая формула, параметры которой определены в результате решения соответствующей задачи оптимизации с использованием расширенной базы экспериментальных данных:

$$c^* = c_\gamma \left( 1 - \left( 1 - (d_\gamma^{eff})^{-0,89} \right) \left[ 1 - \exp(-0,01645 k_T) \times (A_3^{PE} - T)^{1,217} \right] \right), \quad (4)$$

$$k_T = 1 - 0,744 w_C^{0,182} - 0,208 w_{Mn}^{0,34},$$

где  $w_C$ ;  $w_{Mn}$  – концентрации углерода и марганца в стали (масс. %).

Как видно из рис. 1, разработанная модель позволяет с хорошей точностью предсказывать температуру старта ферритного превращения для всех 13 марок сталей при достаточно широких диапазонах изменения скоростей охлаждения и размеров зерна аустенита.

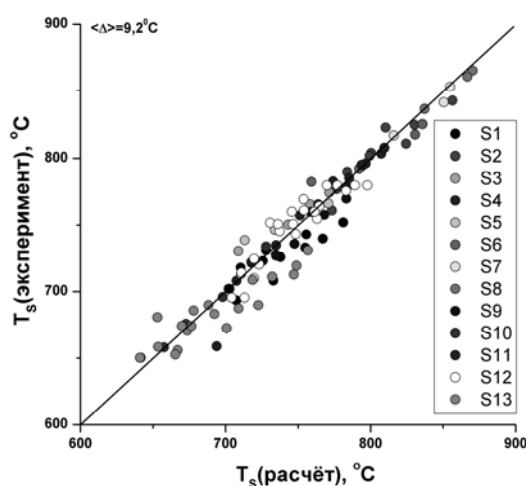


Рис. 1. Сравнение результатов расчёта температуры старта ферритного превращения с данными эксперимента ( $\Delta$  – средняя абсолютная ошибка расчета)

Модель для расчёта размера зерна феррита. В работах [2–4] для расчета размера зерна феррита,  $d_\alpha$ , предлагается набор формул, эмпирические параметры которых подбирались для каждой из исследованных сталей. Например, для сталей A36 и DQSK эти формулы имеют вид:

$$\begin{aligned} \text{A36:} \quad d_\alpha &= \left\{ F_\alpha \exp\left(52,3 d_\gamma^{0,029} - 51000/T_s\right) \right\}^{1/3}, \\ \text{DQSK:} \quad d_\alpha &= \left\{ F_\alpha \exp\left(50,7 d_\gamma^{0,024} - 51000/T_s\right) \right\}^{1/3}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $F_\alpha$  – объемная доля феррита в конечной структуре.

При построении обобщенной модели для предсказания размера зерна феррита на основании известной температуры старта ферритного превращения был использован набор литературных и собственных экспериментальных данных для сталей, химические составы которых представлены в табл. 1.

Таблица 1

Химические составы сталей, данные для которых использованы при калибровке модели расчёта размера зерна феррита

Сталь	Химический состав, масс. %									Источник
	C	Mn	Si	Ni	Cr	Cu	Al	N	Nb	
S1 (A36)	0,170	0,74	0,012	0,01	0,019	0,016	0,04	0,0047	0	[1]
S2 (DQSK)	0,038	0,3	0,009	0,025	0,033	0,015	0,04	0,0052	0	[2]
S3	0,084	0,58	0,02	0,072	0,032	0,097	0,03	0,0038	0	
S4	0,18	0,74	0,2	0,07	0,03	0,19	0	0,0054	0	
S5	0,07	0,76	0,014	0	0	0	0,053	0,0067	0,023	
S6	0,08	0,48	0,045	0	0	0	0,024	0,054	0,036	

В результате решения соответствующей оптимизационной задачи была получена следующая обобщенная формула для размера зерна феррита:

$$d_{\alpha} = F_{\alpha}^{1/3} \exp\left(13,5(d_{\gamma})^{0,042}\right) \exp\left(-\frac{Q_N}{RT_S}\right), \quad (6)$$

$$Q_N = 144500 - 41600w_C^{0,104},$$

где  $Q_N$  – эффективная энергия активации процесса зарождения зерен феррита.

Из рис. 2 видно, что полученная формула позволяет достичь хорошего согласия с экспериментальными данными в широком диапазоне изменения размера зерна феррита (скоростей охлаждения и размеров аустенитного зерна).

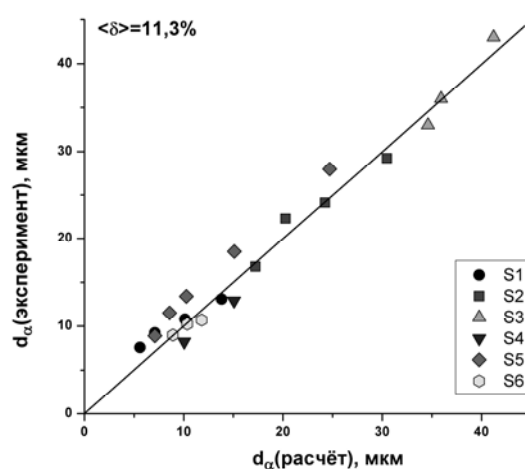


Рис. 2. Сравнение результатов расчёта размера зерна феррита с данными эксперимента ( $\langle \delta \rangle$  – средняя величина абсолютного значения относительной погрешности)

Интегрирование полученных математических моделей в компьютерную программу HSMM. Структура компьютерной программы HSMM допускает замену исходных программных модулей для набора моделей эволюции микроструктуры. Это позволяет включать уточненные модели отдельных процессов в программную среду HSMM для получения более совершенной интегральной модели с расширенными возможностями прогнозирования. Полученные математические модели расчёта температуры старта ферритного превращения и размера зерна феррита были интегрированы в компьютерную программу HSMM, что позволило существенно повысить точность расчёта конечных механических свойств. На рис. 3 представлены результаты сравнения данных расчёта предела прочности по исходной и модернизированной версиям HSMM для 9 марок сталей, прокатываемых на 2000 ОАО «Северсталь» по различным температурно-деформационным режимам.

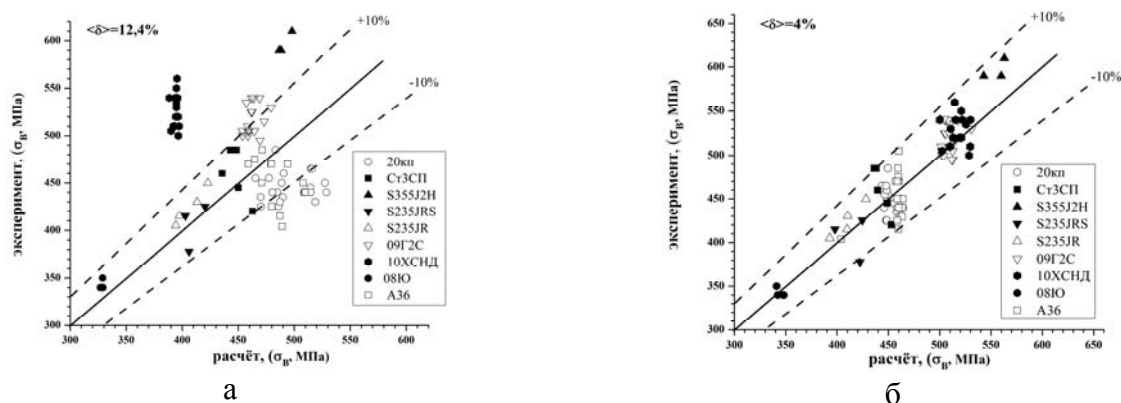


Рис. 3. Результаты расчёта предела прочности с использованием исходной (а) и модернизированной (б) версий HSM

### ВЫВОДЫ

В результате проведенной работы были созданы эмпирические модели для расчёта температуры старта ферритного превращения и размера зерна феррита для сталей с широко варьируемым химическим составом. Полученные модели были интегрированы в программную среду HSM, что позволило существенно повысить точность расчёта механических свойств горячекатаных сталей с феррито-перлитной структурой.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Militzer M. Ferrite Nucleation and Growth During Continuous Cooling / M. Militzer, R. Pandi, E. B. Howbolt // *Metall. Mater. Trans. A.* – 1996. – 27A. – P. 1547–1557.
2. Militzer M. Microstructure Model for Hot Strip Rolling of HSLA Steels / M. Militzer, E. B. Howbolt, T. R. Meadowcroft // *Metall. Mater. Trans. A.* – 200. – 32A. – P. 1247–1259.
3. Microstructure Evolution Model for Hot Rolling of a Mo–TRIP Steel / D. Liu, F. Fazeli, M. Militzer, W. J. Poole // *Metall. Mater. Trans. A.* – 2007. – 38 A. – P. 894–910.
4. Liu D. Modelling of Microstructure Evolution during Hot Strip Rolling of Dual Phase Steels / D. Liu, F. Fazeli, M. Militzer // *ISIJ International.* – 2007. – 47. – P. 1789–1798.
5. Васильев А. А. Моделирование микроструктуры и механических свойств стального листа после прокатки на стане 2000 ОАО «Северсталь» / А. А. Васильев, Н. Г. Колбасников, Д. Ф. Соколов [и др.] // *Вопросы материаловедения* – 2010. – № 3 (63). – С. 121–131.
6. Vasilyev A. Carbon Diffusion Coefficient in Complexly Alloyed Austenite / A. Vasilyev // *Proc. MS&T'2007.* – Detroit, 2007. – P. 537–551.
7. Mecozzi M. G. Analysis of  $\gamma \rightarrow \alpha$  transformation in a Nb micro-alloyed C-Mn steel by phase field modeling / M. G. Mecozzi, J. Sietsma, S. Zwaag // *Acta Materialia.* – 2006. – 54. – P. 1431–1440.
8. Kop T. A. Modelling the Austenite to Ferrite Phase Transformation in Low-Carbon Steels in Terms of the Interface Mobility / T. A. Kop, Y. Leeuwen, J. Sietsma, S. Zwaag // *ISIJ International.* – 2000. – № 40,7. – P. 713–718.
9. Sun C. G. A Finite Element Model for the Prediction of Thermal and Metallurgical Behaviour of Strip on Run-out-table in Hot Rolling / C. G. Sun, H. N. Han, L. K. Lee, Y. S. Jin [and other] // *ISIJ International.* – 2002. – № 42,4. – P. 392–400.
10. Sato Y. Computer Simulation of Microstructural Evolution in Thermo-mechanical Processing of Steel Plates / Y. Sato, C. Shiga // *ISIJ International.* – 1992. – № 32 (3). – P. 414–422.

Соколов Д. Ф. – аспирант СПбГПУ;

Васильев А. А. – доц. СПбГПУ;

Колбасников Н. Г. – д-р техн. наук, проф. СПбГПУ;

Соколов С. Ф. – аспирант СПбГПУ.

СПбГПУ – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, г. Санкт-Петербург, Россия.

E-mail: sklv.d.f@gmail.com