

519.711.3:621.785.05

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ  
В УГЛЕРОДИСТЫХ СТАЛЯХ****А.В. ЛЕМЗИКОВ, Д.Г. ИВАНОВ***(Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск);**д-р техн. наук, проф. Н.В. ЗИМИН**(Всероссийский научно-исследовательский институт токов высокой частоты**им. В.П. Вологодина, Санкт-Петербург, Россия);**д-р техн. наук, проф. С.П. КУНДАС**(Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, Минск)*

*Представлена разработанная с применением нейронных сетей гибридная модель для прогнозирования структурных превращений в углеродистых сталях, позволяющая оценить типы образующихся структур и их твердость в зависимости от температурной истории охлаждения. Проведена экспериментальная верификация разработанной модели, в рамках которой применялся алгоритм решения обратной задачи теплопроводности для поиска температурной зависимости коэффициента теплообмена по известным экспериментальным кривым охлаждения. Установлено, что разработанная гибридная модель структурных превращений при термообработке стальных деталей в сравнении с аналогичными аналитическими моделями обладает преимуществами. В то же время в сравнении с аналитическими методами предложенная модель не позволяет оценивать динамику образования фаз в процессе охлаждения, учесть влияние структурных превращений на изменение теплофизических свойств и, как следствие, на температурную историю.*

**Введение.** Цель закалки как технологического процесса термической обработки – формирование в стальных деталях требуемых эксплуатационных характеристик, в частности твердости. Как известно [1], механические свойства стали при закалке изменяются вследствие распада переохлажденного аустенита на различные закалочные структуры – мартенситные и промежуточные (троостит, бейнит, сорбит и пр.). При этом вид структуры, полученной при закалке, для различных сталей определяется следующими факторами [2]:

- температурой нагрева;
- нагреваемой областью детали (поверхность, нагрев на определенную глубину, сквозной нагрев);
- скоростью нагрева;
- составом и исходной структурой стали (содержание углерода, естественных и легирующих добавок, размер зерен);
- теплофизическими свойствами стали (теплопроводность);
- интенсивностью теплоотвода, определяемой коэффициентом теплообмена с охлаждающей средой и расстоянием исследуемой области от поверхности, с которой производится теплоотдача.

Для достижения требуемых характеристик при закалке необходимо иметь информацию как о качественном, так и о количественном влиянии указанных факторов на вид образующихся структур и их твердость. Эта информация может быть получена путем проведения ряда экспериментов, исследующих выбранную сталь на закаливаемость и прокаливаемость в зависимости от способа охлаждения. В то же время по экономическим соображениям эффективнее использовать методы компьютерного моделирования [3], позволяющие анализировать процессы структурных превращений в сталях с учетом геометрических особенностей деталей, способов нагрева, типов охлаждающих сред и т.п.

В настоящее время наибольшее распространение получили математические модели процессов структурных превращений, основанные на применении различного рода экспериментальных диаграмм распада переохлажденного аустенита [4]. Однако стоит отметить, что для углеродистых сталей существуют экспериментальные данные [2, 5], позволяющие определить вид образующихся микроструктур после закалки без применения изотермических или термокинетических диаграмм.

**Аналитические модели структурных превращений**

Аналитические модели, описывающие структурные превращения, базируются на двух подходах, которые определяются особенностями математического описания:

- 1) использование экспериментальных диаграмм (изотермические (ИТД) и термокинетические (ТКД) диаграммы) и характерных точек структурных превращений (температура начала мартенситного пре-

вращения и т.п.), а также вспомогательных методов, позволяющих применять эти данные к практическим расчетам, к которым можно отнести, например, принцип аддитивности Шейля [6, 7] для использования ИТД, уравнение Аврама [8], уравнение Койстинена – Марбургера [9] для описания мартенситного превращения и т.п.;

2) использование аппарата термодинамики и кинетики для моделирования зарождения и роста структурных составляющих стали в изотермических или непрерывных условиях. Такой подход обладает большими потенциальными возможностями в прогнозировании формирования структуры без проведения натуральных экспериментов при условии достаточности термодинамических баз данных и совершенстве теорий, описывающих микромир стали. Он нашел широкое применение в задачах разработки новых сталей с заданными свойствами. В настоящее время математические модели этого уровня стремительно развиваются, однако их применение для описания превращений на макроуровне сопряжено со значительными вычислительными сложностями из-за различия в пространственных масштабах задач. С помощью указанных методов возможно вычисление ИТД и ТКД без проведения натуральных экспериментов, либо построения недостающих для расчета данных на экспериментальных диаграммах.

В настоящее время наибольшее распространение получил первый подход [10 – 18], для которого характерны следующие преимущества:

1) расчет может быть осуществлен для любой стали, если для нее предварительно построена экспериментальная диаграмма;

2) результаты расчета по экспериментальным диаграммам хорошо согласуются с экспериментом при условии, что правильно рассчитаны температурные кривые.

К недостаткам этого метода относят:

1) использование одних лишь экспериментальных диаграмм не дает возможности оценить дисперсность получаемых структур, которая в значительной мере определяет эксплуатационные свойства стальной детали;

2) применение экспериментально построенных ИТД и принципа аддитивности Шейля для процессов с непрерывным изменением температуры может приводить к погрешностям при расчете структурных составляющих, например, перлита [19 – 21] (это обстоятельство требует модификации метода с целью минимизации погрешности) и его усложнению;

3) на справочных диаграммах во многих случаях отсутствует необходимая информация, такая как предельные доли структурных составляющих и т.п.

#### **Гибридная модель структурных превращений в углеродистых сталях**

Как уже упоминалось, в работе [5] приведены результаты обобщения совокупности экспериментов, направленных на определение количественного влияния скоростей охлаждения в верхнем (700...500 °С) и нижнем (300...200 °С) интервалах температур на тип образующихся структур и их твердость для углеродистых сталей. В результате были получены зависимости для мартенсита различной степени дисперсности (рис. 1, а, б) и промежуточных структур (рис. 1, в, г), позволяющие определить диапазон скоростей охлаждения, допускающий образование требуемых структур, а также их твердость.

В работе [2] указаны следующие условия образования мартенситных и полумартенситных структур:

- образование *бесструктурного мартенсита* (кривая 1 на рис. 1, б) максимальной твердости возможно только при скоростях нагрева (в диапазоне температур от Ас1 до температуры гомогенизации) выше 100 °С/с и скоростях охлаждения выше критических в обоих интервалах температур (выше кривых 1 и 3, рис. 1, а);

- *мелкоигольчатый мартенсит* (кривая 2, рис. 1, б) образуется при нагреве со скоростями от 10 до 100 °С/с и охлаждении со скоростями, равными критическим;

- *среднеигольчатый мартенсит* (кривая 3, рис. 1, б) образуется при скоростях нагрева 1...10 °С/с и при охлаждении со скоростями, чуть меньшими значений кривых 1 и 3 (см. рис. 1, а);

- мартенсит, частично распавшийся в процессе образования (*«отпущенный» мартенсит* – кривая 4, рис. 1, б) возникает после нагрева со скоростями 0,1...1 °С/с и последующего охлаждения со скоростями, лежащими между кривыми 1, 2 и 3, 4 (см. рис. 1, а);

- *грубоигольчатый мартенсит* (кривая 5, рис. 1, б) образуется при скоростях охлаждения, близких к кривым 2 и 4 (см. рис. 1, а);

- *мартенсит с примесью троостита* (кривая 6, рис. 1, б) образуется, если охлаждение происходило со скоростями, меньшими критических (ниже кривых 2 и 4, рис. 1, а).

Твердость указанных структур можно определить, пользуясь кривыми на рисунке 1, б для соответствующих областей.

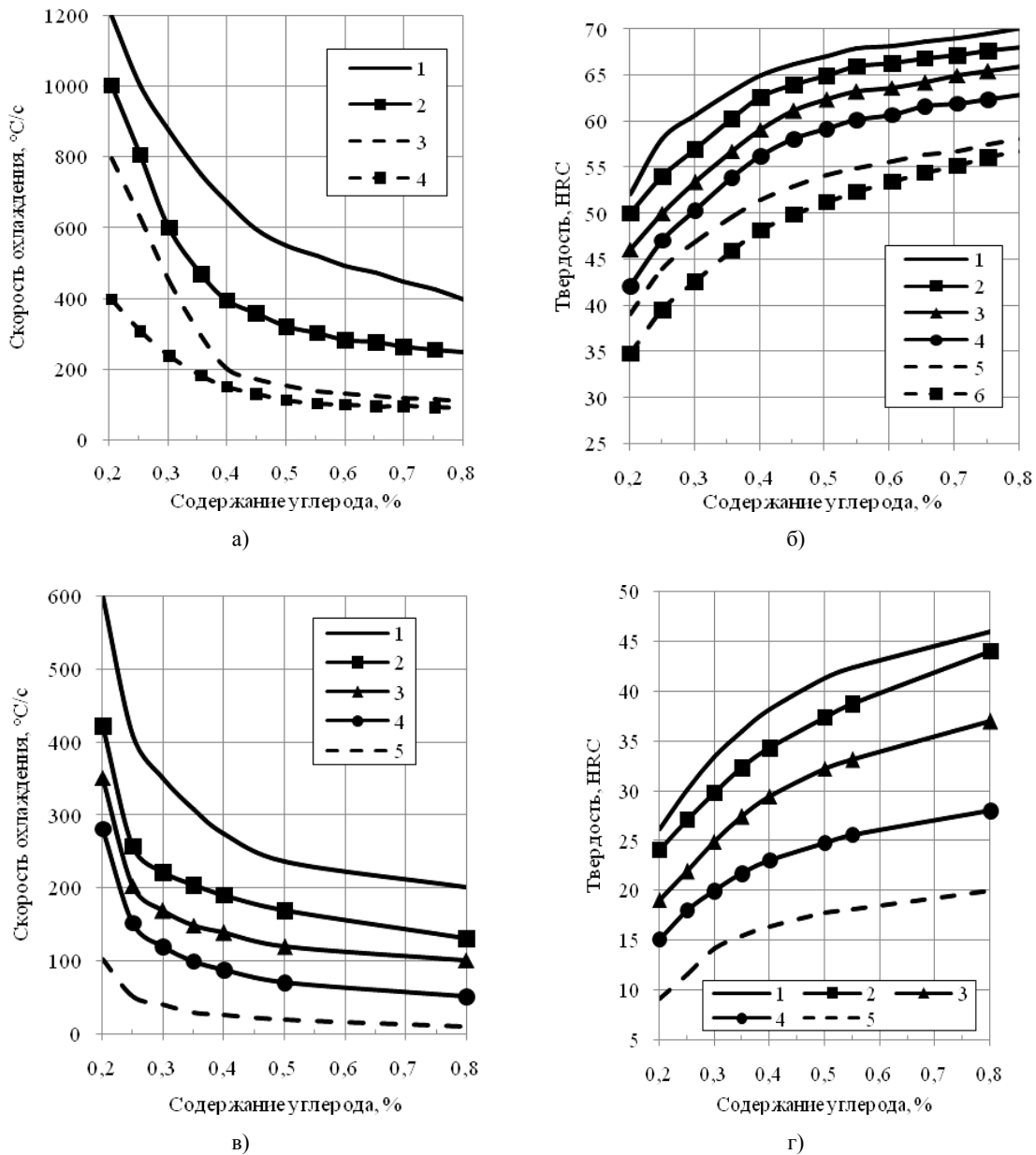


Рис. 1. Диаграммы для определения диапазонов скоростей охлаждения, позволяющих получить различные микроструктуры, а также твердости этих микроструктур в зависимости от содержания углерода в стали (пояснения даны в тексте)

В случае если скорость охлаждения в верхнем температурном интервале оказывается значительно меньше критической, мартенсит не образуется, и в результате закалки наблюдаются следующие промежуточные структуры:

- *троостит с незначительным содержанием мартенсита* образуется при скоростях охлаждения в верхнем температурном диапазоне, лежащих между кривыми 1 и 2 (см. рис. 1, в);
- *троостит, в том числе со следами сорбита*, образуется при скоростях охлаждения, лежащих между кривыми 2 и 3 на рисунке 1, в;
- *сорбит* образуется при скоростях охлаждения, лежащих между кривыми 3 и 4 на рисунке 1, в;
- *феррито-перлитные структуры* образуются при скоростях охлаждения, лежащих между кривыми 4 и 5 на рисунке 1, в.

Таким образом, с помощью указанных диаграмм для углеродистых низколегированных сталей существует возможность определить тип образующейся микроструктуры и ее твердость в произвольной точке закаливаемой детали на основании информации о скорости охлаждения в этой точке.

Анализ приведенных правил образования структурных составляющих стали позволил разработать алгоритм вычисления вида структуры и ее твердости, схема которого приведена на рисунке 2.

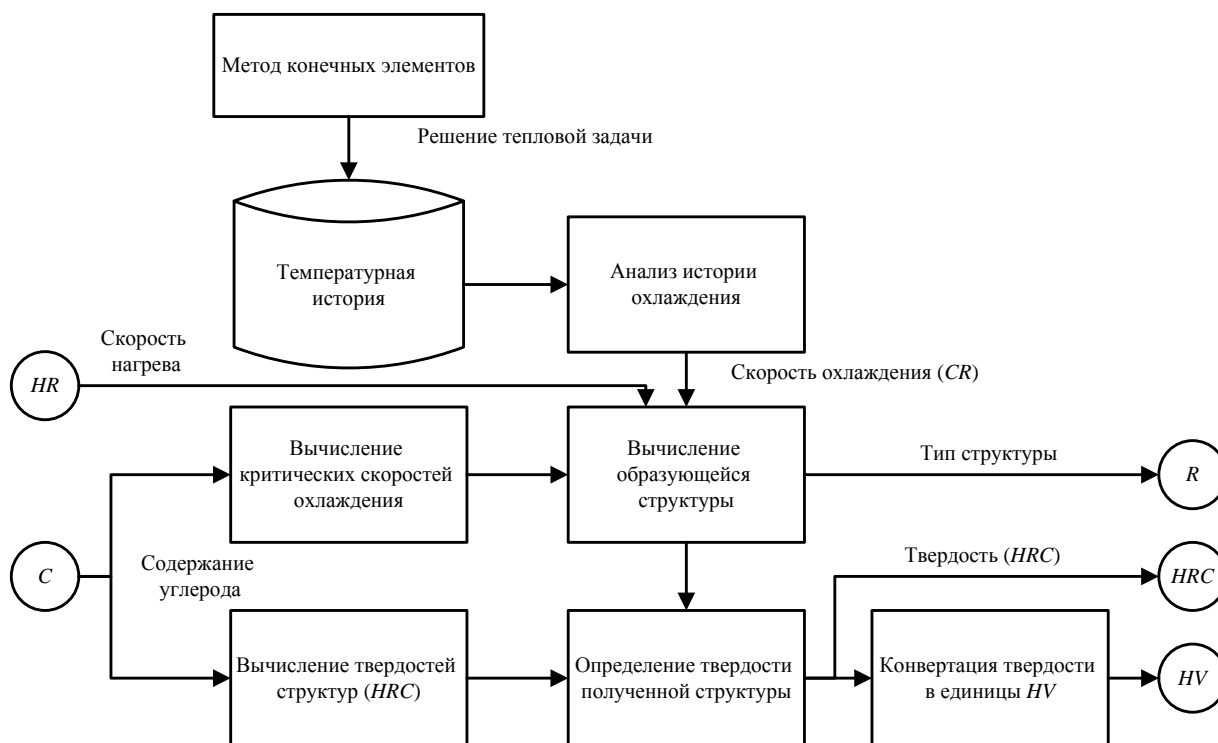


Рис. 2. Схема работы алгоритма определения вида и твердости структурных составляющих стали

Предложенный алгоритм основан на использовании предварительно полученных результатов решения тепловой задачи для выбранной геометрии и условий охлаждения произвольным методом (например, методом конечных элементов).

Можно выделить следующие этапы работы алгоритма:

1) для каждого узла модели на основании температурной истории определяются моменты времени, когда температура составляла 700, 500, 300 и 200 °С, после чего вычисляются скорости изменения температуры ( $CR$ ) в диапазонах 700...500 и 300...200 °С;

2) для заданного содержания углерода в стали вычисляются значения критических скоростей охлаждения для всех структур, соответствующие значениям на кривых, показанных на рисунках 1, а, в. При этом каждой структуре соответствует порядковый номер (от 1 – для бесструктурного мартенсита, до 10 – для феррито-перлитных структур);

3) для скорости охлаждения  $CR$ , рассчитанной в п. 1, вычисляется тип соответствующей структуры ( $R$ ) путем определения критических скоростей (из значений, полученных в п. 2), между которыми попадает значение  $CR$ . При этом делается предположение, что структуры переходят друг в друга по линейному закону (т.е. структура, образовавшаяся со скоростью, лежащей посередине между двумя критическими скоростями, будет обладать твердостью, равной среднему арифметическому значений твердости соответствующих «чистых» структур);

4) полученное значение, определяющее тип образующейся микроструктуры, используется для вычисления твердости по диаграммам, показанным на рисунках 1, б, г. Значения твердости «чистых» структур определяются в зависимости от содержания углерода, после чего производится линейная интерполяция согласно значению  $R$ , определенному ранее. В случае необходимости осуществляется перевод значений твердости из единиц шкалы Роквелла в единицы шкалы Виккерса.

Значительный интерес в предложенном алгоритме представляют собой методы хранения и обработки информации, содержащейся в диаграммах, приведенных на рисунке 1.

В общем случае для применения указанных диаграмм в рамках разработанной модели могут быть использованы алгоритмы регрессионного анализа, методы хранения табличных значений с последующей интерполяцией и т.п.

Авторами предложен подход, основанный на применении набора искусственных нейронных сетей, обученных для прогнозирования критических скоростей охлаждения и твердости микроструктур в зависимости от содержания углерода в стали.

Можно выделить следующие достоинства предложенного подхода:

- высокая точность прогнозирования нейронных сетей, вследствие относительно простых зависимостей исследуемых характеристик от содержания углерода;
- высокое быстродействие по сравнению с табличными способами хранения данных;
- встроенная возможность интерполяции значений, лежащих между исходными данными.

В рамках рассматриваемой модели были разработаны и обучены три отдельные нейронные сети.

Нейронная сеть для прогнозирования критических скоростей охлаждения в качестве входного значения принимает процентное содержание углерода в стали. Сеть содержит один скрытый слой с четырьмя нейронами. На выходе сети выдаются 11 значений критических скоростей охлаждения, образующих 10 областей для соответствующих структурных составляющих стали.

Нейронная сеть для прогнозирования твердости микроструктур также в качестве входного значения принимает количество углерода в стали. Скрытый слой состоит из 12 нейронов. Выходной вектор содержит 11 значений твердости для соответствующих типов микроструктур.

Третья нейронная сеть предназначена для аппроксимации зависимости, показанной на рисунке 3.

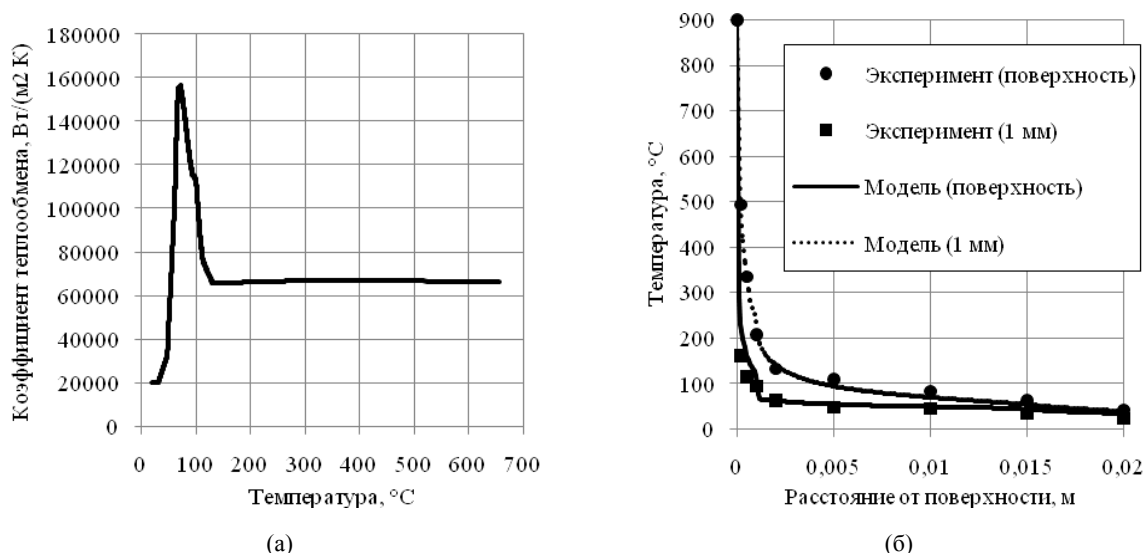


Рис. 3. Результат работы алгоритма (а) и сравнение расчетных температур с экспериментальными (б)

Применение нейронной сети в данном случае обусловлено простотой ее использования, быстродействием и отсутствием необходимости реализовывать дополнительные алгоритмы для интерполяции табличных данных. Сеть содержит один скрытый слой с пятью нейронами, на вход принимает десятичный логарифм скорости нагрева и возвращает значение  $R_{max}$ .

Во всех трех сетях в качестве активационной функции нейронов применялась функция гиперболический тангенс. Все входные и выходные значения при обучении были нормализованы до диапазона  $[-1; 1]$ .

Таким образом, разработана модель, позволяющая осуществлять моделирование структурных превращений в углеродистых сталях на основании температурной истории охлаждения.

В отличие от существующих разработок в этой области [3], указанная модель не требует использования изотермической или термокинетической диаграммы распада переохлажденного аустенита и в то же время позволяет определять конкретный вид образующихся мартенситных и промежуточных структур, а также их твердость.

#### Экспериментальная верификация разработанной модели

Для верификации разработанной модели было произведено сравнение результатов экспериментальных измерений с данными, полученными в ходе моделирования идентичного процесса закалки. Вид закаливаемой детали, условия процесса, тип охлаждающей среды и результаты последующих экспериментальных измерений взяты из работы [1].

Экспериментальные исследования проводились на цилиндрических деталях диаметром 40 и 80 мм и высотой 40 и 120 мм из стали 45 стандартного химического состава. Нагрев цилиндров до температуры 900 °С осуществлялся индукционным методом с частотой 2500 Гц, потребляемая мощность при этом составляла 200...500 кВт, длительность нагрева – 5...8 с. Согласно [1] скорость нагрева в области структурных превращений при указанных характеристиках составляла 100...150 °С/с. Охлаждение производилось водяным душем с расходом воды 0,8 м<sup>3</sup>/с·м<sup>2</sup> с боковых поверхностей цилиндров, торцевые поверхности при этом теплоизолировались. Температура нагрева и охлаждения различных участков измерялась термопарами диаметром 2 мм, приваренными к торцам цилиндров конденсаторной сваркой, и фиксировалась лучевым осциллографом. Структура закаленного слоя анализировалась с помощью металлографического анализа, измерялась твердость по Виккерсу.

Для получения адекватных результатов моделирования необходимо, чтобы модель максимально соответствовала реальным деталям. При моделировании температурных полей это требование затрагивает геометрические характеристики детали, свойства материала и параметры теплообмена со средой. Для решения поставленной задачи были созданы осесимметричные модели цилиндров с радиусами 20 и 40 мм. Свойства материала (сталь Ck45, аналог стали 45 с близким химическим составом) приведены в таблице.

Температурные зависимости теплофизических свойств стали Ck45

Свойство материала		Значения температурных зависимостей	
Теплопроводность, Вт/м·К	температура, °С	0	1000
	значение	50	33
Теплоемкость, Дж/кг·К	температура, °С	0	800
	значение	428	866
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	температура, °С	0	980
	значение	7846	7488

Соответствие результатов моделирования реальному физическому процессу в значительной степени определяется выбором температурной зависимости коэффициента теплообмена детали с охлаждающей средой. Значение коэффициента теплообмена (совместно со свойствами материала) непосредственно влияет на характер изменения температуры в детали и, таким образом, на скорость охлаждения различных областей и образование различных структур.

В работе [1] приведены результаты измерения температуры термопарами, размещенными на различном расстоянии от поверхности цилиндров. Авторами разработан алгоритм, позволяющий путем решения обратной задачи теплопроводности подобрать такую температурную зависимость коэффициента теплообмена, которая бы обеспечивала совпадение истории изменения температуры с экспериментальными данными.

Сущность алгоритма состоит в разбиении всего времени охлаждения на подынтервалы достаточно малой величины с целью отыскания на них таких значений коэффициента теплоотдачи, которые обеспечивают совпадение расчетных температур с экспериментальными в заданных точках. Поиск таких значений проводится с помощью ряда решений задачи теплопроводности с варьированием коэффициента теплоотдачи под управлением оптимизационного алгоритма золотого сечения [22].

Следует отметить, что с вычислительной точки зрения решение такой задачи достаточно сложно. Решение этой проблемы возможно понижением размерности задачи. В рассматриваемом случае геометрия может быть сведена к осесимметричной одномерной, что значительно упрощает процесс поиска коэффициента теплоотдачи.

Результат работы алгоритма показан на рисунке 3, а. Сравнение расчетных температур с экспериментальными на поверхности цилиндрической детали и на глубине 1 мм показано на рисунке 3, б.

Полученный таким образом коэффициент теплоотдачи может быть использован для расчета охлаждения детали с произвольной геометрией (при условии применения аналогичного способа охлаждения).

На основе приведенных выше данных было осуществлено моделирование процессов закалки двух цилиндров. Для цилиндра диаметром 40 мм длительность процесса охлаждения составляла 20 с, а для цилиндра диаметром 80 мм – 40 с. Указанные длительности выбирались таким образом, чтобы обеспечить охлаждение сердцевины цилиндра с температуры 900 °С до температуры ниже 200 °С, когда гарантированно заканчиваются процессы структурных превращений. В результате моделирования были получены распределения температур, твердости и фазового состава по радиусу цилиндров (рис. 4).

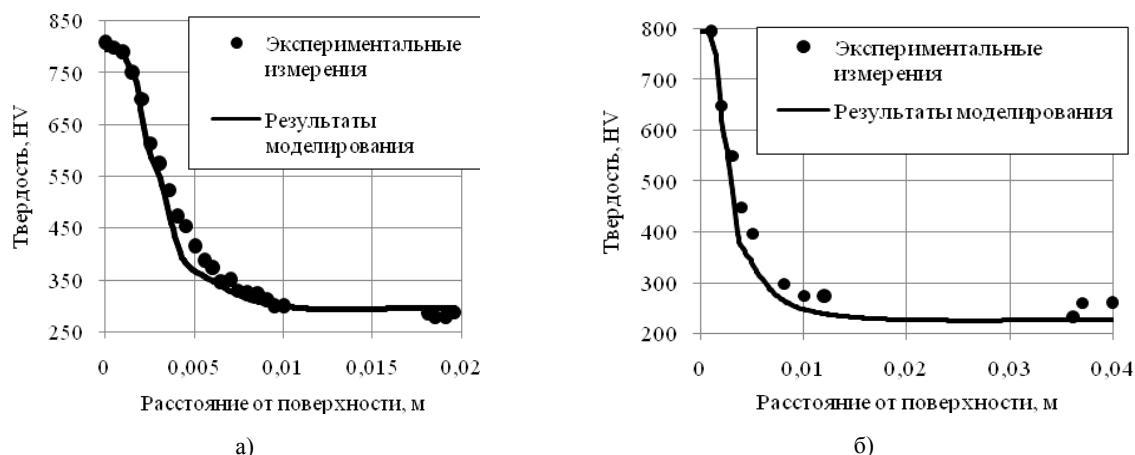


Рис. 4. Сравнение экспериментальных измерений твердости с результатами моделирования для цилиндра диаметром 40 мм (а) и 80 мм (б)

Как видно, погрешность прогнозирования твердости по сечению детали не превышает 10 %, что позволяет использовать разработанные модели для решения задач проектирования и оптимизации процессов термообработки стальных деталей в условиях производства.

**Заключение.** В результате проведенных исследований установлено, что разработанная гибридная модель структурных превращений при термообработке стальных деталей в сравнении с аналогичными аналитическими моделями обладает следующими преимуществами:

- способность прогнозирования вида и дисперсности конкретной мартенситной и промежуточной структуры;
- способность прогнозирования твердости образующихся при закалке структур с достаточной для практического использования точностью;
- высокое быстродействие по сравнению с численными методами.

В то же время в сравнении с аналитическими методами предложенная гибридная модель не позволяет оценивать динамику образования фаз в процессе охлаждения, учесть влияние структурных превращений на изменение теплофизических свойств и, как следствие, на температурную историю.

Дальнейшее повышение точности разработанной модели может быть достигнуто при совершенствовании алгоритма анализа температурной истории с целью обеспечения вычисления скоростей нагрева и, как следствие, учета неравномерности нагрева детали, а также влияния размеров аустенитного зерна на образующиеся в результате закалки структуры.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зимин, Н.В. Структура и свойства закаленного слоя при охлаждении интенсивным душем после поверхностного нагрева / Н.В. Зимин. – Л.: Политехника, 1978.
2. Зимин, Н.В. Влияние интенсификации охлаждения после различных видов нагрева на прокаливаемость и закаливаемость углеродистых нелегированных сталей / Н.В. Зимин // *Металлообработка*. – № 2(32). – СПб.: Политехника, 2006. – С. 41 – 47.
3. Кундас, С.П. Компьютерное моделирование процессов термической обработки сталей / С.П. Кундас, Т.А. Кашко. – Минск: Бестпринт, 2005. – 313 с.
4. Попова, Л.Е. Диаграммы превращения аустенита в сталях и бета-раствора в сплавах титана: справочник термиста / Л.Е. Попова, А.А. Попов. – М.: Металлургия, 1991. – 503 с.
5. Энергосберегающие технологии индукционного нагрева в металлообрабатывающей промышленности / В.Б. Демидович [и др.]; под ред. В.Б. Демидовича. – СПб.: СПбГЭТУ (ЛЭТИ), 2008. – 323 с.
6. Lusk, M. On the rule of additivity in phase transformations kinetics / M. Lusk, H.-J. Jou // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 1997. – С. 287 – 291.
7. Scheil, E. Anlaufzeit Der Austenitumwandlung / E. Scheil // *Arch. Eisenhüttenwes.* – 1935. – С. 565 – 567.
8. Avrami, M. Kinetics of phase change. I. General theory / M. Avrami // *J. Chem. Phys.* – 1939. – С. 1103 – 1112.
9. Koistinen, D.P. A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels / D.P. Koistinen, R.T. Marburger // *Acta Metallurgica*. – 1959. – С. 59 – 60.

10. Fachinotti, V.D. Solid-state microstructure evolution in steel / V.D. Fachinotti, A. Cardona, A.A. Anca // VIII Congreso Argentino de Mecánica Computacional (MECOM), Buenos Aires, 2005; Mecánica Computacional. Asociación Argentina de Mecánica Computacional (AMCA). – Buenos Aires, 2005. – Vol. XXIV. – P. 901 – 914.
11. Hoernberg, D. Irreversible Phase Transitions in Steel / D. Hoernberg // Mathematical Methods in the Applied Sciences / John Wiley & Sons, Ltd. – 1997. – C. 59 – 77.
12. Sanchez-Sarmiento, G.S. Predicting Hardness Distribution after Heat Treating Processes of Steels by Finite Element Simulation Combined with the SAE Standard J406 / G.S. Sanchez-Sarmiento, J. Vega, C. Barragan // 17<sup>th</sup> ASM Heat Treating Society Conference Proceedings Including the 1st International Induction Heat Treating Symposium., Indianapolis, 1997. – Indianapolis, 1997. – C. 347 – 354.
13. Hoernberg, D. A numerical simulation of the Jominy end – quench test / D. Hoernberg // Acta mater. / Pergamon, 1996. – C. 4375 – 4385.
14. Ahlstrom, J. Modelling of heat conduction and phase transformations during sliding of railway wheels / J. Ahlstrom, B. Karlsson // Wear / Elsevier, 2002. – C. 291 – 300.
15. Reti, T. Computer simulations of steel quenching process using a multiphase transformation model / T. Reti, Z. Fried, I. Felde // Computational Materials Science. – 2001. – C. 261 – 278.
16. Miokovic, T. Prediction of phase transformations during laser surface hardening of AISI 4140 including the effects of inhomogeneous austenite formation / T. Miokovic [et al.] // Materials Science and Engineering A. / Elsevier, 2006. – C. 547– 555.
17. Reti, T. A non – linear extension of the additivity rule / T. Reti, I. Felde // Computational Materials Science., 1999. – C. 466 – 482.
18. Durban, C. Determination of Austenitic Transformation During Fast Heat Treatment / C. Durban, D. Durand, P. Chevre // Heat Treating: Proceedings of the 17<sup>th</sup> Conference, 1997. – C. 671 – 676.
19. Hawbolt, E.B. Kinetics of austenite – ferrite and austenite – pearlite transformations in a 1025 carbon steel / E.B. Hawbolt, B. Chau, J.K. Brimacombe // Metallurgical and Materials Transactions A / Springer Boston, 1985. – C. 565 – 578.
20. Hawbolt, E.B. Kinetics of austenite – pearlite transformation in eutectoid carbon steel / E.B. Hawbolt, B. Chau, J.K. Brimacombe // Metallurgical and Materials Transactions A / Springer Boston, 1983. – C. 1803 – 1815.
21. Umemoto, M. Transformation to Pearlite from Work – hardened Austenite / M. Umemoto, H. Ohtsuka, I. Tamura // Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan. – 1983. – C. 775 – 784.
22. Huiping, L. Inverse heat conduction analysis of quenching process using finite – element and optimization method / L. Huiping [и др.] // Finite Elements in Analysis and Design / Elsevier, 2006. – C. 1087 – 1096.

Поступила 26.01.2009