

УДК 621.771.2:54.06:681.3.003.12.

Э.В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая, А.С. Козачёк, В.Г. Раздобреев,
Л.А. Головко

**ИНФОРМАЦИОННО – МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НА СВОЙСТВА
ГОТОВОГО ПРОКАТА**

Аннотация. Рассматривается методика оценки влияния примесных тугоплавких компонентов, попадающих в сталь с шихтой в комплексе с легирующими элементами. Предлагается новый подход к решению поставленной задачи путем построения карт поверхностей.

Ключевые слова. Состав, свойства, прокат, интегральные параметры, карта поверхности.

Состояние вопроса

Эффективность решения стратегических задач обеспечения 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.

При анализе влияния состава сталей и сплавов на их свойства все возрастающее значение приобретает выявление роли малых концентраций легирующих, микролегирующих и примесных элементов. В число новых компонентов входят как традиционно вредные примеси, так и полезные добавки, причем отнесение компонентов к той или иной категории (полезных или вредных) может изменяться в зависимости от общего состава микродобавок и соотношения между их концентрациями. При этом в случае многокомпонентных сталей и сплавов для теории и практики наибольший интерес представляют эффекты комплексного легирования и микролегирования, заключающиеся в изменении свойств сплавов за счет взаимодействия легирующих элементов между собой и с примесями. Это изменение, как свидетельствует

© Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Козачёк А.С., Раздобреев В.Г.,
Головко Л.А., 2010

опыт, вполне может быть сопоставимо с суммой эффектов в результате парных взаимодействий легирующих элементов с основой сплава. Однако попытки численно оценить эти эффекты до сих пор не предпринимались.

В связи с этим разработка полуэмпирических описательных моделей сохраняет актуальность в прикладной теории легирования. Для создания упомянутых описательных моделей принципиальное значение имеет разработка физико-химических и термодинамических критериев, позволяющих обобщать информацию о составе многокомпонентных сплавов и снижать параметричность описательных моделей, обеспечивая требуемую их точность. Перспективными представляются методы физико-химического моделирования, суть которых заключается во вводе в связь между составом и свойствами сплавов промежуточного звена – комплекса интегральных модельных параметров, характеризующих химическое и структурное состояние исследуемого материала [1, 2].

Постановка задачи

Создание методики определения оптимального содержания в стали сортового проката дефицитных легирующих элементов (марганца, хрома, никеля, меди) в зависимости от сочетания концентраций присутствующих в стали попутных (содержащихся в шихтовых материалах) тугоплавких компонентов (титана, ванадия, ниобия и молибдена). Учет компенсирующего влияния этих микродобавок позволяет обеспечивать сохранение заданного уровня свойств за счет понижения (в пределах марочных составов) расхода дефицитных легирующих компонентов.

Метод решения задачи

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.) Применяемый нами комплексный поиск оптимального состава микролегированных конструкционных сталей базируется на двух принципиальных методических подходах.

Первый связан с решением проблемы снижения размерности задач прогнозирования на основе теории направленной химической связи [1], рассматривающий металлический расплав, как химически единую систему, и факторного анализа. Второй – с генерацией моделей оптимальной структуры. Поскольку фазовые превращения являются следствием межатомного взаимодействия в многокомпонентном расплаве на первом этапе осуществляется «свертка» химического состава через интегральные параметры зарядового (Z^Y) и структурного (d) состояний, которые рассчитываются как результат попарного взаимодействия всех его m компонент путем решения системы нелинейных $m^2 - m + 1$ уравнений:

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

где $\Delta e'_{ij}$ - количество электронов, которые берут участие в образовании 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 :

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

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

На основе факторного анализа [3] с учетом выделенных интегральных факторов и соответствующей группировки компонентов по их факторным нагрузкам (рис.1) многокомпонентная система структурируется на подсистемы:

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

б) легирующая подсистема - включает хром, никель, марганец и др;

г) примесная подсистема - включает как вредные примеси (серу, фосфор, азот), так и полезные тугоплавкие металлы, например ванадий, молибден, ниобий и титан.

При таком подходе влияние примесно-легирующей и матричной подсистемы оценивается комплексно через физико-химические критерии (химические эквиваленты).

На рисунке 1 представлен пример результатов структуризации химического состава стали 16MnCrS5, выплавляемой в условиях РУП «БМЗ».

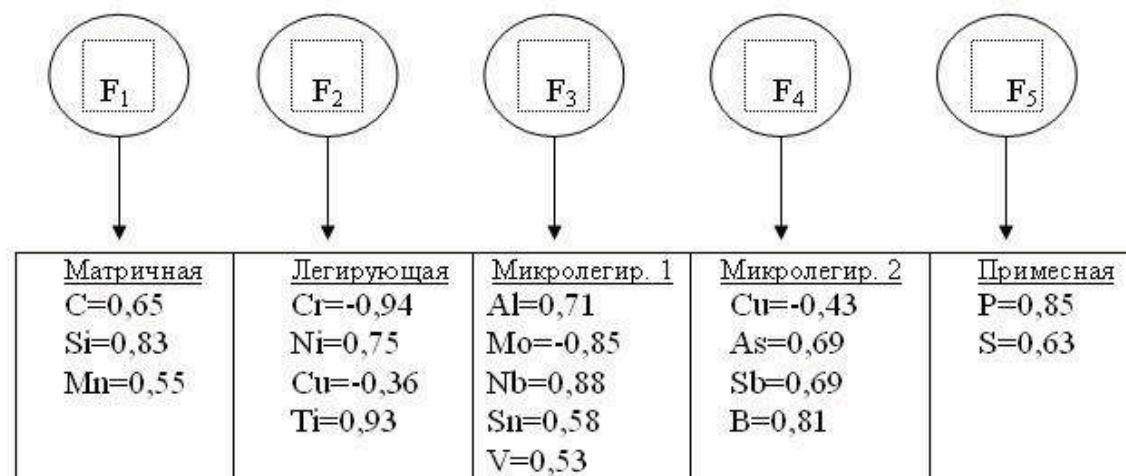


Рисунок 1 – Значения нагрузки на интегральные факторы

Поскольку задачи оптимизации химического состава многокомпонентных сталей являются многокритериальными, то методика «свертки» позволяет путем целенаправленного проецирования определить диапазоны изменения параметров

зарядового (Z^Y), структурного (d) и электрохимического ($tg\alpha$) состояния, которые обеспечивают требуемое качество стали.

Возможность обобщения информации о составе многокомпонентных сплавов в виде сочетания указанных выше интегральных модельных параметров позволяет использовать методику картирования [4,5] для определения оптимальной концентрации как отдельных компонентов состава сплавов, так и составов, обеспечивающих благоприятное для потребительских свойств металлопроката сочетание его прочностных и пластических свойств.

Построение картограмм осуществляется на основе геолитического изображения топографии аппроксимирующей поверхности, рассчитанной по методу наименьших квадратов или методу Тихонова [6]. Предложенная методика представлена в программном комплексе "POLE".

Пример реализации алгоритма построения трехмерных картограмм иллюстрирует рисунок 2. На нем представлена карта поверхности σ_T в координатах – электронный химический эквивалент микролегирующей подсистемы, включающей вносимые с шихтой в качестве попутных примесей Ti , V , Nb и Mo и легирующего компонента – Mn . Анализ показал, что дополнительное включение в состав этой группы хрома и алюминия неоправдано, т.к. не повышает точность аналитического обобщения данных о свойствах, хотя оба этих элемента являются активными карбидо- и нитридообразующими компонентами.

По сравнению с традиционными методами математического моделирования подобные картограммы имеют неоспоримое преимущество: наглядность представления сложных нелинейных зависимостей в форме, удобной для решения задач прогнозирования следствий изменения состава. В частности, при конкретном значении электронного эквивалента микролегирующей подсистемы (Z_{ml}^Y), определяемого по составу перед доводкой стали в ковше, изменением содержания марганца можно регулировать соотношение прочностных и пластических свойств (численный уровень изучаемого свойства отображается на картограмме разным цветом).

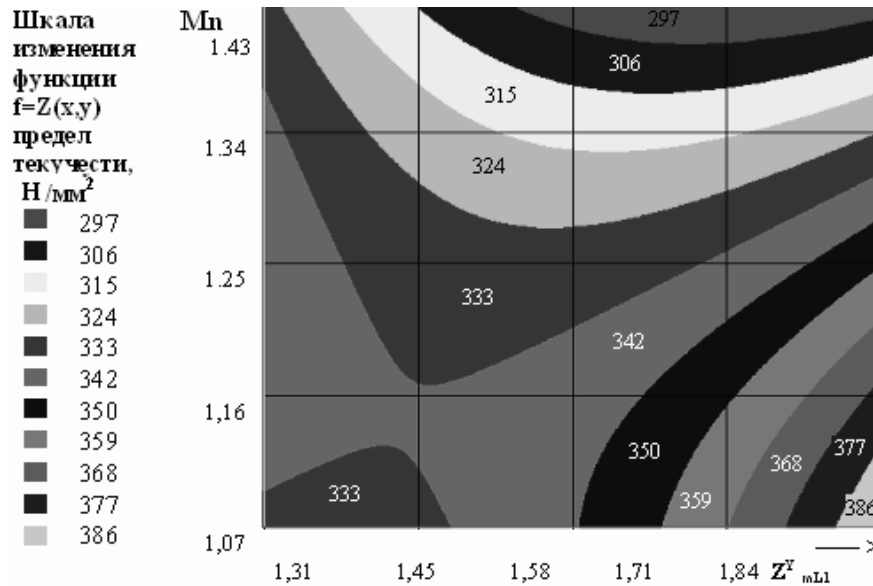


Рисунок 2 – Карта поверхности для предела текучести на массиве из 3-х сталей (16MnCrS5, S355J2, 20Г2)

Предложенный метод также предоставляет решение обратной задачи и реализован в программном модуле «Оптимизация», которая осуществляется путем оптимизации функционала при ограничениях:

$$z(x) \rightarrow \min_x \quad (3)$$

$$\begin{cases} g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, l, \\ g_i(x) = 0, i = l + 1, 2, \dots, L \end{cases} \quad (4)$$

где $z(x), g_i(x)$ - некоторые функции от входных параметров процесса x_i ($i = 1, 2, \dots, L$), например ограничения на интегральные «свертки» химического состава и соответствующих ограничений ТУ.

Результаты проведенных по такой схеме обширных расчетно-аналитических исследований показали, что наиболее актуально для практических целей использовать в качестве одной из координатных осей электронный эквивалент Z_{ml}^Y для выбранного сочетания концентраций микропримесей Ti, V, Nb и Mo , а для другой - легирующий компонент, содержание которого необходимо скорректировать. В частности, из сочетания этих параметров (рис. 2) следует, что чем больше значение параметра Z_{ml}^Y , тем целесообразней для повышения значений σ_b и σ_T снижение концентраций марганца. Для производственных условий эта рекомендация означает, что в

зависимости от сочетания микроконцентраций титана, ванадия, ниобия и молибдена в расплаве перед доводкой легирование марганцем целесообразно вести с технологией, ориентированной на нижний предел марочного состава. По такой же (как в случае с марганцем) схеме может быть уточнено влияние любого другого легирующего элемента – хрома, никеля, меди.

Вывод

Представлена методика оценки сложного нелинейного влияния примесных тугоплавких компонентов, попадающих в сталь с шихтой, на свойства сортового проката. Учет влияния «остаточных» элементов поможет найти резервные способы для повышения качества проката.

Использование предлагаемой методики позволяет определить эффективные пути снижения расхода дефицитных легирующих элементов без ухудшения качества металлопроката.

Предлагаемая методика позволит оценивать роль влияния конкретного легирующего элемента в комплексе с основным составом на свойства проката.

Реализация данного подхода предоставляет возможность решения обратной задачи по корректировке химического состава стали для требуемых механических свойств проката.

ЛИТИРАТУРА

1. Приходько Э.В. Металлохимия многокомпонентных систем. –М.: металлургия. -1995. -320 с.
2. Э.В. Приходько. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов.- Киев: Наукова думка.-1995.-292 с.
3. Иберла К. Факторный анализ. Пер. с нем. Ивановой В.М. -М.: Статистика. -1980. -399 с.
4. Тогобицкая Д.Н., Григянец Р.Б. Системное, прикладное и проблемное программное обеспечение банка данных «Металлургия»// известия АН СССР. Металлы.- 1991. - №4. – С.217-220.
5. Тогобицкая Д.Н. Система анализа и выбора рациональных режимов работы металлургических агрегатов на ЭВМ //Черная металлургия. Наука –Технология – Производство. МЧМ СССР. –М.: Металлургия .-1989.- С.384-390.
6. Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач // Доклады АН СССР. – 1963. – Т.153.- №1. – С.49-52.