

*На правах рукописи*



**Соколов Дмитрий Федорович**

**РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ РАСПАДА АУСТЕНИТА И  
ПРОГНОЗИРОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ  
КОНТРОЛИРУЕМОЙ ПРОКАТКЕ СТАЛЕЙ**

Специальности:

05.16.05 – обработка металлов давлением

05.16.01 – металловедение и термическая обработка  
металлов и сплавов

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Санкт-Петербург – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

- Научные руководители: Колбасников Николай Георгиевич  
доктор технических наук,  
профессор  
Васильев Александр Александрович  
кандидат физико-математических наук,  
доцент
- Официальные оппоненты: Титовец Юрий Федорович  
доктор физико-математических наук,  
профессор  
зав. кафедрой ФППМ СПбПУ  
Корчагин Андрей Михайлович  
кандидат технических наук,  
старший менеджер центра  
технического развития и качества  
“ОАО Северсталь”
- Ведущая организация: Южно-Уральский государственный университет

Защита состоится « 21 » февраля 2013 г. в 18 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.03 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, СПб, Политехническая, 29, главный корпус, ауд. 118.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан « 17 » января 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.229.03

кандидат технических наук



Климова Ольга Геннадьевна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Начиная с 90-х годов прошлого века всё большее значение в практике промышленного производства стали приобретают математические модели, позволяющие прогнозировать её микроструктуру и конечные механические свойства для заданных режимов обработки. Наиболее активно такие модели развиваются применительно к контролируемой горячей прокатке сталей, которая в настоящее время является важнейшей технологией производства стальных полуфабрикатов. Отмеченная тенденция, в первую очередь, обусловлена нарастающей конкуренцией передовых металлургических компаний на международном рынке. Необходимость сохранения конкурентоспособности требует удешевления производства проката, оптимизации существующих режимов прокатки, а также непрерывной разработки и внедрения режимов производства новых сталей в максимально сжатые сроки. В таких условиях надежные математические модели, обладающие прогнозирующей способностью, играют роль важного и эффективного инструмента развития современного производства.

Одной из известных компьютерных моделей является HSMM (**Hot Strip Mill Model**), разработанная в конце 90 годов прошлого века в университете Британской Колумбии (Канада). Аналогичная модель составляет ядро системы контроля качества горячекатаного стального листа VAI-Q Strip, успешно используемой в условиях реального производства компанией VOEST ALPINE STAHL LINZ (Австрия). С момента разработки отмеченных, в значительной степени упрощенных и ограниченных моделей, прошло около 15 лет. За это время отчетливо наметилась тенденция к использованию физически более обоснованных моделей для описания сложных процессов распада аустенита с образованием набора практически важных структурных составляющих, включающих в себя, наряду с ферритом и перлитом, бейнит разной морфологии и мартенсит.

Переход к моделям такого типа, прежде всего, обусловлен их более высокой точностью прогнозирования и гибкостью с точки зрения учета влияния комплексного легирования, что является весьма важным при разработке и внедрении в производство новых классов сталей.

Разработка новой генерации интегральных моделей горячей контролируемой прокатки, способных прогнозировать определяющие параметры микроструктуры современных сталей, необходимые для расчета их механических свойств, требует создания новых физически обоснованных моделей распада аустенита, базирующихся на надежных подходах к расчету термодинамических и кинетических параметров процесса с учетом влияния легирования.

Таким образом, исследование и моделирование распада аустенита, микроструктур и механических свойств, формирующихся в условиях контролируемой прокатки низколегированных сталей, с учётом влияния легирования **является актуальным**.

**Целью работы** является создание математических моделей для количественного описания распада аустенита горячекатаных низколегированных сталей с образованием совокупности практически важных микроструктурных составляющих и конечных механических свойств с учетом влияния легирования. Для достижения данной цели в диссертации поставлены и решены следующие **задачи**:

1. На основании учета влияния химического состава стали на процессы структурообразования аустенита при горячей прокатке, а также его распада при последующем ускоренном охлаждении с образованием феррито-перлитных микроструктур, проведена модификация компьютерной программы HSMM для повышения точности расчёта конечных механических свойств.

2. На основании базы расчетных данных, сформированной с использованием программного пакета Thermo-Calc, получены эмпирические формулы, позволяющие с высокой точностью вычислять температуры фазовых паравывесий и паравывесные концентрации углерода в аустените и феррите.

3. Создана база экспериментальных данных «условия распада аустенита – параметры микроструктуры – механические свойства» для сталей с широким диапазоном изменения химического состава, необходимая при калибровке моделей распада аустенита и прогнозирования механических свойств.

4. Разработаны физически обоснованные математические модели для количественного описания ферритного, перлитного и бейнитного превращений с учетом влияния комплексного легирования на термодинамические и кинетические параметры процессов.

5. Создана компьютерная программ AusTran, реализующая численное интегрирование системы дифференциальных уравнений математических моделей фазовых превращений аустенита при произвольном режиме его охлаждения или в изотермических условиях.

6. Разработаны математические модели для прогнозирования механических свойств горячекатаных сталей с широким спектром микроструктур и выполнена их калибровка на основе созданной базы экспериментальных данных.

#### Результаты, характеризующиеся **научной новизной**:

1. Разработаны физически обоснованные математические модели ферритного, перлитного и бейнитного превращений, в которых влияние комплексного легирования стали учитывается при расчетах как термодинамических, так и кинетических параметров процессов.

2. Применен новый подход к расчету энергии активации диффузионной перестройки решетки при зарождении зерен феррита и движении межфазной  $\alpha/\gamma$ -границы с использованием ее связи с энергией активации самодиффузии в аустените, вычисляемой с учетом влияния содержания основных легирующих элементов (C; Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V), находящихся в твердом растворе.

3. Предложен новый подход к количественному описанию ускоряющего влияния предварительной деформации аустенита с учетом вклада возврата на скорости зарождения феррита и бейнита, обусловленного снижением энергетических барьеров зарождения в областях гидростатического растяжения, возникающих по границам зерен.

4. Созданы физически обоснованные математические модели для прогнозирования механических свойств низколегированных сталей со сложной микроструктурой, включающей в себя все практически важные составляющие: феррит, перлит, бейнит и мартенсит.

**Практическая значимость** полученных результатов определяется:

1. Применением разработанных эмпирических моделей для расчёта температуры начала превращения и конечного размера зерна феррита при модификации интегральной модели горячей прокатки HSMM, позволившей значительно повысить точность расчета

конечных механических свойств сталей сортамента стана 2000 ОАО «Северсталь».

2. Использование созданных моделей, а также компьютерной программы AusTran, при оптимизации режимов горячей прокатки сталей для повышения уровня конечных механических свойств, разработке технологий производства новых марок сталей и корректировке химического состава существующих с целью снижения их себестоимости.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Модифицированная компьютерная модель HSMM, созданная путем интегрирования в неё разработанных микроструктурных моделей, которая позволяет существенно повысить точность прогнозирования прочностных свойств для феррито-перлитных сталей сортамента стана 2000 ОАО «Северсталь».

2. Физически обоснованная математическая модель распада аустенита с учетом образования феррита, перлита, бейнита и мартенсита, в которой влияние комплексного легирования стали учитывается при расчетах как термодинамических, так и кинетических параметров процессов.

3. Новый физически обоснованный подход к количественному описанию ускоряющего влияния предварительной деформации аустенита с учетом вклада возврата на кинетику его распада.

4. Математические модели для прогнозирования механических свойств сталей в зависимости от параметров микроструктуры.

**Достоверность результатов.** Достоверность результатов экспериментальных исследований обеспечивается их проведением на современном, сертифицированном и аттестованном оборудовании с использованием практически апробированных методик. Достоверность результатов теоретической части работы определяется корректным применением физически обоснованных подходов к построению математических моделей исследуемых процессов; тщательным отбором достоверных экспериментальных данных, использованных при их калибровке; количественным согласием результатов расчетов с экспериментом.

**Личный вклад соискателя.** Автор участвовал в постановке задач диссертации, самостоятельно выполнил все запланированные экспериментальные исследования; участвовал в построении

математических моделей, разработал и реализовал процедуры их калибровки, а также создал компьютерную программу AusTran.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, основных результатов и выводов, списка литературы из 119 наименований и двух приложений. Работа изложена на 202 страницах, содержит 96 рисунков и 66 таблиц.

**Апробация результатов работы.** Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» (СММТ'2009, 24-26 июня 2009, СПб); Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXIX Неделя Науки СПбГПУ» (СПбГПУ, ноябрь, 2010, СПб); XX уральской школе материаловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» (1-5 февраля 2010, Пермь); XIX Петербургские чтения по проблемам прочности (март 2010, СПб); Международной конференции «Materials Science and Engineering 2010» (MSE'10, 24-26 августа 2010, Дармштадт, Германия); Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» (СММТ'2011, 22-24 июня 2011, СПб); Международной конференции «Processing & Manufacturing of Advanced Materials» (Thermec'11, 1-8 августа 2011, Quebec City, Canada); Международном семинаре «Summary of the 2012 European Gleeble User's Group Meeting at TU Delft» (апрель 2012, Delft, Netherlands).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 11 печатных работ, 4 из которых – в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** раскрыта актуальность работы, кратко изложено ее содержание; сформулированы цель и задачи исследования, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** диссертации содержит анализ интегральных моделей горячей прокатки HSMM и VAI-Q-Strip, их возможностей и ограничений при прогнозировании микроструктуры и механических свойств сталей. Представлен аналитический обзор работ,

посвящённых созданию математических моделей распада аустенита разного типа и моделей для количественной оценки механических свойств современных сталей. В заключении, на основании сделанных выводов, поставлены задачи диссертационного исследования.

**Во второй главе** изложены результаты модификации компьютерной модели HSMМ, позволяющей обоснованно распространить ее применение на стали с химическим составом, отличающимся от состава сталей базовых марок. Модификация, в частности, базируется на уточнении полуэмпирической модели ферритного превращения, предложенной разработчиками HSMМ. Ключевым физическим параметром этой модели является температура старта ферритного превращения,  $T_s$ , соответствующая 5% превращения. Данная температура служит определяющим параметром в модели расчета размера зерна феррита.

Выполненное обобщение модели расчёта температуры  $T_s$  заключается в использовании:

- нового способа расчета коэффициента диффузии углерода в аустените с учетом влияния содержания практически важных легирующих элементов замещения (ЛЭЗ);
- уточнённых формул для вычисления равновесных концентраций углерода в феррите и аустените, а также температур фазовых равновесий;
- нового математического выражения для расчета критической концентрации углерода в аустените.

Эмпирические формулы для вычисления температур фазового паравравновесия, а также паравравновесных концентраций углерода в аустените и феррите в зависимости от температуры и содержания ЛЭЗ (Mn; Si; Mo; Cr; Ni), полученные и подробно описанные в данной главе, характеризуются высокой точностью.

Калибровка моделей расчёта температуры  $T_s$  и размера зерна феррита выполнена на основе опорной базы экспериментальных данных, включающей в себя набор данных из литературы, а также результаты собственных исследований для 13 сталей с широким диапазоном изменения химического состава.

Важным параметром обсуждаемой модели является критическая концентрация углерода в аустените,  $x_c^*$ . Достижение данной



концентрации при обогащении аустенита углеродом в ходе ферритного превращения, согласно используемым модельным представлениям, отвечает «старту» превращения, имеющему место при температуре  $T_3$ . Для этой концентрации получена формула:

$$x_C^* = x_{C\gamma\alpha} \left( 1 - \left( 1 - (d_\gamma^{\text{eff}})^{-0.89} \right) \left[ 1 - \exp(-0.01645\alpha_T) \times (A_3 - T)^{1.217} \right] \right), \quad (1)$$

$$\alpha_T = 1 - 0.744w_C^{0.182} - 0.208w_{Mn}^{0.34},$$

где  $x_{C\gamma\alpha}$  – равновесная концентрация углерода в аустените;  $A_3 \equiv A_{\epsilon_3}$  – температура фазового равновесия аустенит-феррит;  $d_\gamma^{\text{eff}}$  – эффективный размер зерна аустенита;  $w_{C;Mn}$  – содержание соответствующих элементов в стали (масс.%). При калибровке модели расчёта размера зерна феррита,  $d_\alpha$ , использована база экспериментальных данных для 6 сталей. В результате получено:

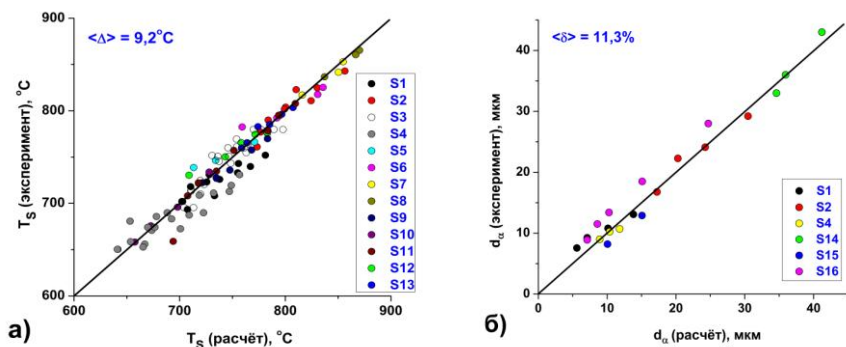
$$d_\alpha = f_\alpha^{1/3} \exp\left(13.5(d_\gamma^{\text{eff}})^{0.042}\right) \exp\left(-\frac{Q_N}{RT_S}\right), \quad (2)$$

$$Q_N = 144500 - 41600w_C^{0.104} \text{ (Дж/моль)},$$

где  $f_\alpha$  – объемная доля феррита;  $Q_N$  – эффективная энергия активации зарождения феррита (эмпирический параметр модели).

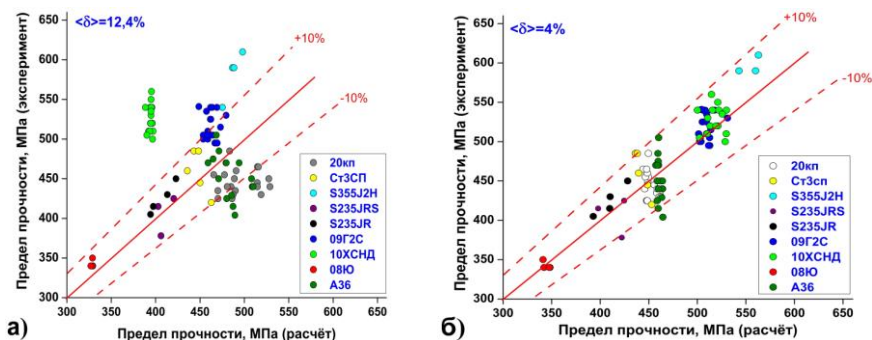
Из рис.1 видно, что разработанные модели позволяют достичь хорошего согласия с экспериментом (химические составы сталей S1–S16 приведены в диссертации).

В модифицированной версии HSMM использована разработанная модель ферритного превращения. Дополнительно была проведена замена исходных версий моделей, описывающих основные процессы структурообразования аустенита при горячей прокатке (роста зерна; динамической и статической рекристаллизации). Расчетные процедуры отмеченных математических моделей были реализованы в разработанных программных модулях и интегрированы в программную среду HSMM.



**Рис. 1.** Сопоставление расчётных и экспериментальных данных по температурам старта ферритного превращения (а) и размерам зерна феррита (б) для использованного набора сталей.  $\langle \delta \rangle$  и  $\langle \Delta \rangle$  средние значения абсолютной величины относительной и абсолютной погрешностей, соответственно.

Выполненная модификация HSMМ позволила существенно (более чем в 2 раза) повысить точность прогнозирования механических свойств 9 сталей из сортамента стана 2000 ОАО «Северсталь» (рис.2).



**Рис. 2.** Сопоставление результатов расчёта предела прочности сталей, полученных с помощью исходной (а) и модифицированной (б) версий HSMМ с экспериментальными данными.

**Третья глава** посвящена изложению результатов исследования кинетики распада аустенита в зависимости от скорости охлаждения и предварительной пластической деформации, а также полученных микроструктур и их механических свойств для 15 сталей. Все экспериментальные исследования распада аустенита выполнены с

использованием модуля Pocket Jaw термомеханического комплекса Gleeble 3800.

Химические составы сталей (табл.1) охватывают следующие практически важные диапазоны изменения содержания основных легирующих и микролегирующих элементов: **C**(0.004÷0.74); **Mn**(0.14÷1.90); **Si**(0.01÷1.58); **Cr**(0.02÷0.98); **Ni**(0.03÷0.55); **Cu**(0.04÷0.42); **Mo**(0.04÷0.31); **Nb**(0.002÷0.05); **V**(0.002÷0.065); **Ti**(0.001÷0.06) (для простоты использованы обозначения сталей, S1–S15, дублирующие соответствующие обозначения на рис.1).

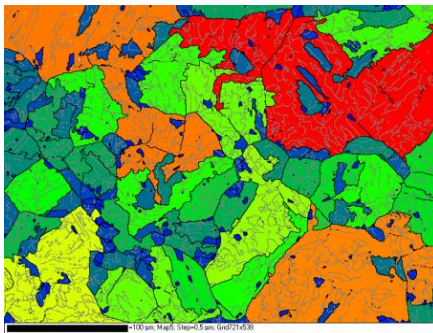
Таблица 1

**Химические составы исследованных сталей (масс.%)**

Сталь	C	Mn	Si	Cr	Ni	Cu	Mo	Nb	V	Ti	N
<b>S1 (X80)</b>	0.08	1.47	0.20	–	–	–	0.19	0.042	0.064	0.010	0.006
<b>S2 (X90)</b>	0.06	1.70	0.20	–	–	–	0.20	0.045	0.040	0.020	0.005
<b>S3 (X100)</b>	0.04	1.90	0.25	0.10	0.45	0.20	0.31	0.050	0.020	0.020	0.006
<b>S4</b>	0.18	0.72	0.20	0.03	0.07	0.19	0.02	–	0.010	–	0.007
<b>S5</b>	0.22	0.46	0.26	0.98	0.18	0.27	0.05	–	–	–	–
<b>S6</b>	0.4	0.68	1.58	0.08	0.07	0.14	–	–	–	–	–
<b>S7</b>	0.74	0.55	0.36	0.04	0.04	0.07	–	–	–	–	–
<b>S8 (CHES01)</b>	0.004	0.14	0.03	0.03	0.04	0.04	0.004	0.002	0.002	0.060	0.004
<b>S9 (08ПС)</b>	0.06	0.17	0.01	0.02	0.03	0.06	0.004	0.002	0.001	0.001	0.004
<b>S10 (D40S)</b>	0.10	0.56	0.81	0.66	0.55	0.42	0.006	0.022	0.003	0.004	0.007
<b>S11 (09ГСФ)</b>	0.10	0.56	0.55	0.21	0.13	0.12	0.12	0.022	0.065	0.004	0.005
<b>S12 (09Г2С)</b>	0.11	1.55	0.66	0.03	0.03	0.05	0.003	0.003	0.005	0.003	0.006
<b>S13 (S235JR)</b>	0.13	0.40	0.02	0.04	0.04	0.06	0.004	0.002	0.002	0.001	0.005
<b>S14 (СтЗСП)</b>	0.20	0.40	0.19	0.03	0.03	0.05	0.004	0.002	0.004	0.002	0.005
<b>S15 (25ГЮО)</b>	0.23	1.31	0.21	0.03	0.03	0.05	0.007	0.003	0.005	0.003	0.007

Для сталей S1–S7 получен набор данных по кинетике распада аустенита и параметрам микроструктур, который использован при калибровке математической модели распада. В случае сталей S2; S3 и S8–S15 дополнительно проведены исследования механических свойств, результаты которых послужили основой построения эмпирических моделей для их прогнозирования.

Проведенное исследование микроструктур сталей S2 и S3 показало, что они являются практически полностью бейнитными. В связи с этим было выполнено дополнительное исследование их микроструктуры с помощью метода EBSD–анализа, который позволил получить количественную информацию о размерах бейнитных пакетов, выполняющих в рассматриваемых структурах роль эффективного зерна. На рис.3 приведен пример ориентационной EBSD–карты, полученной для бейнитной структуры стали S3.



**Рис. 3.** Изображение микроструктуры стали S3 (X100), полученное методом EBSD – анализа.

При изучении влияния пластической деформации аустенита достоверно установлена его зависимость от скорости охлаждения до начала распада. Физическая причина такой зависимости, видимо, состоит в том, что при малых скоростях в материале успевают пройти процессы возврата и даже статической рекристаллизации. В результате ускоряющее влияние деформации в той или степени снимается.

**В четвёртой главе** изложена физически обоснованная модель распада аустенита низколегированных сталей с образованием набора практически важных микроструктурных составляющих – феррита, перлита, бейнита и мартенсита. Модели ферритного, перлитного и бейнитного превращений созданы в рамках настоящей работы, опираясь на результаты предшественников. Для описания кинетики мартенситного превращения использована эмпирическая модель из литературы.

*Модель ферритного превращения.* В модели считается, что в отсутствии пластической деформации зарождение полигонального феррита, происходит на границах зерен аустенита (в стыках и на рёбрах). Для вычисления скорости  $k$ -ой моды процесса ( $k=1; 2$ ), в соответствии с классической теорией, используется уравнение:

$$I_k^{PF}(t; T; Y_{AE}) = C_k N_k^0(t) \exp\left(-\frac{Q_N(Y_{AE})}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\sigma_k^3}{RT\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}^2(T; Y_{AE})}\right), \quad (4)$$

где  $N_k^0(t)$  – объемная плотность мест зарождения с учётом их исчерпания;  $Q_N(Y_{AE}) = 0.5Q_{SD}(Y_{AE})$  – энергия активации перестройки решетки, зависящая от химического состава твердого раствора аустенита;  $Q_{SD}(Y_{AE})$  – ЭАСД в аустените, рассчитываемая с использованием найденной эмпирической формулы;  $Y_{AE} = \{y_C; y_{Mn}; y_{Si}; y_{Cr}; y_{Ni}; y_{Mo}; y_{Nb}; y_{Ti}; y_V\}$  – совокупность средних атомных концентраций легирующих элементов в твердом растворе;  $\sigma_k$  – эффективная поверхностная энергия зародыша;  $\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}(T; Y_{AE})$  – термодинамическая движущая сила  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращения;  $C_k$  – эмпирические параметры.

Скорость роста феррита рассчитывается в рамках модели «смешанной кинетики», в которой учитывается, что процесс контролируется как подвижностью межфазной  $\alpha/\gamma$ -границы, так и скоростью отвода углерода от этой границы в объем аустенитного зерна. Скорость роста,  $V_{\alpha/\gamma}^L(T; Y_{AE}^*)$ , контролируемая перестройкой решетки, вычисляется с использованием уравнения:

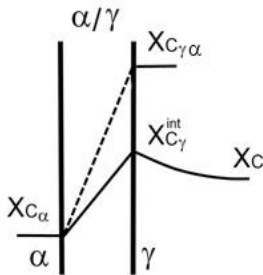
$$\begin{aligned} V_{\alpha/\gamma}^L(T; Y_{AE}^*) &= -M_{\alpha/\gamma}(T; Y_{AE}^*)(x_{C\gamma} - x_{C\gamma}^{int}), \\ M_{\alpha/\gamma}(T; Y_{AE}^*) &= M_{\alpha/\gamma}^0 \exp\left(-\frac{Q_G(Y_{AE}^*)}{RT}\right), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $M_{\alpha/\gamma}(T; Y_{AE}^*)$  – подвижность межфазной границы;  $Q_G(Y_{AE}^*) = 0.5Q_{SD}(Y_{AE}^*)$  – эффективная энергия активации перестройки решетки;  $y_{C\gamma}^{int}$  – интерфейсная концентрация углерода со стороны аустенита (рис.4);  $M_{\alpha/\gamma}^0$  – эмпирический параметр. Расчет энергии активации  $Q_G(Y_{AE}^*)$  выполняется с использованием эффективного значения концентрации углерода в движущейся границе, которое полагается равным:  $y_C^* = 0.5(y_{C\gamma}^{int} + y_{C\alpha})$  (рис.4).

При вычислении скорости роста, определяемой диффузионным отводом углерода в объем аустенита, используется уравнение для скорости роста зерна сферической формы:

$$V_{\alpha/\gamma}^C(T; Y_{AE}) = \frac{\bar{D}_C(T; Y_{AE}) (x_{C\gamma}^{int} - x_C)}{R_\alpha (x_{C\gamma}^{int} - x_{C\alpha})}, \quad (6)$$

где  $\bar{D}_C(T; Y_{AE})$  – коэффициент объемной диффузии углерода в аустените, усредненный по профилю его концентрации в этой фазе (рис.4);  $R_\alpha$  – радиус зерна феррита. Расчеты коэффициента диффузии углерода в аустените проводятся с учетом влияния ЛЭЗ.



**Рис. 4.** Схема профиля концентрации углерода, формирующегося в процессе роста зерен феррита.

$x_C^{int}$ , найденной путём численного решения трансцендентного уравнения:  $V_{\alpha/\gamma}^L = V_{\alpha/\gamma}^C$ .

Приращение объёмной доли феррита за счет роста зародившихся зерен вычисляется с учетом экспериментально установленных особенностей процесса. Соответствующие формулы подробно изложены в диссертации.

Конечный размер зерна феррита,  $d_\alpha$ , рассчитывается по формуле:  $d_\alpha = (2f_{PF}/3N_\alpha)^{1/3}$ , где  $f_{PF}$  – объёмная доля феррита;  $N_\alpha$  – суммарное число зерен, зародившихся по первой и второй модам.

Модель перлитного превращения. В модели полагается, что непрерывный слой перлита быстро формируется вдоль  $\alpha/\gamma$  – границ при выполнении условия термодинамической выгоды образования цементита и растёт по направлению к центру аустенитных зерен. Расчёт скорости роста слоя (продольный рост перлитной колонии) проводится с использованием модели

«смешанной кинетики». При этом для вычисления скорости его роста, контролируемого диффузией углерода, используется уравнение Хиллerta:

$$V_{PE}^C(T; Y_{AE}) = \frac{6.35 \bar{D}_C(T; Y_{AE}) (x_{C\gamma}^{int} - x_{C\gamma/\theta})}{S_{\theta\alpha} (x_{C\theta} - x_{C\alpha})}; S_{\theta\alpha} = -\frac{4\sigma_{\alpha/\theta}}{\Delta G_{\gamma \rightarrow \theta}(T; Y_{AE})}, \quad (7)$$

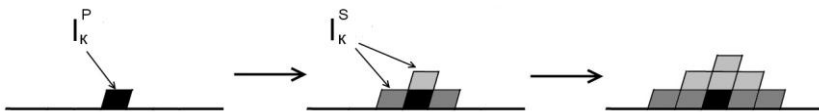
где  $x_{C\gamma/\theta}$  и  $x_{C\theta}$  – соответственно, равновесные концентрации углерода на  $\gamma/\theta$ –границе и в цементите;  $\bar{D}_C(T; Y_{AE})$  – эффективное значение коэффициента диффузии углерода в аустените, полученное его усреднением в интервале концентраций  $[x_{C\gamma/\theta}; x_{C\gamma}^{int}]$ ;  $S_{\theta\alpha}$  – полуширина межламельного расстояния в перлите;  $\sigma_{\alpha/\theta}$  – удельная энергия  $\alpha/\theta$ –границы (эмпирический параметр модели).

Расчет скорости роста перлита  $V_{PE}^L(T; Y_{AE}^*)$ , контролируемой перестройкой решетки в процессе  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращения, проводится по формуле аналогичной (5). Эффективное значение интерфейсной концентрации  $x_{C\gamma}^{int}$  вычисляется путём решения уравнения:  $V_{PE}^C = V_{PE}^L$ . После чего скорость роста,  $V_{PE}$ , соответствующая этой концентрации, рассчитывается по формуле (7).

Приращение объемной доли перлита  $df_{PE}$  за время  $dt$  вычисляется по формуле:  $df_{PE} = \alpha_{PE} f_{AU} d_\gamma^{-1} V_{PE} dt$ , где  $f_{AU}$  – объемная доля остаточного аустенита;  $d_\gamma$  – размер зерна аустенита;  $\alpha_{PE}$  – эмпирический параметр модели.

Модель бейнитного превращения. В модели считается, что кинетика данного превращения определяется скоростью зарождения бейнитных субэлементов (элементов), образование которых становится энергетически выгодным, когда движущая сила  $\gamma \rightarrow \alpha$ –превращения оказывается выше некоторого критического значения:  $|\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}(T = B_s)| = \Delta G_{sh}$ , где  $B_s$  – температура старта бейнита.

Рассматривается первичное ( $I_k^P$ ) и вторичное (автокаталитическое) ( $I_k^S$ ) зарождение элементов на  $\gamma/\gamma$ – и  $\gamma/\alpha$ –границах, а также на поверхности ранее сформировавшихся элементов (рис.5).



**Рис. 5.** Схема последовательного зарождения бейнитных элементов.

Для расчёта скорости зарождения рассматриваемых элементов используются выражения вида:

$$I_k^{P:S}(t; T; Y_{AE}) = C_k^{P:S} F_k^{P:S}(t) \exp\left(-\frac{Q_B(Y_{AE}) + k_k^{P:S} \Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}(T; Y_{AE})}{RT}\right), \quad (8)$$

где  $F_k^{P:S}(t)$  – параметр, определяющий изменяющуюся со временем объемную плотность мест зарождения элементов  $k$  – ого типа;  $Q_B(Y_{AE})$  – эффективная энергия активации зарождения;  $C_k^{P:S}; k_k^{P:S}$  – эмпирические параметры модели. Формулы для расчета  $F_k^{P:S}(t)$  подробно описаны в диссертации.

Приращение объемной доли бейнита за интервал времени  $dt$  определяется по формуле:

$$df_B(t) = f_{AU}(t) v_B \sum_k I_k^{P:S} dt, \quad (9)$$

здесь  $v_B = w_B^2 l_B$  – объём элемента, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда;  $w_B; l_B$  – его размеры, определяемые выражениями:  $w_B = k_{w1} / (B_S - T)^{k_{w2}}$ ;  $l_B = k_{l1} / (B_S - T)^{k_{l2}}$ , где  $k_{w1}; k_{w2}; k_{l1}; k_{l2}$  – эмпирические параметры.

Количественная оценка перераспределения углерода между бейнитом и аустенитом проводится в рамках «двухступенчатой» модели. При этом считается, что диффузионное перераспределение углерода между образовавшимся бейнитным элементом и аустенитом развивается после быстрого завершения сдвигового превращения и происходит до тех пор, пока его поверхность не будет «застроена» новыми элементами.

Важной количественной характеристикой бейнитных структур является размер бейнитного пакета. По аналогии с расчётом размера зерна феррита средний размер пакета вычисляется по формуле:

$$d_B = \left(2f_B / 3N_B^P\right)^{1/3}, \quad \text{где } N_B^P \text{ – общее количество первичных элементов.}$$



В работе предложен способ количественной оценки долей бейнита гранулярной и речной морфологий. Считается, что переход к формированию речного бейнита происходит при выполнении условия:  $|\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}| > \Delta G_{\Gamma_B \rightarrow P_B}$ , где  $\Delta G_{\Gamma_B \rightarrow P_B}$  – критическая величина движущей силы превращения (эмпирический параметр модели).

Моделирование влияния деформации аустенита. В работе предложен и реализован новый подход к количественному описанию влияния деформации с учетом вклада возврата. Считается, что основное влияние деформации на ферритное превращение связано с ускорением зарождения зерен феррита в областях гидростатического растяжения, возникающих вблизи аустенитных границ. При описании этого влияния вводится параметр:  $\xi \equiv \xi(t_C) = k_\xi \delta_{\gamma \rightarrow \alpha} \sigma(t_C) / k_B T_\varepsilon$ , где  $\delta_{\gamma \rightarrow \alpha}$  – дилатационный эффект превращения;  $\sigma(t_C)$  – внутренние напряжения к моменту начала распада;  $T_\varepsilon$  – температура деформации;  $k_B$  – константа Больцмана;  $k_\xi$  – эмпирический параметр.

В соответствии с предлагаемым подходом к учёту влияния деформации, выражение для скорости зарождения феррита в деформированном аустените можно представить в виде:

$$I_k^{PF}(\varepsilon) = I_k^{PF}(\varepsilon = 0) \times \exp\left(-\frac{(\psi_k^{PF} - 1)\sigma_k^3}{RT\Delta G_{\gamma \rightarrow \alpha}^2(T; Y_{AE}; \varepsilon)}\right), \quad (10)$$

где  $\psi_k^{PF} = (1 + 3\xi_k + \xi_k^2)(1 + \xi_k)^{-3}$  ( $k = 1; 2$  – номер моды зарождения).

Для описания влияния деформации на скорость зарождения бейнитных элементов по границам зерен аустенита используется аналогичный подход.

Кроме повышения скорости зарождения кристаллов  $\alpha$  – фазы по границам зерен предварительная пластическая деформация стимулирует внутризеренное зарождение так называемого ацикулярного феррита, который образуется на границах фрагментов/субзерен деформированного аустенита. Эта мода бейнитного превращения в модели описывается за счет введения двух дополнительных типов элементов (первичные и вторичные), зарождающихся на высокоугловых границах деформационного происхождения. Для расчета скорости зарождения этих элементов используется выражение, аналогичное (8).

Численное интегрирование системы дифференциальных уравнений математической модели распада аустенита при произвольном режиме его охлаждения реализуется разработанной компьютерной программой **AusTran** (**Austenite Transformation**). Оптимальные значения эмпирических параметров модели определены с использованием этой программы, опираясь на надежные экспериментальные данные по кинетике распада аустенита, размерам зерна феррита и бейнитных пакетов. При этом использована база данных для 10 сталей, включающая в себя как результаты собственных исследований (стали S1–S7), так и данные из литературы. Содержание основных легирующих элементов в сталях меняется в практически важных диапазонах: **C**(0.04÷0.74); **Mn**(0.4÷1.9); **Si**(0.01÷1.6); **Cr**(0.03÷1); **Mo**(0.04÷0.3); **Ni**(0.02÷0.5) (масс.%). Размер зерна аустенита варьируется от 20 до 100 мкм, а скорость охлаждения при его распаде – от 1 до 200°С/с.

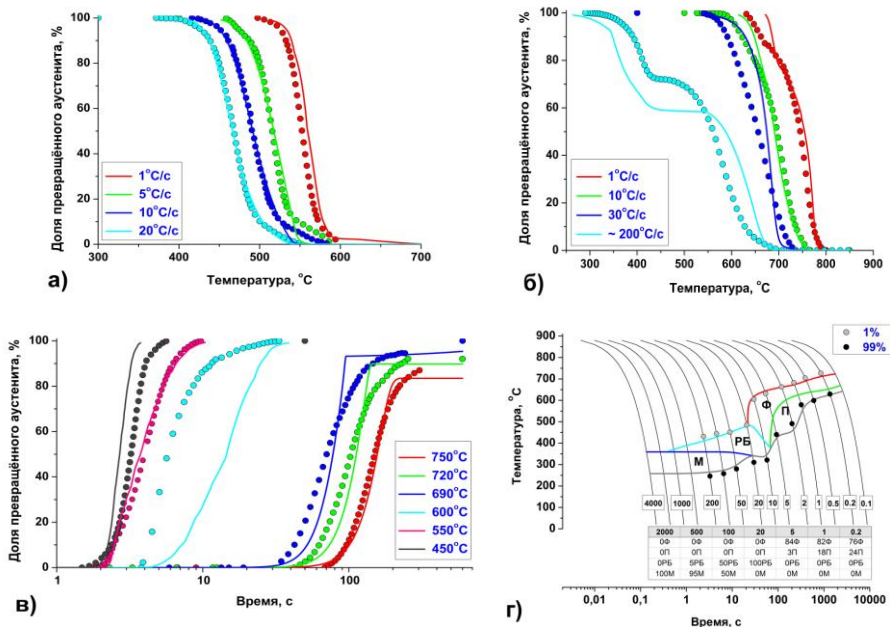
Кроме этого при калибровке модели использованы данные по кинетике изотермического распада для стали S1 при температурах в диапазоне от 450 до 750°С.

Разработанная модель распада позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом по кинетике процесса, как в случае непрерывного охлаждения, так и в изотермических условиях (рис.6в). При этом кинетику распада удастся удовлетворительно описать в случае формирования сложных структур, включая полностью бейнитные (рис.6а;б). Пример расчетной CCT диаграммы в сравнении с экспериментальной для стали 0.26C; 1.4Mn; 0.3Si; 0.5Cr ( $d_\gamma = 100\text{мкм}$ ), данные для которой не использованы при калибровке модели распада приведен на рис.6г.

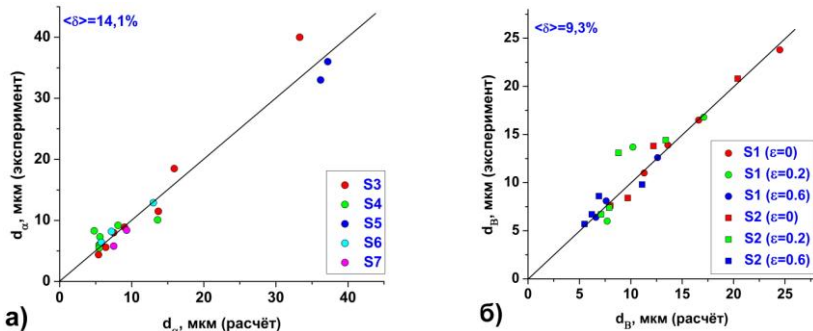
Модель дополнительно обеспечивает достаточно высокую точность прогнозирования размеров зерна феррита (рис.7а) и бейнитных пакетов (рис.7б), которая сопоставима с погрешностью экспериментального определения этих параметров. При этом она даёт хорошие результаты, как в случае недеформированного аустенита, так и с его предварительной деформацией.

При калибровке бейнитной части модели было найдена эмпирическая зависимость эффективной энергии активации зарождения бейнитных элементов от концентраций легирующих элементов в твердом растворе аустенита:

$$Q_B = 4000 + 28000y_C + 24000y_{Mn} + 58000y_{Mo} + 31000y_{Cr} \text{ (Дж/моль)}$$



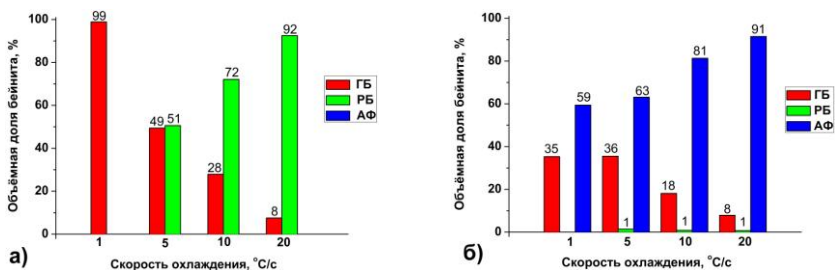
**Рис. 6.** Сопоставление расчётных и экспериментальных данных по кинетике распада аустенита (а–в). а,б) непрерывное охлаждение сталей S2, S4; в) изотермические выдержки стали S1; г) CCT диаграмма (Ф – полигональный феррит; П – перлит; РБ – реечный бейнит; М – мартенсит).



**Рис. 7.** Сопоставление расчётных и экспериментальных данных по размерам зерна феррита (а) и бейнитного пакета (б) для разных сталей.

Значение параметра бейнитной модели  $\Delta G_{\text{ГБ} \rightarrow \text{РБ}} \approx 950 \text{ Дж/моль}$  найдено на основе сопоставления результатов вычисления объемных

долей бейнита разной морфологии с данными металлографического исследования соответствующих структур для сталей S1–S3. Пример количественного прогнозирования морфологии бейнита для стали S2 представлен на рис.8.



**Рис. 8.** Результаты прогнозирования морфологии бейнита для стали S2. а) без деформации; б) с предварительной деформацией 0.6 (ГБ – гранулярный бейнит; РБ – речный бейнит; АФ – ацикулярный феррит).

**В пятой главе** описаны разработанные математические модели для количественной оценки механических свойств стали на основании параметров ее микроструктуры. Модели для расчёта пределов текучести  $\sigma_{0.2} \equiv \sigma_{YS}$  и прочности  $\sigma_B \equiv \sigma_{TS}$  построены на основании правила смеси, в соответствии с которым вклад отдельных структурных компонентов полагается пропорциональным их объемной доле. В качестве компонентов рассматриваются: полигональный феррит, перлит, бейнит различной морфологии, а также мартенсит.

В соответствии с выбранным подходом выражения для расчета прочностных свойств представляются в виде:

$$\begin{aligned} \sigma_{0.2} &\equiv \sigma_{YS} = \sigma_0^Y + \Delta\sigma_{ss}^Y + \Delta\sigma_{gb}^Y + \Delta\sigma_{PE}^Y + \Delta\sigma_B^Y + \Delta\sigma_M^Y, \\ \sigma_B &\equiv \sigma_{TS} = \sigma_0^T + \Delta\sigma_{ss}^T + \Delta\sigma_{gb}^T + \Delta\sigma_{PE}^T + \Delta\sigma_B^T + \Delta\sigma_M^T, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\sigma_0^Y; \sigma_0^T$  – базовые вклады;  $\Delta\sigma_{ss}^Y; \Delta\sigma_{ss}^T$  – вклады, обусловленные твердорастворным упрочнением атомами ЛЭЗ;  $\Delta\sigma_{gb}^Y; \Delta\sigma_{gb}^T$  – вклады границ зерен феррита;  $\Delta\sigma_{PE}^Y; \Delta\sigma_{PE}^T; \Delta\sigma_B^Y; \Delta\sigma_B^T; \Delta\sigma_M^Y; \Delta\sigma_M^T$  – соответственно, вклады перлита, бейнита и мартенсита.

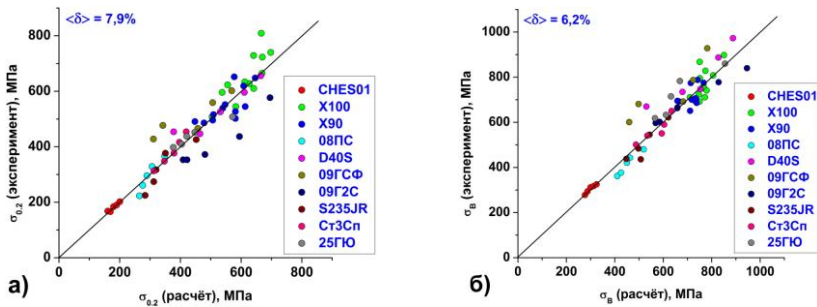
Для расчета относительного удлинения  $\delta$  используется формула:

$$\delta = \delta_0 + \Delta\delta_{ss} + \Delta\delta_{gb} + \Delta\delta_{PE} + \Delta\delta_B + \Delta\delta_M, \quad (12)$$

где  $\delta_0$  – базовое значение удлинения;  $\Delta\delta_{ss}$ ;  $\Delta\delta_{gb}$ ;  $\Delta\delta_{PE}$ ;  $\Delta\delta_B$ ;  $\Delta\delta_M$  – вклады в снижение данной характеристики пластичности, обусловленные упрочнением материала за счёт твердого раствора, границ зёрен феррита, перлитной, бейнитной и мартенситной составляющих микроструктуры, соответственно.

Для вкладов, обусловленных границами зёрен феррита, используется выражение Холла-Петча. Расчета вкладов перлита проводится с учётом совокупного влияния его объёмной доли и межпластинчатого расстояния, которое определяется степенью переохлаждения аустенита относительно равновесной температуры  $A_1$ . Вклады бейнита в прочностные свойства определяются с учетом их зависимости от размера бейнитных пакетов (эффективный размер зерна), долей бейнита разной морфологии, плотности дислокаций, а также содержания углерода в аустените перед началом бейнитного превращения. Вклады мартенсита определяются с учетом его объёмной доли, плотности дислокаций и содержания углерода в аустените к моменту его образования.

Калибровка моделей механических свойств выполнена на основе полученной в работе базы экспериментальных данных по этим свойствам и наборам необходимых параметров микроструктуры, рассчитанных с использованием разработанной программы AusTran. На рис.9 представлены результаты сравнения прогнозируемых прочностных свойств с экспериментальными данными для разных сталей (табл.1).



**Рис. 9.** Сопоставление расчётных и экспериментальных данных по пределу текучести (а) и прочности (б) для разных марок сталей.

**В ПРИЛОЖЕНИИ А** дана сводка кривых растяжения образцов сталей S8–S15, а также их механических свойств, полученных для исследованного набора структурных состояний.

**ПРИЛОЖЕНИЕ Б** содержит описание возможностей разработанной компьютерной программы AusTran, а также краткое руководство по ее использованию.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ**

1. Выполнена модификация компьютерной программы HSMM для повышения точности учета влияния химического состава стали на процессы структурообразования аустенита при горячей прокатке, а также его распада при последующем ускоренном охлаждении с образованием феррито-перлитных микроструктур. Проведённая модификация позволила существенно повысить точность прогнозирования прочностных свойств сталей сортамента стана 2000 ОАО «Северсталь».

2. С помощью комплекса Gleeble 3800 создана база экспериментальных данных «условия распада аустенита – параметры микроструктуры – механические свойства» для низколегированных сталей существенно различающихся по химическому составу, необходимая при калибровке моделей распада аустенита и прогнозирования механических свойств.

3. На основании базы расчетных данных, созданной с использованием программного пакета Thermo-Calc, получены эмпирические формулы, позволяющие с высокой точностью рассчитывать температуры фазовых паравнесий и паравнесные концентрации углерода в аустените и феррите.

4. Разработаны физически обоснованные математические модели для количественного описания ферритного, перлитного и бейнитного превращений с учетом влияния комплексного легирования на термодинамические и кинетические параметры процессов.

5. Создана компьютерная программа AusTran, реализующая численное интегрирование системы дифференциальных уравнений математических моделей фазовых превращений аустенита при произвольном режиме его охлаждения или в изотермических условиях.

6. Разработаны математические модели для прогнозирования механических свойств низколегированных сталей с широким спектром микроструктур и выполнена их калибровка на основе созданной базы экспериментальных данных.

### **Основные результаты диссертации опубликованы в работах:**

1. Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Моделирование микроструктуры и механических свойств стального листа после прокатки на стане 2000 ОАО «Северсталь» // Вопросы материаловедения. – 2010. – № 3(63). – с. 16–27.
2. Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Моделирование микроструктуры и механических свойств горячекатаных низколегированных сталей // Сб. трудов: «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов»: 1-5 февраля 2010 г. – Пермь. – 2010. – с. 99.
3. Sokolov S.F., Sokolov D.F., Vasilyev A.A., Kolbasnikov N.G. New Models for Steels Microstructure Simulation under Hot Rolling and Accelerated Cooling // Presentation at the European Gleeble User's Group Meeting at TU Delft: April 24–25, 2012, Delft, Netherlands: [http://tmslab.spbstu.ru/tmslab/Present/Present\\_11.pdf](http://tmslab.spbstu.ru/tmslab/Present/Present_11.pdf)
4. Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Филиппов С.А., Шамшури А.И. Экспериментальное исследование распада аустенита трубной стали Х90 и анализ полученных микроструктур // Сб. трудов: СММТ'11, Санкт-Петербург. – 2011. – с. 305.
5. Васильев А.А., Соколов Д.Ф., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф. Моделирование распада аустенита с учётом влияния легирования на термодинамические и кинетические параметры процесса // Сб. трудов: СММТ'11, Санкт-Петербург. – 2011. – с. 304–305.
6. Соколов Д.Ф., Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф. Разработка математической модели для предсказания размера зерна феррита с целью повышения точности модели горячей прокатки // Обработка металлов давлением: Сборник научных трудов. – Краматорск: ДГМА. – 2011. – №3 (28). – с. 36–40.
7. Vasilyev A., Rudskoy A., Kolbasnikov N., Sokolov S., Sokolov D. Physical and Mathematical Modeling of Austenite Microstructure Evolution Processes Developing in Line-pipe Steels under Hot Rolling // Mater. Sci. Forum. – 2012. – V. 706-709. – p. 2836–2841.
8. Соколов Д.Ф., Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф. Эмпирические формулы для расчёта температур и концентраций углерода, отвечающих паравравновесию основных фаз в сталях // Вопросы материаловедения. – 2012. – №1(69). – с. 5–14.
9. Соколов Д.Ф., Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф. Математическая модель предсказания размера зерна феррита в низколегированных сталях // Сталь. – 2012. – №5. – с. 65–70.
10. Васильев А.А., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф., Колбасников Н.Г., Моделирование  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращения в сталях // ФТТ. – 2012. – Т. 54. – №8. – с. 1565–1575.