



УДК 519.21

© 2010

В. И. Большаков, Ю. И. Дубров, О. С. Касьян

Микроструктура стали как определяющий параметр при прогнозе ее механических характеристик

(Представлено академиком НАН Украины М. И. Гасиком)

Розроблено метод прогнозування механічних характеристик сталі на основі аналізу її мікроструктури з урахуванням форми та розміру зерен. Складено алгоритм, реалізований програмно. Такий алгоритм дає можливість отримати недорогий та швидкий аналіз якості сталі на передпроектній стадії її дослідження.

Как показал анализ публикаций по вопросам материаловедения за относительно длительный промежуток времени (с ретроспективой с 1950 г. и до наших дней), детерминированные модели прогноза качественных характеристик стали не дают однозначных результатов [1]. Напрашивается вывод, аналогичный известной гипотезе С. Уолфрема [2]. Согласно этой гипотезе, некоторые процессы, при моделировании которых наблюдаются трудности в их идентификации (хаотические турбулентные течения, вихри в атмосфере, экономические системы, биологическая эволюция), описываются только неприводимыми алгоритмами, результаты которых невозможно предсказать, не выполнив их полностью. В материаловедении такой эффект можно объяснить тем, что взаимосвязь микроструктуры стали с ее механическими свойствами невозможно описать линейной зависимостью, поскольку относительно небольшие изменения в ее микроструктуре часто приводят к значительным изменениям ее механических свойств [3, 4]. Как хорошо известно, микроструктура стали состоит из замкнутых областей, именуемых зернами, сложная форма которых затрудняет применение евклидовой геометрии для их относительно точного описания.

Предположение 1. Выходом из сложившейся ситуации может быть применение языка топологии для учета в модели прогноза качественных характеристик стали и формы зерна ее микроструктуры.

Впервые аппроксимацию топологическими характеристиками в материаловедении применил в 1952 г. К. Смит [5] при описании процесса формирования микроструктуры стали [6, 7].

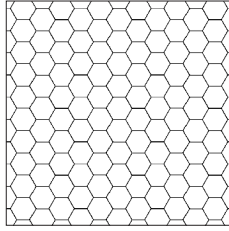


Рис. 1. Эталон идеальной структуры

Предположение 2. Учитывая тот факт, что микроструктура стали достаточно точно не воспроизводится при любых параллельных опытах, как бы точно ни повторялись условия этих опытов [1], целесообразно для создания модели прогноза произвести классификацию микроструктур стали. Это позволит для каждого подмножества микроструктур подобрать его топологический эквивалент с тем, чтобы осуществлять идентификацию той или иной микроструктуры по ее топологическому эквиваленту. Последнее инициирует создание подмножеств микроструктур сталей, согласованных с их топологическими эквивалентами¹.

Если рассматривать структуру стали как стационарную систему, находящуюся в равновесии, то при условии, что все границы зерен имеют одинаковую поверхностную энергию (одинаковую форму и размеры), углы между их границами в местах встречи трех зерен будут равны 120° , что следует из простого соотношения [8]

$$\delta = \pi \left(1 - \frac{2}{n} \right), \quad (1)$$

где δ — угол между границами зерен; n — количество границ, соприкасающихся друг с другом.

Исходя из этого, эталоном идеальной равновесной микроструктуры стали является та, в которой все зерна имеют гексагональную форму и одинаковые по длине границы [5] (рис. 1).

Такой эталон далек от большинства реальных микроструктур сталей, однако, по нашему мнению, он вполне применим в качестве топологического эквивалента, например для ферритной и аустенитной структур, поскольку зерна этих структур близки к равноосной форме.

Предположение 3. Изучая достаточно большое количество структур сталей, можно заметить их визуальную схожесть между собой в одних случаях и несхожесть — в других, что указывает на необходимость их классификации. С этой целью было предложено четыре класса структур, топологические эквиваленты которых показаны на (рис. 2).

Для того чтобы формализовать зависимость между механическими свойствами стали и ее микроструктурой, нами были введены некоторые определения и величины, зная которые мы можем говорить о метрических свойствах топологического эквивалента и его отличии от реальной структуры стали. Часть этих величин является общей для всех классов структур, а часть из них относится только к одному из этих классов.

Как известно, одним из основных инвариантов структуры (ранее введенным в ГОСТ 5639–82) является средний диаметр зерен — D . При формировании модели прогноза механических свойств мы брали во внимание эту величину, которая идентифицирует размер

¹Такой подход к формированию модели прогноза в неявном виде включает в нее учет формы зерна.

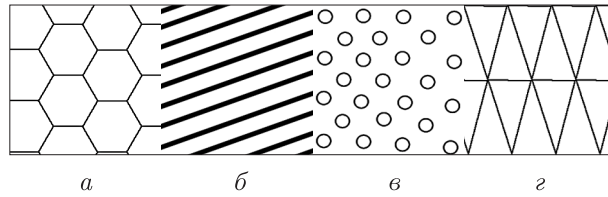


Рис. 2. Классы структур согласно их топологическим эквивалентам: *a* — сотовая; *б* — полосчатая; *в* — зернистая; *г* — игольчатая

каждой отдельно взятой ячейки (зерна) эквивалента. С учетом разницы форм зерен эквивалентов эта величина должна определяться для каждого из классов структур отдельно.

Таким образом, разница между реальной структурой и ее топологическим эквивалентом учитывается по величине дисперсии диаметров зерен δ и метрического расхождения между реальной площадью зерен и площадью зерен эквивалента E_a . Дисперсия диаметров зерен делает возможным определение величины различий между диаметрами зерен в одной отдельно взятой микроструктуре. Для этого находим средний диаметр зерен микроструктуры D_g с последующим определением относительного отклонения диаметра каждого зерна от диаметра ячейки эквивалента:

$$\delta_g = \frac{\sqrt{(D - D_g)^2}}{D}, \quad (2)$$

где D — средний диаметр зерен; D_g — диаметр одного зерна.

Предположение 4. Чем более деформированными будут границы реального зерна, тем большим будет различие между его площадью и площадью ячейки топологического эквивалента. Это объясняется тем, что диаметр ячейки эквивалента определяется как наибольшее расстояние между двумя точками на границе зерна. Эта разница хорошо отражается в величине метрического расхождения E_g

$$E_g = \frac{\sqrt{(S_g - S_e)^2}}{S_e}. \quad (3)$$

Здесь S_e — площадь ячейки топологического эквивалента; S_g — площадь зерна.

Предположение 5. Принимаемые классы структур, согласно их топологическим эквивалентам.

Сотовая структура имеет наиболее простую геометрию. Самыми яркими представителями такого класса являются микроструктуры феррита и аустенита. Как отмечено выше, величины, которые необходимо определить для идентификации данной структуры, — это диаметр зерна D_g , дисперсия δ и метрическое расхождение E_g .

Диаметр зерна D_g этого класса структур определяется как наибольшее расстояние между двумя точками на границе рассматриваемого зерна. Величину площади ячейки S_e эквивалента в данном случае находим как площадь шестиугольника с диагональю, равной среднему диаметру зерен структуры D [8]

$$S_e = \frac{3\sqrt{3}D^2}{2}. \quad (4)$$

Полосчатая структура — это двухфазная (феррит — цементит) система, которая представляет собой последовательный набор светлых и темных полос (зерна обеих фаз, соот-

ветственно). Наиболее ярким представителем этого класса структур является пластинчатый перлит, также сюда относятся некоторые промежуточные фазы (сорбит, троостит).

За диаметр зерен D_g данной структуры принимаем ширину полос. Она определяется как наибольший возможный диаметр круга, вписанного в зерно. Поскольку рассматриваемая структура двухфазная, средний диаметр зерен каждой фазы может быть различным, поэтому его находим для каждой фазы отдельно.

Для учета различия соотношения фаз в полосчатой структуре была введена величина объемной доли феррита ω_f , которая определяется как соотношение площадей феррита и цемента

$$\omega_f = \frac{S_f}{S_f + S_c}, \quad (5)$$

где S_f — общая площадь фазы феррита; S_c — общая площадь фазы цемента.

Метрическое расхождение для каждого зерна E_g этой структуры определялось как отношение разницы диаметров зерна и его топологического эквивалента по модулю к диаметру зерна эквивалента

$$E_g = \frac{\sqrt{(D_g - D_e)^2}}{D_e}. \quad (6)$$

Здесь D_g — диаметр реального зерна; D_e — диаметр зерна эквивалента.

Значения дисперсии и метрического расхождения находим для каждой фазы отдельно, после чего вычисляем их средние значения.

Зернистая структура представляет собой структуру, зерна которой не имеют общих границ. К этому классу структур относится зернистый перлит, который является наиболее показательным его представителем.

Диаметр зерна, дисперсия и метрическое расхождение для этих структур определяются так же, как и для сотовой структуры. Площадь ячейки топологического эквивалента этой структуры S_e рассчитывалась как площадь круга с диаметром, равным среднему значению диаметра зерен D

$$S_e = \pi \left(\frac{D}{2} \right)^2. \quad (7)$$

Количество зерен на единицу площади принималась как объемная доля зерен ω_g

$$\omega_g = \frac{n}{1}, \quad (8)$$

где n — количество зерен на единицу площади (1 мм²).

Игольчатая структура — структура с ОЦТ решеткой, зерна которой имеют форму игл, хаотично расположенных. Естественно, наиболее показательной в этом классе структур является структура мартенсита, хотя сюда также относятся некоторые промежуточные фазы, такие как бейнит и троостит. В данной работе мы рассматриваем не первоначальные размеры зерен аустенита, а размеры и форму пакетов мартенсита (бейнита).

Диаметр зерен этой структуры определялся так же, как и в случае с полосчатой структурой, дисперсия и метрическое расхождение определялись, как и в случае с сотовой и зернистой структурами. Площадь ячейки топологического эквивалента рассчитывали как площадь равностороннего треугольника с диаметром вписанного круга, равным среднему диаметру зерен

$$S_e = \frac{9D\sqrt{3}}{8}, \quad (9)$$

где D — средний диаметр зерен.

Необходимо отметить, что существует еще и пятый класс структур — сложенные структуры, однако вносить его в нашу классификацию мы не можем, поскольку данный тип структур не является самостоятельным, т. е. не может иметь единого топологического эквивалента. Это набор участков структур, отнесенных к другим классам. Естественно, что в данном случае мы определяем параметры каждого из участков этой структуры, а также объемную долю структуры каждого класса в общей структуре как

$$\omega_{\text{стр}} = \frac{S_{\text{стр}}}{S_{\text{общ}}}. \quad (10)$$

Здесь $\omega_{\text{стр}}$ — объемная доля структуры определенного класса; $S_{\text{стр}}$ — ее площадь; $S_{\text{общ}}$ — общая площадь структуры.

Предположение 6. Ранее многие исследователи отмечали связь между микроструктурой стали и ее механическими свойствами на качественном уровне, например, что деформация зерен ведет к понижению пластичности, но при этом неизвестно, насколько [3]. Влияние каждой из величин, указанных в предположении 4, на механические свойства для отдельно взятой стали можно установить путем анализа микроструктуры образцов стали и их механических характеристик (полученных путем механических испытаний) [9].

Уравнения определяющего параметра для названных выше структур получены согласно формализации, изложенной в [10].

Для сотовой структуры:

$$P = x_1D + x_2\delta + x_3E, \quad (11)$$

где P — параметр (выбранное к рассмотрению механическое свойство); x_1, x_2, x_3 — вклад диаметра, дисперсии и метрического расхождения в значение параметра, соответственно.

Для полосчатой структуры:

$$P = \omega_f(x_1D_f + x_2\delta_f + x_3E_f) + (1 - \omega_f)(x_4D_c + x_5\delta_c + x_6E_c). \quad (12)$$

Данная формула состоит из двух частей, каждая из которых построена так, как и в предыдущем примере. Величина ω_f указывает на процентное содержание феррита в структуре, поэтому является уравнивающим коэффициентом для обеих частей уравнения, показывающих влияние феррита и цементита, соответственно.

Для зернистой структуры:

$$P = \omega_g(x_1D + x_2\delta + x_3E). \quad (13)$$

В данном уравнении использовался тот же принцип, что и в (11), для определения влияния свойств зерен на определяющий параметр, величина ω_g указывает на количество зерен.

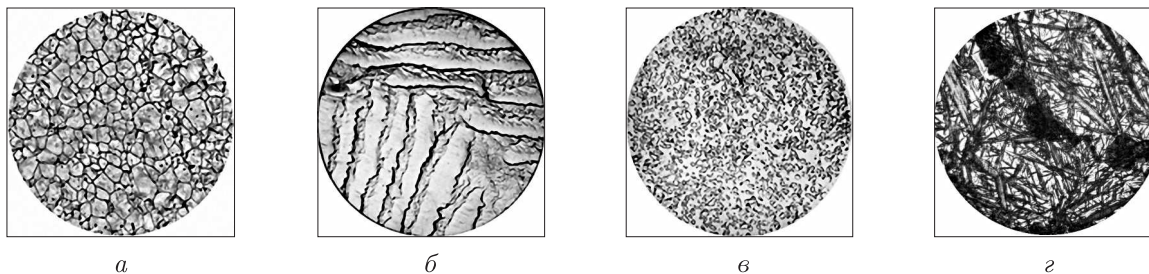


Рис. 3. Микроструктуры исследуемых сталей: *a* — 36НХТЮ; *б* — сталь 80; *в* — У10; *г* — У6

Для игольчатой структуры уравнение имеет следующий вид:

$$P = x_1D + x_2\delta + x_3E. \quad (14)$$

Проверка работоспособности предложенного алгоритма определения механических свойств проводилась при исследовании микроструктур различных сталей, каждой из которых отвечал определенный класс топологического эквивалента (рис. 3) [11]. Определяющим параметром для сотовой и полосчатой структур был выбран предел текучести, а для зернистой и игольчатой — предел прочности.

Чтобы максимально упростить и наиболее точно подсчитать основные топологические характеристики структуры и определяющего параметра, была разработана программа, работающая согласно алгоритму, основанному на правилах анализа микроструктур, приведенных выше.

Данные для вычисления определяющего параметра для показанных на рис. 3 микроструктур приведены в табл. 1. Определяющими параметрами для данных исследований были выбраны наиболее показательные величины для каждой из сталей: для сталей 36НХТЮ и стали 80 — предел текучести, для сталей У10 и У6 — предел прочности.

Поскольку отсутствуют исследования, в полной мере отображающие вклад каждой из величин, приведенных в табл. 1, в определяющий параметр, допустимо использование экспертного метода (см. например [10]). Графическое представление зависимости определяющего параметра от этих величин, по мнению экспертов, отображено на рис. 4, откуда следует, что при увеличении размера зерен или их деформации, или значительной разнице в размерах зерен на единицу площади структуры предел текучести стали уменьшается, так как уменьшается ее пластичность [9].

Таблица 1

Величина	36НХТЮ	Сталь 80		У10	У6
Класс структуры	Сотовая	Полосчатая		Зернистая	Игольчатая
Составляющие структуры	Аустенит	Пластинчатый перлит		Зернистый цементит	Троостит закалки, мартенсит
Термообработка	Нормализация	Горячая деформация (ковка и отжиг)		Отжиг	Закалка с 800 °С в воду
Увеличение	×250	×1300		×300	×600
		Ф	Ц		
Диаметр зерен	12 мкм	0,8 мкм	1,1 мкм	2,8 мкм	1,3 мкм
Дисперсия	0,33	0,13	0,13	0,26	0,4
Метрическое расхождение	0,24	0,11	0,14	0,31	0,21
Объемная доля	—	32%	68%	41%	—

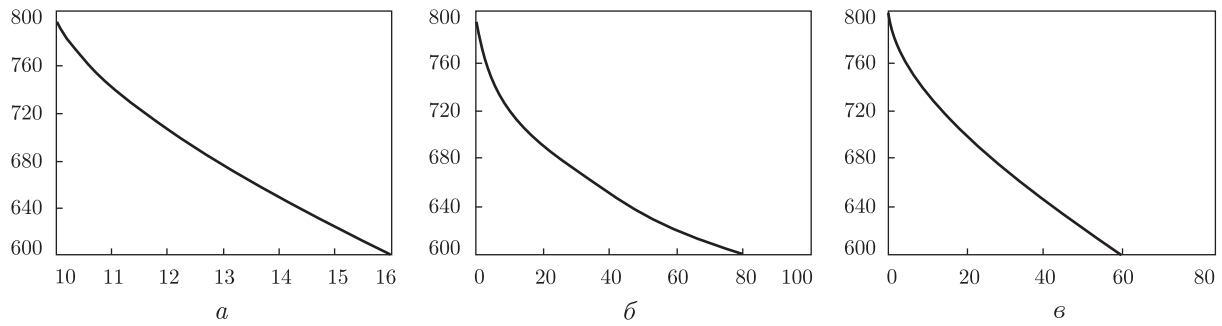


Рис. 4. Зависимости предела текучести (ось Y) от основных величин структуры (ось X) для стали 36НХТЮ: a — диаметр зерен; b — дисперсия; c — метрическое расхождение

Таблица 2

Марка стали	Данные исследований		Справочные данные	
	Предел текучести σ_T , МПа	Предел прочности σ_B , МПа	Предел текучести σ_T , МПа	Предел прочности σ_B , МПа
36НХТЮ	690	—	600–800	—
Сталь 80	932	—	900–1000	—
У10	—	786	—	700–800
У6	—	612	—	550–650

С применением приведенных на рис. 4 закономерностей вклад каждой величины x в параметр P определяется [8]

$$x = \frac{P}{3y}, \quad (15)$$

где x — вклад величины в определяющий параметр P ; y — численное значение параметра.

Все результаты опытов, а также справочные данные [12] для сравнения их с результатами этих опытов представлены в табл. 2.

Таким образом, приведенный алгоритм позволяет производить недорогой и быстрый анализ качества стали на предпроектной стадии ее исследования.

1. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Ткаченко А. Н., Ткаченко В. А.* Пути решения задач идентификации качественных характеристик материалов на основе экспертных систем // Доп. НАН України. – 2006. – № 9. – С. 100–103.
2. *Управление риском. Риск. Устойчивое развитие. Синергетика* // URL: <http://www.keldysh.ru/papers/2003/source/book/gmalin/gl11.htm>.
3. *Фридман Я. Б.* Механические свойства металлов. В 2-х ч. Ч. 1. Деформация и разрушение. – Москва: Машиностроение, 1974. – 472 с.
4. *Фридман Я. Б.* Механические свойства металлов. В 2-х ч. Ч. 2. Механические испытания. Конструкционная прочность. – Москва: Машиностроение, 1974. – 368 с.
5. *Smith C. S.* Transactions of the A. S. M, in 1952. – Edward deMille Campbell Memorial Lecture // Microstructure. 1953. – 45. P. 533–575.
6. *Александров А. Д.* Внутренняя геометрия выпуклых поверхностей. – Москва: Гостехиздат, 1948. – 387 с.
7. *Погорелов А. В.* Внешняя геометрия выпуклых поверхностей. – Москва: Наука, 1969. – 760 с.
8. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике. Изд. пятое. – Москва: ГИТТЛ, 1955. – 608 с.
9. *Жуковец И. И.* Механические испытания металлов. – Москва: Металлургия, 1986. – 570 с.

10. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Жевтило Е. Ю.* Эмпирическое прогнозирование качественных характеристик материала на предпроектной стадии // Доп. НАН України. – 2009. – № 6. – С. 103–108.
11. *База данных микроструктур металлов и сплавов* // URL:<http://www.microstructure.ru>.
12. *Кнорозов Б. В., Усова Л. Ф., Третьяков А. В. и др.* Технология металлов и материаловедение. – Москва: Металлургия, 1987. – 800 с.

*Приднепровская государственная академия
строительства и архитектуры, Днепрпетровск*

Поступило в редакцию 07.09.2009

V. I. Bol'shakov, Yu. I. Dubrov, O. S. Kasian

Steel microstructure as a defining parameter in the prediction its mechanical properties

A method of prediction of steel mechanical properties, based on its microstructure analysis with regard for a steel grain shape and a size is developed. An algorithm of this method is realized in a computer software. This algorithm gives an opportunity to make a cheap fast steel quality analysis even on the pre-project stage of studies.