

А. А. Кононенко, А. В. Пучиков, О. В. Кукса, А. Н. Кукса,  
И. Р. Снигура

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ЭКСПЕРТНОЙ ОЦЕНКИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНСТРУКЦИОННЫХ СТАЛЕЙ

*Институт черной металлургии НАН Украины*

Целью исследования является разработка адаптированной методики оценки влияния химического состава на свойства многокомпонентных сталей и готового проката. Изложен подход к прогнозированию механических свойств конструкционных сталей с учетом параметров термообработки, базирующийся на концепции направленной химической связи при описании межатомного взаимодействия в расплаве. Используются разработанные в ИЧМ НАНУ физико-химические модели структуры расплавов, связывающие между собой их состав, структуру и свойства. Представление поэлементного состава многокомпонентных сталей в интегральных параметрах межатомного взаимодействия позволяет сократить параметричность моделей. Выполнена оценка роли различных парных взаимодействий легирующих, микролегирующих и примесных элементов в формировании свойств сталей и сплавов. Проведен факторный анализ, выполнена структуризация химсостава сталей на различные подсистемы. Показано, что наиболее значимыми подсистемами являются матричная  $m$  (C, Si, Mn) и микролегирующая  $ml$  (Cr, Mo, V, Ni, Ti, Nb). Для двух выборок конструкционных сталей, имеющих существенные технологические различия и особенности, (1-я группа - низколегированные стали: СтЗсп, ВСтЗсп, ВМСтЗсп; 2-я группа: 09Г2ФБ, 10ХСНД, 15ХСНД, 14Г2САФ, 14Г2АФ, 16Г2АФ) получены зависимости типа:

$$\sigma_B(\sigma_{0,2}, \delta_5) = f(\text{параметры межатомного взаимодействия}, V_{\text{охл}})$$

Показано, что наиболее значимыми параметрами для расчета  $\sigma_B$ ,  $\sigma_{0,2}$  и  $\delta_5$  матричной подсистемы  $m$  являются интегральные параметры межатомного взаимодействия  $d$  и  $Z^Y$ ,  $d_m$  и  $\text{tg}\alpha_m$ , а для микролегирующей подсистемы  $ml - Z^Y_{ml}$  и  $d_{ml}$ , а также скорость охлаждения  $V_{\text{охл}}$  для обеих подсистем. Разработанные полужемпирические модели рекомендуются для экспертной оценки механических свойств конструкционных сталей и для использования в системах автоматизированного управления технологическими процессами.

**Ключевые слова:** конструкционные стали, механические свойства, прогнозные модели, параметры межатомного взаимодействия, параметры термообработки

### Современное состояние вопроса.

Стали, как конструкционные материалы, имеют большие возможности повышения их качества и улучшения всех служебных свойств за счет совершенствования технологии их производства, снижения вредных примесей, легирования и микролегирования с учетом физико-химической природы и физической структуры материалов. К конструкционным сталям, как правило, предъявляют следующие требования: сочетание высокой конструкционной прочности и

*«Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии»,  
Сборник научных трудов ИЧМ. – 2018. - Вып. 32*

достаточной вязкости; хорошие технологические свойства; экономичность при максимальной адаптации к собственным ресурсам.

Для решения этих задач в ИЧМ НАНУ используется физико-химическая модель структуры расплавов, которая базируется на прикладной модели направленной химической связи, разработанной проф. Э.В. Приходько [1-9]. На ее основе получены модели структуры многокомпонентных металлических расплавов [3,4], определены физико-химические критерии [5], характеризующие микронеоднородность их строения, заложенные в основу методологии оценки и учета эффективности комплексного легирования сталей и сплавов [6-7]. Эти разработки развивают и конкретизируют ряд плодотворных идей в области физического материаловедения, связанных с оценкой роли различных парных взаимодействий легирующих, микролегирующих и примесных элементов в формировании свойств сталей и сплавов.

**Целью исследования** является разработка адаптированной методики оценки влияния химического состава на свойства многокомпонентных сталей и готового проката, полученного из них. Для достижения указанной цели необходимо решение следующих задач:

- структуризация химического состава стали на подсистемы (матричную, легирующую, микролегирующую и примесную);

- определение для каждой из подсистем численных значений основных модельных параметров межатомного взаимодействия;

- сопоставление этих параметров и их сочетаний с основными физико-химическими свойствами и на этом основании формирование системы ограничений на диапазоны колеблемости сопоставляемых величин, включая концентрации отдельных компонентов и значения модельных параметров;

- согласование информации с заданной системой ограничений с оптимальными концентрациями компонентов с помощью методов теории оптимизации.

Учитывая важность при формировании механических свойств конструкционных сталей показателей термообработки (параметры закалки, отпуска, скорость охлаждения и т.п.) наиболее эффективными прогнозными моделями являются комбинированные физико-химические модели. Они содержат в себе как параметры межатомного взаимодействия, характеризующие структурное и зарядовое состояние многокомпонентных металлических систем, так и параметры термообработки.

#### **Изложение основных материалов исследования.**

Для прогнозирования механических свойств конструкционных сталей создана репрезентативная выборка промышленных данных с широким варьированием состава и свойств ( $N > 500$ ) (фрагмент выборки – табл. 1).

Таблица 1 Средние данные по выборке промышленных данных ((min-max)/ $X_{\text{средн}}$ )

Сталь	C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni
09Г2С	<u>0,07-0,12</u> 0,094	<u>0,5-0,72</u> 0,58	<u>1,3-1,64</u> 1,43	<u>0-0,037</u> 0,023	<u>0,003-0,039</u> 0,02	<u>0-0,06</u> 0,032	<u>0-0,13</u> 0,035
Ст3сп	<u>0,14-0,22</u> 0,189	<u>0,12-0,9</u> 0,272	<u>0,39-0,99</u> 0,511	<u>0,012-0,027</u> 0,017	<u>0,016-0,028</u> 0,023	<u>0-0,03</u> 0,003	<u>0-0,03</u> 0,0033
09Г2ФБ	<u>0,09-0,09</u> 0,09	<u>0,2-0,2</u> 0,2	<u>1,64-1,64</u> 1,64	<u>0,011-0,011</u> 0,011	<u>0,006-0,006</u> 0,006	<u>0,03-0,03</u> 0,03	<u>0,02-0,02</u> 0,02
10ХСНД	<u>0,08-0,1</u> 0,091	<u>0,85-1,03</u> 0,9	<u>1,64-1,64</u> 1,64	<u>0,011-0,011</u> 0,011	<u>0,006-0,006</u> 0,006	<u>0,03-0,03</u> 0,03	<u>0,02-0,02</u> 0,02
15ХСНД	<u>0,14-0,14</u> 0,14	<u>0,47-0,47</u> 0,47	<u>0,55-0,55</u> 0,55	<u>0,013-0,013</u> 0,013	<u>0,017-0,017</u> 0,017	<u>0,7-0,7</u> 0,7	<u>0,47-0,47</u> 0,47
12Г2С	<u>0,15-0,15</u> 0,15	<u>0,63-0,63</u> 0,63	<u>1,47-1,47</u> 1,47	<u>0,017-0,017</u> 0,017	<u>0,012-0,012</u> 0,012	<u>0,09-0,09</u> 0,09	<u>0,04-0,04</u> 0,04
14Г2САФ	<u>0,11-0,12</u> 0,116	<u>0,8-0,83</u> 0,817	<u>1,4-1,44</u> 1,422	<u>0,015-0,022</u> 0,019	<u>0,012-0,021</u> 0,017	–	<u>0-0,05</u> 0,029
14Г2АФ	<u>0,13-0,17</u> 0,145	<u>0,38-0,46</u> 0,425	<u>1,29-1,45</u> 1,36	<u>0,014-0,02</u> 0,018	<u>0,004-0,023</u> 0,0176	–	–
16Г2АФ	<u>0,15-0,17</u> 0,155	<u>0,35-0,51</u> 0,385	<u>1,31-1,49</u> 1,38	<u>0,018-0,023</u> 0,0196	<u>0,013-0,027</u> 0,021	–	–
10Г2С1	<u>0,085-0,1</u> 0,093	<u>0,85-0,93</u> 0,903	<u>1,44-1,49</u> 1,46	<u>0,022-0,022</u> 0,022	<u>0,02-0,02</u> 0,02	<u>0,06-0,06</u> 0,06	<u>0,13-0,13</u> 0,13
10Г2С1Д	<u>0,088-0,097</u> 0,092	<u>0,86-0,91</u> 0,875	<u>1,39-1,49</u> 1,44	<u>0,022-0,022</u> 0,022	<u>0,02-0,02</u> 0,02	<u>0,06-0,06</u> 0,06	<u>0,13-0,13</u> 0,13
ВСт3сп	<u>0,19-0,19</u> 0,19	<u>0,17-0,17</u> 0,17	<u>0,44-0,44</u> 0,44	<u>0,016-0,016</u> 0,016	<u>0,025-0,025</u> 0,025	–	–
ВМСт3сп	<u>0,16-0,2</u> 0,18	<u>0,22-0,29</u> 0,255	<u>0,48-0,57</u> 0,525	<u>0,012-0,015</u> 0,0135	<u>0,03-0,034</u> 0,032	<u>0,05-0,05</u> 0,05	<u>0,15-0,15</u> 0,15
17Г1СУ	<u>0,15-0,15</u> 0,15	<u>0,51-0,51</u> 0,51	<u>1,25-1,25</u> 1,25	<u>0,013-0,013</u> 0,013	<u>0,015-0,015</u> 0,015	<u>0,05-0,05</u> 0,05	<u>0,27-0,27</u> 0,27

Продолжение табл.1

Тк.п., °C	Ta, °C	Voхл., °C	$\sigma_B$ , Мпа	$\sigma_{0,2}$ , Мпа	$\delta$ , %	Z <sup>Y</sup>	d	tga
<u>810-1100</u> 963	<u>0-950</u> 134	<u>0,12-200</u> 4,024	<u>423-627</u> 493	<u>270-481</u> 327	<u>19-38</u> 30,15	<u>1.2009-1,2153</u> 1,2072	<u>2,7878-2,8007</u> 2,7958	<u>0,088069-0,088175</u> 0,088133
<u>910-1025</u> 964	<u>0-950</u> 513	<u>0,56-700</u> 119,1	<u>382-1183</u> 558	<u>250-928</u> 405	<u>4,5-39,2</u> 26,08	<u>1.1624-1,1653</u> 1,1643	<u>2,7916-2,8032</u> 2,7955	<u>0,08817-0,08826</u> 0,08823
<u>740-820</u> 891	–	<u>0,56-14,6</u> 6,84	<u>635-773</u> 675	<u>510-602</u> 562	<u>19,4-24,8</u> 23,09	<u>1.1976-1,1976</u> 1,1976	<u>2,8091-2,8091</u> 2,8091	<u>0,088075-0,088075</u> 0,088075
<u>750-1025</u> 896	<u>0-950</u> 573	<u>0,28-28,5</u> 12,083	<u>499-690</u> 562	<u>330-540</u> 422	<u>16-35</u> 27,25	<u>1.2341-1,2424</u> 1,2372	<u>2,7833-2,7891</u> 2,7865	<u>0,088213-0,088311</u> 0,088247
<u>860-860</u> 860	<u>915-915</u> 915	<u>0,56-12,5</u> 6,53	<u>499-570</u> 532	<u>349-399</u> 378	<u>25-28</u> 26,63	<u>1.2169-1,2169</u> 1,2169	<u>2,7904-2,7904</u> 2,7904	<u>0,088249-0,088249</u> 0,088249
<u>860-860</u> 860	<u>0-930</u> 740	<u>0,44-23,75</u> 10,79	<u>490-590</u> 534	<u>345-425</u> 381	<u>22-30</u> 27,67	<u>1.2161-1,2161</u> 1,2161	<u>2,7856-2,7856</u> 2,7856	<u>0,088219-0,088219</u> 0,088219
<u>910-990</u> 956	<u>0-950</u> 543	<u>4,67-155</u> 90,67	<u>571-1305</u> 875	<u>387-1142</u> 700	<u>10-27</u> 18,62	<u>1.2175-1,2219</u> 1,2201	<u>2,7845-2,7869</u> 2,7855	<u>0,088131-0,088155</u> 0,088144
<u>860-1025</u> 923	<u>915-950</u> 928	<u>0,16-17,5</u> 7,22	<u>543-649</u> 591	<u>397-559</u> 466	<u>20-27</u> 23,85	<u>1.1991-1,2084</u> 1,2037	<u>2,7866-2,7943</u> 2,7912	<u>0,088151-0,088249</u> 0,088191
<u>860-860</u> 860	<u>915-920</u> 915	<u>8,75-22,5</u> 13,7	<u>599-740</u> 636	<u>470-630</u> 531	<u>21-28</u> 23	<u>1.2017-1,2102</u> 1,2033	<u>2,7881-2,792</u> 2,7905	<u>0,088187-0,088236</u> 0,088207
<u>1025-1025</u> 1025	<u>950-950</u> 950	<u>0,16-0,7</u> 0,41	<u>509-536</u> 523	<u>348-390</u> 376	<u>27-31</u> 28,67	<u>1.2208-1,2251</u> 1,2235	<u>2,7853-2,7888</u> 2,7868	<u>0,088171-0,088193</u> 0,088182
<u>1025-1025</u> 1025	<u>950-950</u> 950	<u>0,16-0,7</u> 0,38	<u>512-537</u> 528	<u>371-402</u> 383	<u>27-32</u> 28,82	<u>1.2203-1,2227</u> 1,2217	<u>2,787-2,7884</u> 2,7878	<u>0,088176-0,088184</u> 0,08818
<u>920-920</u> 920	–	<u>26,7-26,7</u> 26,7	<u>474-566</u> 522	<u>331-393</u> 363	<u>18-26</u> 23,5	<u>1.1712-1,1712</u> 1,1712	<u>2,7898-2,7898</u> 2,7898	<u>0,088312-0,088312</u> 0,088312
<u>990-990</u> 990	–	<u>4-155</u> 70,5	<u>469-693</u> 548	<u>280-505</u> 367	<u>11,1-25,2</u> 15,93	<u>1.1787-1,1811</u> 1,1799	<u>2,787-2,7913</u> 2,7892	<u>0,088248-0,088293</u> 0,08827
<u>860-1025</u> 959	<u>0-915</u> 730	<u>0,56-23,68</u> 9,808	<u>530-561</u> 546	<u>367-382</u> 374	<u>25-32</u> 29,2	<u>1.2066-1,2066</u> 1,2066	<u>2,789-2,789</u> 2,789	<u>0,08821-0,08821</u> 0,08821

Классическим вариантом оценки различных свойств металлических расплавов является построение зависимостей с использованием поэлементного химического состава. Данный метод удобен тем, что в практике металлургического производства замеры химического состава стали делаются в штатном режиме как по ходу плавки, так и при ее выпуске. Однако построение адекватных моделей связано с их неустойчивостью и четкой привязкой к текущим массивам промышленных данных.

Использование разработанной в ИЧМ НАНУ физико-химической модели структуры расплавов, связывающей между собой состав, структуру и свойства расплавов, позволяет сократить параметричность моделей, в которых поэлементный состав многокомпонентных сталей выражен в интегральных параметрах межатомного взаимодействия. Предварительно, по выборке промышленных данных проведен факторный анализ, на основании которого выполнена структуризация химсостава сталей на различные подсистемы, наиболее значимыми из которых оказались матричная  $m$  (C, Si, Mn) и микролегирующая  $ml$  (Cr, Mo, V, Ni, Ti, Nb). На рис. 1 представлены результаты структуризации химического состава конструкционных сталей.

↓ $F_1$	↓ $F_2$	↓ $F_3$
<u>Матричная <math>m</math></u> C= 0,85 Si= 0,67 Mn= 0,72	<u>Микролегирующая <math>ml</math></u> Cr= 0,96      V= 0,76 Ni= 0,94      Ti= 0,74 Cu= 0,96      Nb= 0,82 Mo= 0,85	<u>Примесная</u> P= 0,53 S= 0,60

Рисунок 1 – Значимые нагрузки на интегральные факторы

Необходимо отметить, что скорость охлаждения  $V_{\text{охл.}}$  ( $^{\circ}\text{C}/\text{сек}$ ) является самым значимым параметром в исследуемой выборке промышленных данных (парная связь с  $\sigma_B$  и  $\sigma_{0,2}$  составляет более 0,4 для большинства марок конструкционных сталей). У профилей с небольшой толщиной, согласно механизму прокаливаемости, более существенны изменения, происходящие в поверхностном слое (прочностные характеристики увеличиваются). В зависимости от толщины проката скорость охлаждения назначается в оптимальных для данной марки стали пределах (например, при упрочняющей термообработке, со значительным повышением  $\sigma_B$  и  $\sigma_T$ ), либо же формируется естественным образом во время остывания (например, в горячекатаном состоянии).

На рис. 2 представлена структурно-зарядовая диаграмма

распределения конструкционных сталей, вошедших в выборку промышленных данных. Легированные конструкционные стали, по мере возрастания содержания основных легирующих и микролегирующих элементов, преимущественно группируются в левой верхней части рисунка, с увеличением  $Z^Y$ , что свидетельствует об образовании устойчивых к внешнему воздействию прочных межатомных связей и, как следствие, увеличение прочностных показателей конструкционных сталей  $\sigma_B$  и  $\sigma_{0,2}$ .

Учитывая существенные технологические различия и особенности, для двух выборок конструкционных сталей (1я группа (низколегируемые стали): СтЗсп, ВСтЗсп, ВМСтЗсп, 2я группа: 09Г2ФБ, 10ХСНД, 15ХСНД, 14Г2САФ, 14Г2АФ, 16Г2АФ) отдельно получены следующие зависимости (рис. 3):

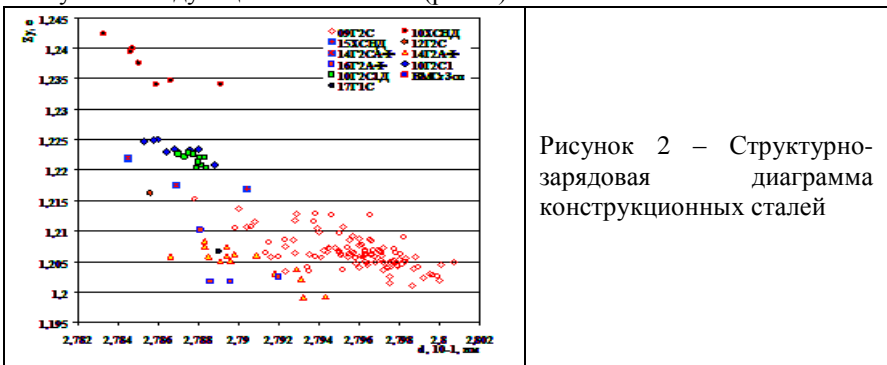


Рисунок 2 – Структурно-зарядовая диаграмма конструкционных сталей

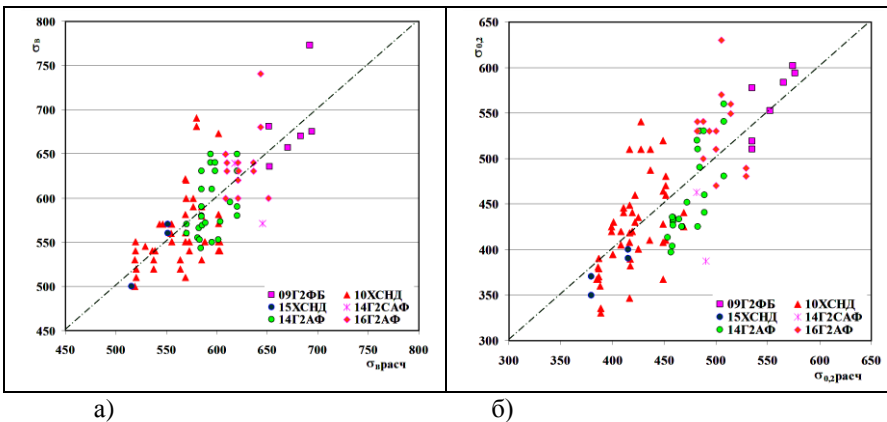


Рисунок 3 – Сравнительный анализ экспериментальных и расчетных значений  $\sigma_B$  (а – (4)) и  $\sigma_{0,2}$  (б – (5)) для конструкционных сталей Для 1й группы:

$$\sigma_B, \text{ МПа} = -2469,6 + 6028,3 \cdot Z^Y - 827,53 \cdot d_m - 25288 \cdot \text{tg}\alpha_m + 0,37 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,80) \quad (1);$$

$$\sigma_{0,2}, \text{ МПа} = -3507,9 + 4756,4 \cdot Z^Y - 370,9 \cdot d_m - 10372 \text{tg}\alpha_m + 0,4277 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,80) \quad (2)$$

$$\delta_5, \% = 9456 - 2640,1 \cdot Z^Y - 2042,3 \cdot d - 6208,7 \cdot \text{tg}\alpha_m - 0,0248 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,65) \quad (3)$$

Для 2й группы:

$$\sigma_B, \text{ МПа} = -5677,6 + 1324,7 \cdot d_m + 43291 \cdot \text{tg}\alpha_m - 221,87 \cdot d_{ml} + 3,2633 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,87) \quad (4)$$

$$\sigma_{0,2}, \text{ МПа} = -6921,3 + 1500,4 \cdot d_m + 50147 \cdot \text{tg}\alpha_m - 188,2 \cdot d_{ml} + 3,075 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,88) \quad (5)$$

$$\delta_5, \% = 263,13 - 33,847 \cdot d_m - 1584,3 \cdot \text{tg}\alpha_m - 5,7 \cdot d_{ml} - 0,08782 \cdot V_{\text{охл.}}$$

$$(r = 0,70) \quad (6)$$

В настоящее время ведутся работы по пополнению баз данных для каждой из групп конструкционных сталей, с учетом их технологических особенностей и параметров термообработки. По мере накопления новых данных о составе и свойствах конструкционных сталей представленные модели для каждой из их групп будут уточнены.

## Выводы

1. На основе анализа представительной выборки промышленных данных о составе и свойствах конструкционных сталей разработаны комбинированные физико-химические модели их механических свойств, учитывающие межатомное взаимодействие в их расплавах и скорость охлаждения  $V_{\text{охл.}}$ .

2. Наиболее значимыми параметрами при расчете  $\sigma_B$ ,  $\sigma_{0,2}$  и  $\delta_5$  являются интегральные параметры межатомного взаимодействия  $d$  и  $Z^Y$  (полный химсостав),  $d_m$  и  $\text{tg}\alpha_m$  (матричная подсистема – C, Si, Mn),  $Z^Y_{ml}$  и  $d_{ml}$  (микролегирующая подсистема ml – Cr, Mo, V, Ni, Ti, Nb), а также скорость охлаждения  $V_{\text{охл.}}$ .

3. Разработанные полуэмпирические модели рекомендуются для использования в системах АСНИ и АСУТП для экспертной оценки механических свойств конструкционных сталей.

## Библиографический список

1. Приходько Э.В. Металлохимия многокомпонентных систем. – М.: Металлургия, 1995. – 320с.
2. Приходько Э.В. Методика определения параметров направленного межатомного взаимодействия в молекулах и кристаллических соединениях // Металлофизика и новейшие технологии, 1995. – т.17. №11. – С.54-62.

3. Приходько Э.В., Петров А.Ф. Влияние параметров направленного межатомного взаимодействия на термодинамические свойства металлических расплавов // Процессы литья, 1995. – №1. – С.26-38
4. Приходько Э.В., Гармаш Л.И. Влияние параметров направленной химической связи в расплавах на структуру и свойства кристаллизующихся соединений // Расплавы, 1996.– №2. – С.62-68
5. Приходько Э.В., Петров А.Ф. Физико-химические критерии для оценки степени микронеоднородности металлических расплавов // Металлофизика и новейшие технологии, 1998. –т.20. –№7. – С.64-74
6. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов / Э. В. Приходько. Киев: Наукова думка. –1995. –292 с.
7. Приходько Э.В., Мороз Ф.В. Физико-химические критерии для "свертки" информации о составе расплавов и соединений металлов. // Сб. "Фундаментальные исследования физико-химии металлических расплавов" .– М.: Академкнига. – 2002. –С.275-284
8. Тогобицкая Д.Н. Критерии и модели для прогнозирования механических свойств стали для железнодорожных колес / Д.Н.Тогобицкая, А.И.Бабаченко, А.С.Козачек, А.А.Кононенко, Л.А.Головко // Математическое моделирование. – № 1 (32). – 2015. –С.67-68.
9. Приходько Э.В. Свойства металлургических расплавов – следствие их состава и структуры / Э. В. Приходько, Д.Н. Тогобицкая // Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины "Современные проблемы физического материаловедения". – Вып.26. –2017. –С.124-138.

## Reference

1. Prikhod'ko E.V. Metallokhimiya mnogokomponentnykh sistem. – М.: Metallurgiya, 1995. – 320s.
2. Prikhod'ko E.V. Metodika opredeleniya parametrov napravlennoho mezhatomnogo vzaimodeystviya v molekulyakh i kristallicheskiykh soyedineniyakh // Metallofizika i noveyshiye tekhnologii, 1995. – t.17. №11. – S.54-62.
3. Prikhod'ko E.V., Petrov A.F. Vliyaniye parametrov napravlennoho mezhatomnogo vzaimodeystviya na termodinamicheskiye svoystva metallischeskiykh rasplavov // Protssesy lit'ya, 1995. – №1. – S.26-38.
4. Prikhod'ko E.V., Garmash L.I. Vliyaniye parametrov napravlennoy khimicheskoy svyazi v rasplavakh na strukturu i svoystva kristallizuyushchikhsya soyedineniy // Rasplavy, 1996.– №2. – S.62-68.
5. Prikhod'ko E.V., Petrov A.F. Fiziko-khimicheskiye kriterii dlya otsenki stepeni mikroneodnorodnosti metallischeskiykh rasplavov // Metallofizika i noveyshiye tekhnologii, 1998. –t.20. –№7. – S.64-74.
6. Prikhod'ko E. V. Effektivnost' kompleksnogo legirovaniya stali i splavov / E. V. Prikhod'ko. Kiyev: Naukova dumka. –1995. –292 s.
7. Prikhod'ko E.V., Moroz F.V. Fiziko-khimicheskiye kriterii dlya "svertki" informatsii o sostave rasplavov i soyedineniy metallov. // Sb. "Fundamental'nyye issledovaniya fiziko-khimii metallischeskiykh rasplavov" .–М.: Akademkniga. – 2002. –S.275-284.



8. *Togobitskaya D.N.* Kriterii i modeli dlya prognozirovaniya mekhanicheskikh svoystv stali dlya zheleznodorozhnykh koles / D.N. Togobitskaya, A.I. Babachenko, A.S. Kozachek, A.A. Kononenko, L.A. Golovko // *Matematicheskoye modelirovaniye*. – № 1 (32). – 2015. –S.67-68.
10. *Prikhod'ko E.V.* Svoystva metallurgicheskikh rasplavov – sledstviye ikh sostava i struktury / E. V. Prikhod'ko, D.N. Togobitskaya // *Trudy Instituta problem materialovedeniya im. I.N. Frantsevicha NAN Ukrainy "Sovremennyye problemy fizicheskogo materialovedeniya"*. – Вып.26. –2017. –S.124-138.

*А. А. Кононенко, О. В. Пучіков, О. В. Кукса, А. Н. Кукса, І. Р. Снізура*

**Фізико-хімічні моделі для експертної оцінки механічних властивостей конструкційних сталей**

Метою дослідження є розробка адаптованої методики оцінки впливу хімічного складу на властивості багатокомпонентних сталей і готового прокату. Викладено підхід до прогнозування механічних властивостей конструкційних сталей з урахуванням параметрів термообробки, що базується на концепції спрямованої хімічного зв'язку при описі міжатомної взаємодії в розплаві. Використано розроблені в ІЧМ НАНУ фізико-хімічні моделі структури розплавів, що зв'язують між собою їх склад, структуру і властивості. Подання поелементного складу багатокомпонентних сталей в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії дозволяє скоротити параметричного моделей. Виконано оцінку ролі різних парних взаємодій легуючих, мікролегуючих і домішкових елементів у формуванні властивостей сталей і сплавів. Проведено факторний аналіз, виконана структуризація хімічного складу сталей на різні підсистеми. Показано, що найбільш значущими підсистемами є матрична  $m$  (C, Si, Mn) і мікролегующая  $ml$  (Cr, Mo, V, Ni, Ti, Nb). Для двох вибірок конструкційних сталей, що мають суттєві технологічні відмінності і особливості (1 група, низьколеговані сталі: СтЗсп, ВСтЗсп, ВМСтЗсп; 2 група: 09Г2ФБ, 10ХСНД, 15ХСНД, 14Г2САФ, 14Г2АФ, 16Г2АФ) отримані залежності типу:

$\sigma_B(\sigma_{0,2}, \delta_5) = f(\text{параметри міжатомної взаємодії, } V_{\text{охл}})$

Показано, що найбільш значущими параметрами для розрахунку  $\sigma_B$ ,  $\sigma_{0,2}$  і  $\delta_5$  матричної підсистеми  $m$  є інтегральні параметри міжатомної взаємодії  $d$  і  $Z^Y$ ,  $d_m$  і  $\text{tg}a_m$ , а для мікролегующої підсистеми  $ml$  -  $Z^Y ml$  і  $d_{ml}$ , а також швидкість охолодження  $V_{\text{охл}}$  для обох підсистем. Розроблені напівемпіричні моделі рекомендуються для експертної оцінки механічних властивостей конструкційних сталей і для використання в системах автоматизованого управління технологічними процесами.

**Ключові слова:** конструкційні сталі, механічні властивості, прогнозні моделі, параметри міжатомної взаємодії, параметри термообробки

*A. A. Kononenko, A. V. Puchikov, O. V. Kuksa, A. N. Kuksa, I. R. Snigur*

**Physical and chemical models for expert evaluation of mechanical properties of structural steels**

The aim of the study is to develop an adapted methodology for assessing the influence of the chemical composition on the properties of multicomponent steels and finished rolled products. An approach to predicting the mechanical properties of structural steels with regard to heat treatment parameters, based on the concept of a directed chemical bond in the description of interatomic interaction in the melt, is presented. The physico-chemical models of the structure of the melts, which interconnect their composition, structure, and properties, were developed in the Iron and Steel Institute of NAS Ukraine. The representation of the element-by-element composition of multicomponent steels in the integral parameters of the interatomic interaction makes it possible to reduce the parametricity of the models. The role of various pairing interactions of alloying, microalloying and impurity elements in the formation of properties of steels and alloys was evaluated. A factor analysis has been carried out, the chemical composition of the steel has been structured into various subsystems. It is shown that the most significant subsystems are the matrix  $m$  (C, Si, Mn) and microalloying  $ml$  (Cr, Mo, V, Ni, Ti, Nb). For two samples of structural steels with significant technological differences and features (1-st group - low alloyed steels: St3sp, VSt3sp, VMSt3sp; 2-nd group: 09Г2ФБ, 10ХСНД, 15ХСНД, 14Г2САФ, 14Г2АФ, 16Г2АФ) dependencies of the type are obtained:  $\sigma_B (\sigma_{0.2}, \delta_5) = f$  (interatomic interaction parameters,  $V_{cool}$ ).

It is shown that the most important parameters for calculating the  $\sigma_B$ ,  $\sigma_{0.2}$  and  $\delta_5$  matrix subsystem  $m$  are the integral parameters of the interatomic interaction  $d$  and  $Z^Y$ ,  $d_m$  and  $tg\alpha_m$ , and for the microalloying subsystem  $ml$  -  $Z^Y_{ml}$  and  $d_{ml}$ , as well as the cooling rate  $V_{cool}$  for both subsystems. The developed semi-empirical models are recommended for expert assessment of the mechanical properties of structural steels and for use in automated control systems and automated process control systems.

**Keywords: structural steels, mechanical properties, predictive models, interatomic interaction parameters, heat treatment parameters**

*Статья поступила в редакцию сборника 07.12.2018 года, прошла внутреннее и внешнее рецензирование (Протокол заседания редакционной коллегии сборника №1 от 26 декабря 2018 года)  
Рецензенты: д.т.н., проф. Л.В.Камкина, д.т.н., проф. Д.Н.Тогобицкая*