

DOI:

UDC 621.971.2

B.P. Sereda, Doctor of Tech. Sci.

D.B. Sereda, Cand. Tech. Sci.

V.I. Voloh, postgraduate

Dniprovsky State Technical University, Kamianske

SIMULATION OF THERMAL PROCESS FOR ULTRA-LOW CARBON STEEL IN THE CONDITIONS OF SELF-PROPAGATING HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS

The mathematical modeling of the thermal process of forming the Armko-iron structure with the purpose of increasing the hardness and choosing the optimal charge composition is considered. Investigation of the mechanism of thermal process formation for ultra-low-alloy steel used the method of thermodynamic analysis of possible reactions between system components. For the thermal process, a universal program for the calculation of multicomponent heterogeneous TERRA systems based on the ASTRA-4 program is used. Unlike traditional methods in chemical thermodynamics, methods of calculating the equilibrium parameters using Gibbs energy, equilibrium constants, and Goldberg and Vage law, the universal program of TERRA thermodynamic calculations is based on the maximum entropy principle for isolated thermodynamics.

Using the methods of mathematical modeling, a rational charge composition was developed, and the shelf life of arco-iron in the furnace was determined with the aim of increasing hardness and durability.

Keywords: *hardness; SHS charge; temperature; special boundaries; wear resistance.*

В роботі розглянуто математичне моделювання термічного процесу формування структури армко-заліза з ціллю підвищення твердості та вибору оптимального складу шихти. Дослідження механізму формування термічного процесу для ультранизьковоуглецевої сталі використовували метод термодинамічного аналізу можливих реакцій між компонентами системи. Для термічного процесу використовується універсальна програма розрахунку багатоконпонентних гетерогенних систем TERRA на базі програми АСТРА-4. На відміну від традиційних методів хімічної термодинаміки, методів обчислення параметрів рівноваги за допомогою енергії Гіббса, констант рівноваги та закону Гольберга та Вате, універсальна програма термодинамічних обчислень TERRA заснована на принципі максимальної ентропії для ізольованої термодинаміки.

З застосуванням методів математичного моделювання розроблений раціональний склад шихти, визначений термін витримки арко-заліза в печі з метою підвищення твердості та зносостійкості.

Ключові слова: *твердість; СВС-шихта; температура; спеціальні границі; зносостійкість.*

Formulation of the problem

The intensive development of industry, new technologies and technology requires the development of new types of structural materials and technological processes. The essence of the SHS method is to exothermic reactions in the mode of propagation of the combustion wave with the formation of combustion products in the form of compounds and materials of practical value and having valuable characteristics [1]. Therefore, the improvement of the heat treatment process will allow to obtain structural materials with new structure and mechanical characteristics.

The development of a process for improving the quality of ultra-low carbon steel is currently one of the pressing problems of today.

Analysis of recent research and publications

The influence of carbon on the structure of steel significantly affects the mechanical and magnetic characteristics. For analysis and significant impact of the steel was taken iron and iron annealing. In [1,2], the study of the structure on the Armko-iron samples with a minimum number of streets

C = 0.02% was carried out and the special boundaries affecting the grain boundary structure of the steel on their mechanical properties where heat treatment was carried out under SHS conditions were revealed.

Analysis of the literature showed that the study of the influence of the structure on the formation of special boundaries in a single-phase (ferrite component) in the SHS conditions was almost never conducted. Some works [3,4,5,6] only confirm this fact.

Therefore, studies aimed at developing the optimal composition of the SHS charge to form a structure with a relative number of special hardness boundaries and the effect of the structure on the magnitude of the coercive force are relevant.

Formulation of research purpose

The purpose of the work is to simulate the optimal process of heat treatment and determine the rational composition of the SHS charge with the determination of the shelf life of the iron-iron in the furnace in order to increase the hardness and wear resistance of the SHS process and control the structure by the magnitude of the coercive force.

Presenting main material

For the heat treatment, samples of Armco-iron, cut from round \varnothing 52 mm, were used. The chemical composition is presented in tabl. 1.

Table 1.

C	Mn	Si	S	P	Cr	Ni	Cu
0,015	0,25	0,34	0,03	0,008	0,06	0,08	0,17

The processes of thermal heating were carried out in open type reactors ($p = 105$ PA) in the thermal ignition mode. The operating temperature range varied in the range of $900 \div 950$ °C, with a total holding time of 1 to 3 hours.

For thermal modeling of chemical processes in the SHS process, the equilibrium composition of system products was calculated using TERRA programs [7].

When developing the optimal regime of the SHS thermal process for ultra-low carbon steel and a process that provides a rational technological process, we used the methods of mathematical planning of the experiment with the implementation of full factor analysis according to plan 23.

The choice of a rational composition of the charge for conducting SHS in the conditions of thermal self-ignition is made on the basis of the results of studies of the thermal picture of the SHS process. Optimization options - HB hardness index;

The calculated levels of the variation intervals, the nature of their changes and the coding scheme are presented in tabl. 2.

Table 2.

Characteristic	Factors		
	XC %, wt.	t , h.	Q , %
Code	X_3	X_2	X_1
Basic level	12	2	22
Variation interval	2	1	7
The lower level	14	3	29
The upper level	10	1	15

The choice of the basic level and the intervals of variation is made on the basis that the introduction of cholesterol of less than 10 wt.%, Leads to the failure of the combustion wave of thermal self-ignition. Based on the study of changes in the characteristic temperatures of the SHS process, the amount of cholesterol is selected. Al_2O_3 is used as a ballast admixture to obtain a 100% powder SHS charge. The numerical value of the regression coefficients and their significance, determined by the

variance difference for each response function, as well as the validation of the Student's criterion and the Fisher's model adequacy assessment, are presented in Tabl. 3.

Table 3. Results of experimental data regression analysis

Parameter	Response features
	A_1
b_0	101,64
b_1	-0,4
b_2	-3,2
b_3	-2,5
b_4	-4,5556
b_5	1,4444
b_6	5,9444
b_7	-4,5
b_8	1
b_9	1,25
Δb	0,578
t - criterion	2,77
F - criterion	0,96 < 5,99

As a result of the regression analysis we obtain equation (1), which shows the dependence of the surface hardness on the mode of thermal self-ignition, the influence of cooling time and the average relative number of special boundaries (%):

$$A_1 = 101,64 - 0,4X_1 - 3,2X_2 - 2,5X_3 - 4,5556X_1^2 + 1,4444X_2^2 + 5,9444X_3^2 - 4,5X_1X_2 + 1X_1X_3 - 1,25X_2X_3. \quad (1)$$

Model validation shows that it can be used to predict the response function for any values of the factors between the upper and lower levels. For this purpose it is advisable to switch to natural variables using the translation formula presented in the following form:

$$X_{ij}^k = \frac{X_{ij}^n - X_{ij}^o}{\Delta_i}, \quad (2)$$

where X_{ij}^k — the coded value of the i -th factor investigated in the j -th equation; X_{ij}^n — natural value i -th factor, which is explored in j -th equation; X_{ij}^o — the value of the i -th factor, which is studied in the j -th equation at the basic level; Δ_i — the value of the interval of variation of the i -th factor.

Coefficients whose absolute value is equal to a confidence interval of Δb or more should be considered statistically significant. Statistically insignificant coefficients can be excluded from the models.

By replacing in the equations 1 the variables X_i on the right-hand side of equation (2) and by following the similar ones, we obtain natural equations characterizing the effects of the thermal self-ignition regime, the influence of the cooling time, and the average relative number of special boundaries (%):

$$\Delta A_1 = -2,89 + 30,26XC + 14,09T - 6,91Q - 0,06XC^2 + 0,06T^2 + 0,12Q^2 - 0,04XCT + 0,09XCQ - 0,045TQ. \quad (3)$$

In order to evaluate the adequacy of the equation, the calculation of the obtained regression equations for the rational mode of thermal self-ignition is performed. The results of the calculations are compared with the experimental data.

From the tabl. 4 it is found that the error between the calculated and experimental values of the response function does not exceed 1.5%.

Table 4. Relation between calculated and experimental data

Indicator	Experimental	Estimated value	Error
ΔA (Ti-Cr)	108	104,63	3,37

The mathematical design of the experiment significantly reduces the number of studies required to calculate the regression equation coefficients and obtain an adequate model that characterizes the effect of time and average relative number of special boundaries (%) on HB hardness (number of cholesterol = 14%).

The response surface of the obtained mathematical model is represented by three-dimensional graphical dependence (Fig. 1).

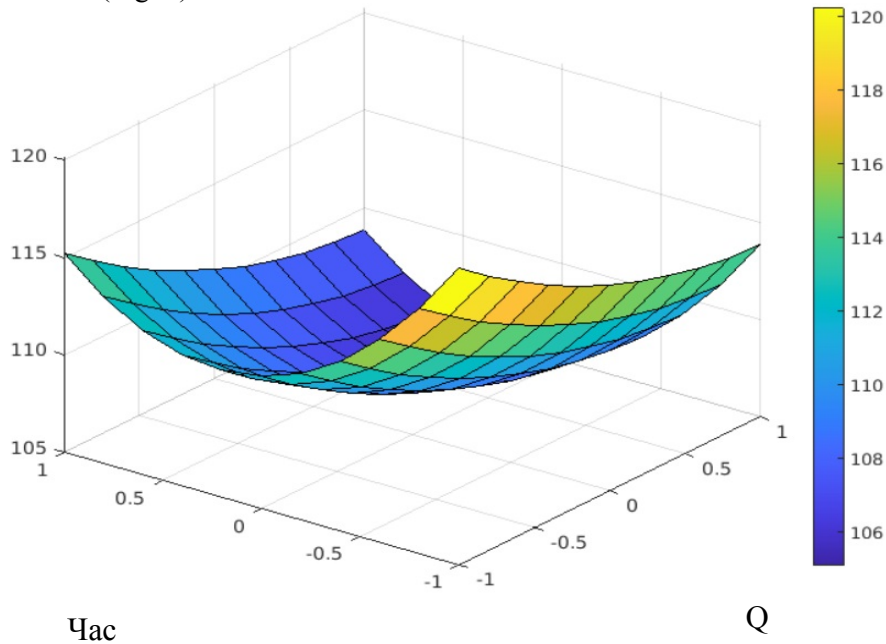


Fig. 1. Effect of cooling time and average relative number of special boundaries (%) on HB hardness (amount of XC=14%)

The microstructure of arm-iron before and after processing in SHS charge is presented in Fig. 2.

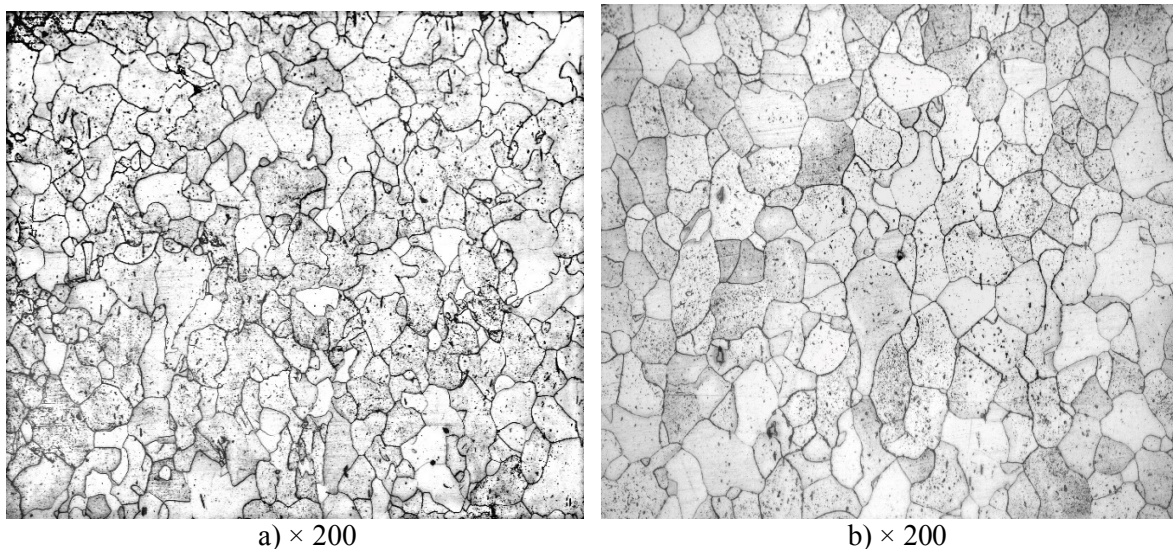


Fig.2. Microstructure of armko-iron before treatment (a), after treatment (b) in SHS conditions. Processing temperature — 900 °C, holding time 60 min

The rationale for the iron-iron is one time of cooling in the air and the relative number of special limits of 22% wt., thus, these values of X_1 X_2 allow us to obtain maximum hardness ratios for Armco iron, which correlates with wear resistance. The recommended rational SHS-charge for obtaining a surface with high hardness on the iron-iron is presented in tabl. 5

Table 5. SHS-charge to obtain a surface with high hardness on the armco-iron.

Coating	The composition of the charge, %
Ti-Cr	14% XC + 25% Ti + 5% Cr + 39% Al ₂ O ₃ + 6% NH ₄ F;

Conclusions

The thermal analysis of the SHS products of the charge was carried out and the rational composition of the SHS of the charge for processing of Armco-iron was determined. Using the methods of mathematical modeling, the optimal composition of the charge for heat treatment of Armco-iron was determined to achieve a rational process. The comparative analysis of the operational mechanical characteristics obtained during the SHS treatment made it possible to conclude that during the SHS treatment the hardness and wear resistance of the samples is higher by 1.5—2.0 times and compared with the samples that were processed under isothermal conditions. It has also been found that the heat treatment mode for arm-iron for one hour is optimal, while increasing the hardness and durability.

References

- [1] Bolshakov V.I., Sukhomlin V.I., & Volokh V.I. (2015). *Effect of annealing temperature on the formation of special boundaries in armco-iron*. [Temperatus effectus in annealing de profectu formationis metas speciales in Armco ferrum]. Dnepropetrovsk: Higher Educational Institution "PGASA" [in Ukrainian].
- [2] Sukhomlin V.I., & Volokh V.I. (2009). Effect of normalization duration on the structure of magnetic properties and special boundaries in low-carbon steel [In structuram et ordinationem duratione effectum magneticae proprietates speciales et terminationibus in chalybe]. *Science, Society, Education: Topical Issues and Development Prospects - Scientia: Societate Education: Bibliog exitibus et Expectationes Development*, 271–276 [in Ukrainian].
- [3] Sereda, B.P. (2009). *New materials in metallurgy* [Novae materiae troporum]. Zaporizhzhia: ZDIA [in Ukrainian].
- [4] Sereda B.P. (2008). *Metal knowing and thermal processing of black and white metals* [Scelerisque processus metallum suos, doctus et nigrum ex albo et metalla]. Zaporizhzhia: ZDIA [in Ukrainian].
- [5] Sereda, B.P. (2019). *On the surface of the material materials in the minds of the integrated influx of aggressive speeches* [De superficies materiam materiae integrated in animo per influxum, seu aggres contionibus]. Kam'yanske: tech. University (DDTU) [in Ukrainian].
- [6] Sereda B.P., Kruglyak I.V., Zherebtsov O.A., & Blokon Yu.O. (2009). *Squeezing metal with a vise with unsteady temperature minds* [Metallo et constrictione animi temperie levis sapienti]. Zaporizhzhia: ZDIA [in Ukrainian].
- [7] Sinyarev G.B, Vatalin N.A, Trusov B.G, & Moiseev R.K. et al. (1982). *The use of computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes* [Usus thermodynamic computers per rationes fiunt metallurgical]. Moscow: Nauka [in Russian].
- [8] Pupyshv A.A. (2007). *Thermodynamic modeling of thermochemical processes in spectral sources* [Termodinámico modeling spectris de processibus in fontes thermochemical]. Ekaterinburg: GOU VPO USTU [in Russian].
- [9] Merzhanov A.G. (1998). *Combustion processes and synthesis of materials* [Exinde et combustionem processus materiae]. Chernogolovka: ISMAN [in Russian].
- [10] Lyakhovich L.S (1981). *Chemical – thermal treatment of metals and alloys* [Chemical - curatio et scies scelerisque alloys]. Moscow: Metallurgy [in Russian].

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕРМІЧНОГО ПРОЦЕСУ НИЗЬКОВУГЛЕЦЕВОЇ СТАЛІ В УМОВАХ САМОРОЗПОВСЮДЖУВАЛЬНОГО ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗУ

Середа Б.П., Середа Д.Б., Волох В.И.

Реферат

В роботі розглянуто математичне моделювання термічного процесу формування структури армко-заліза з метою підвищення твердості та вибору оптимального складу шихти. Дослідження механізму формування термічного процесу для ультранизьковолицевої сталі використовували метод термодинамічного аналізу можливих реакцій між компонентами системи. Для термічного процесу використовується універсальна програма розрахунку багатоконпонентних гетерогенних систем TERRA на базі програми АСТРА-4.

Зі збільшенням температури кількість продуктів в газоподібній фазі зростає і виділяються конденсовані продукти. Характерно, що в області температур 700—1600 К частка конденсованої фази падає, що пов'язано з випаровуванням носія. Одночасно, починаючи з температури 800 К, відбувається розпад продуктів реакції, що підтверджує поява продуктів розкладання і різке збільшення кількості молей газу. Газоподібні продукти, взаємодіють з елементами порошкової системи переводять в газову фазу. При температурах вище 800 К частка конденсованої фази практично не змінюється. Цей факт дає підставу припустити, що в температурному інтервалі 700—1600 К відбуваються реакції з виділенням конденсованої фази, але без зміни числа молей, що характерно для реакцій розпаду, обміну з підкладкою, тобто по суті відбувається хімічний транспорт елементів.

Література

1. Большаков В.И., Сухомлин В.И., Волох В.И., Влияние температуры отжига на формирование специальных границ в армко-железе / Строительство, материаловедение, машиностроение //Сб. научн.трудов.Вып.80, Днепропетровск, ГВУЗ «ПГАСА», 2015. С. 67–70.
2. Сухомлин В.И., Волох В.И., Влияние длительности нормализации на структуру магнитные свойства и специальные границы в низкоуглеродистой стали. *Science, Society, Education: Topical Issues and Development Prospects* матеріали тез доповідей I міжнар. наук.-практ. конф., м. Харків 16-17 грудня 2019р. Харків, 2019. С. 271–276.
3. Середа Б. П. Нові матеріали в металургії : навч. посіб. для студ. ВНЗ /; ЗДІА. Запоріжжя : 2009. 394 с.
4. Середа Б. П. Металознавство та термічна обробка чорних та кольорових металів: підруч. для студ. вузів. Запоріжжя: ЗДІА, 2008. 302 с.
5. Середа Б. П. Поверхневе зміцнення матеріалів працюючих в умовах комплексного впливу агресивних речовин : монографія / Дніпров. держ. техн. ун-т (ДДТУ). Кам'янське : ДДТУ, 2019. 172 с.
6. Середа Б.П., Кругляк І.В., Жеребцов О.А., Белоконь Ю.О. Обработка металлов тиском при нестационарных температурных условиях: монография. Запоріжжя: ЗДІА, 2009. 252 с.
7. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов / [Синярев Г.Б., Ваталин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Р.К. и др.]. М.: Наука, 1982. 263 с.
8. Пупышев А.А. Термодинамическое моделирование термохимических процессов в спектральных источниках А.А. Пупышев. -Екатеренбург: ГОУ ВПО УГТУ. 2007. 85 с.
9. Мержанов А.Г. Процессы горения и синтез материалов/ под ред. В.Т. Телепы, А.В. Хачояна.- Черноголовка: ИСМАН, 1998. 512 с.
10. Химико-термическая обработка металлов и сплавов: Справочник / под ред. Л.С Ляховича. М.: Металлургия, 1981. 424 с.