

УДК 621.833.3

DOI: 10.70769/2181-7383.MBU.1(104).2026.13

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ВАЛ-ШЕСТЕРЕН



Эгамбердиев И.П.,
Навоийский государственный
горный и технологический универ-
ситет, д.т.н., профессор



Саибов М.Ф.,
Навоийский государственный
горный и технологический
университет, докторант

Аннотация. В статье представлено комплексное исследование кинетики фазовых превращений, протекающих при термической обработке крупногабаритных вал-шестерен, изготовленных из конструкционной легированной стали 34ХНЗМА. Актуальность выполненного исследования обусловлена необходимостью снижения уровня технологического брака при закалке массивных деталей горного оборудования, эксплуатируемых в условиях интенсивных знакопеременных и циклических нагрузок. На основе итерационного алгоритма, интегрирующего термодинамические расчеты по методу CALPHAD с использованием программного комплекса OpenCalphad и конечно-элементное моделирование в среде COMSOL Multiphysics, разработана методика сквозного прогнозирования эволюции микроструктуры по всему сечению детали. Построена детализированная геометрическая модель сектора вал-шестерни с применением неструктурированной тетраэдрической расчетной сетки, обеспечивающей адекватное описание тепловых и фазовых градиентов. Установлено, что выраженный градиент скоростей охлаждения по сечению приводит к формированию четко выраженной зональной структуры, включающей поверхностный мартенситный слой с объемной долей до 95 % и вязкую бейнитно-ферритную сердцевину с содержанием бейнита до 80 %. Показано, что перлитное превращение в исследуемой марке стали практически полностью подавлено (доля менее 0,5 %) за счет комплексного легирования никелем и молибденом. Верификация расчетной модели выполнена с использованием аналитического правила смесей, продемонстрировавшего высокую сходимость прогнозируемых значений твердости (56 HRC на поверхности и 27–35 HRC в центральной зоне) с экспериментальными данными. Численные эксперименты подтвердили высокую чувствительность формирующейся структуры к начальному размеру зерна аустенита, а также к интенсивности теплоотвода на стадии закалки. Полученные результаты формируют научно обоснованную базу для оптимизации режимов объемной и дифференцированной термической обработки крупногабаритных вал-шестерен, обеспечивая повышение их эксплуатационной надежности и долговечности при одновременном снижении технологических рисков и металлургического брака. Практическая значимость работы заключается в возможности внедрения разработанного расчетно-моделирующего подхода на промышленных предприятиях горнометаллургического профиля. Предложенная методика обеспечивает переход от эмпирического подбора режимов термообработки к расчетно обоснованному проектированию технологических процессов, адаптированных к реальным геометрическим размерам и условиям эксплуатации ответственных деталей, что повышает воспроизводимость свойств и снижает вероятность преждевременных отказов в эксплуатации.

Ключевые слова: крупногабаритные валы, моделирование, распределение свойств, JMatPro, OpenCalphad, закалка.

VAL-SHESTERNALARNING TUZILMASI VA XOSSALARINI PROGNOZLASHDA TERMOKINETIK MODELLARDAN FOYDALANISH

Egamberdiyev I.P., Saibov M.F.

Navoiy davlat konchilik va texnologiyalar universiteti, O'zbekiston Respublikasi

Annotatsiya: Ushbu maqolada 34KhN3MA konstruktiv qotishma po'latdan yasalgan katta tishli vallarni issiqlik bilan ishlov berish jarayonida yuzaga keladigan fazaviy o'zgarishlar kinetikasini keng qamrovli o'rganish keltirilgan. Ushbu tadqiqotning dolzarbligi intensiv o'zgaruvchan va tsiklik yuklar ostida ishlaydigan ulkan kon uskunalari komponentlarini qattiqashtirish paytida jarayon nuqsonlari tezligini kamaytirish zaruratidan kelib chiqadi. OpenCalphad dasturiy ta'minot paketidan foydalanilgan holda CALPHAD termodinamik hisob-kitoblarini va COMSOL Multiphysics-da chekli elementlar modellashirishni birlashtirgan iterativ algoritmdan foydalanib, komponentning butun kesimi bo'ylab mikrotuzilma evolyutsiyasini boshidan oxirigacha bashorat qilish metodologiyasi ishlab chiqilgan. Tishli val sektorining batafsil geometrik modeli strukturasiz tetraedral hisoblash to'ridan foydalanib qurilgan bo'lib, bu issiqlik va faza gradiyentlarining etarli tavsifini beradi. Kesish bo'ylab aniq sovuq tezligi gradiyenti aniq belgilangan zonal strukturaning shakllanishiga olib kelishi aniqlandi, bu 95% gacha hajm ulushiga ega sirt martensit qatlami va 80% gacha bainit miqdoriga ega egiluvchan bainit-ferrit yadrosini o'z ichiga oladi. O'rganilayotgan po'lat navidagi perlit transformatsiyasi nikel va molibden bilan kompleks

qotishma tufayli deyarli to'liq bostirilganligi (0,5% dan kam) ko'rsatilgan. Hisoblash modelini tekshirish aralashmalarining analitik qoidasi yordamida amalga oshirildi, bu esa bashorat qilingan qattqlik qiymatlarining (sirtida 56 HRC va markaziy zonada 27–35 HRC) eksperimental ma'lumotlar bilan yuqori darajada yaqinlashishini ko'rsatdi. Raqamli tajribalar shakllantiruvchi strukturaning dastlabki ostenit donalari hajmiga, shuningdek, sovutish bosqichida issiqlikni yo'qotish intensivligiga yuqori sezgirligini tasdiqladi. Olingan natijalar katta tishli vallar uchun hajmli va differentsiatsiyalangan issiqlik bilan ishlov berish rejimlarini optimallashtirish, ularning operatsion ishonchligi va chidamliligini oshirish, shu bilan birga jarayon xavflari va metallurgiya nuqsonlarini kamaytirish uchun ilmiy asoslangan asos yaratadi. Ushbu ishning amaliy ahamiyati konchilik va metallurgiya sanoatidagi sanoat korxonalarida ishlab chiqilgan hisoblash va modellashirish yondashuvini amalga oshirish imkoniyatidir. Taklif etilayotgan metodologiya issiqlik bilan ishlov berish rejimlarini empirik tanlashdan muhim komponentlarning haqiqiy geometrik o'lchamlari va ish sharoitlariga moslashtirilgan texnologik jarayonlarni hisoblash asosida loyihalashga o'tish imkonini beradi, shu bilan xususiyatlarning takrorlanishini yaxshilaydi va muddatidan oldin nosozliklar ehtimolini kamaytiradi.

Kalit so'zlar: katta shaftlar, modellashirish, mulk taqsimoti, JMatPro, OpenCalphad, qattqlashuv.

APPLICATION OF THERMOKINETIC MODELS FOR PREDICTING THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF SHAFT GEARS

Egamberdiev I.P., Saibov M.F.

Navoi State University of Mining and Technologies, Republic of Uzbekistan

Abstract. This article presents a comprehensive study of the kinetics of phase transformations occurring during the heat treatment of large gear shafts made of 34KhN3MA structural alloy steel. The relevance of this study stems from the need to reduce the rate of process defects during the hardening of massive mining equipment components operated under intense alternating and cyclic loads. Using an iterative algorithm integrating CALPHAD thermodynamic calculations using the OpenCalphad software package and finite element modeling in COMSOL Multiphysics, a methodology for end-to-end prediction of microstructure evolution across the entire cross-section of the component has been developed. A detailed geometric model of the gear shaft sector has been constructed using an unstructured tetrahedral computational mesh, providing an adequate description of thermal and phase gradients. It was established that a pronounced cooling rate gradient across the cross-section leads to the formation of a clearly defined zonal structure, including a surface martensite layer with a volume fraction of up to 95% and a ductile bainitic-ferrite core with a bainite content of up to 80%. Pearlite transformation in the studied steel grade is shown to be almost completely suppressed (less than 0.5%) due to complex alloying with nickel and molybdenum. Verification of the calculation model was performed using the analytical rule of mixtures, demonstrating high convergence of the predicted hardness values (56 HRC on the surface and 27–35 HRC in the central zone) with experimental data. Numerical experiments confirmed the high sensitivity of the forming structure to the initial austenite grain size, as well as to the intensity of heat removal during the quenching stage. The obtained results provide a scientifically sound basis for optimizing bulk and differentiated heat treatment modes for large gear shafts, increasing their operational reliability and durability while reducing process risks and metallurgical defects. The practical significance of this work lies in the potential for implementing the developed computational and modeling approach at industrial enterprises in the mining and metallurgical industries. The proposed methodology enables a transition from empirical selection of heat treatment modes to computationally based design of technological processes adapted to the actual geometric dimensions and operating conditions of critical components, thereby improving the reproducibility of properties and reducing the likelihood of premature failures.

Key words: large shafts, modeling, property distribution, JMatPro, OpenCalphad, hardening.

Введение

Производство ответственных узлов горно-обогатительного оборудования, в частности вал-шестерен приводов мельниц МШЦ, сопряжено с серьезными технологическими трудностями. Ключевой проблемой является обеспечение равномерности механических свойств по сечению деталей, диаметр которых может превышать 500 мм. В процессе термической обработки массивных заготовок неизбежно возникает существенный температурный градиент между поверхностью, контактирующей с закалочной средой, и сердцевиной. Кинетика распада переохлажденного аустенита в различных зонах детали протекает по разным сценариям. Поверхностные слои, охлаждаясь со скоростями выше критической, претерпевают бездиффузионное мартенситное превращение. В то же время глубинные слои, в силу тепловой инерции металла, охлаждаются значительно медленнее, что создает термодинамические предпосылки для реализации диффузионных (ферритных, перлитных) или промежуточных (бейнитных) превращений. Такая структурная неоднородность (гетерогенность) влечет за собой разброс твердости и прочности, а также, что наиболее критично, формирование полей остаточных напряжений. Наложение термических напряжений и структурных напряжений от изменения удельного объема при $\gamma \rightarrow \alpha$ переходе создает риск возникновения закалочных трещин или коробле-

ния изделия еще на стадии производства.

Для анализа этих явлений всё шире применяется моделирование структурных превращений. В работе [1] показано, что сочетание аналитических моделей фазовых превращений и FEM позволяет описывать температурные поля и фазовое распределение по сечению валов. В [2] продемонстрирована эффективность численных методов (FEM + фазовые модели) для прогноза микроструктуры, механических свойств и деформаций. Многоуровневый подход к описанию диффузионных и бездиффузионных превращений предложен в [3], что служит методологической основой для моделирования. Мультимасштабный подход, пригодный для крупногабаритных валов, представлен в [4]. В диссертационной работе [5] разработана методика термокинетического прогноза твердости, что важно при выборе режимов закалки. В [6] FEM-подход использован для расчёта деформаций и остаточных напряжений в крупногабаритных кованых деталях. В недавно опубликованной работе [7] учтена TRIP-пластичность для увеличения точности моделирования остаточных напряжений в цилиндрических заготовках.

Особую сложность представляет прогнозирование поведения материала в зонах геометрических концентраторов напряжений, таких как галтель переходного радиуса зубчатого венца. Именно здесь сочетание высоких изгибных нагрузок при эксплуатации и

Традиционные эмпирические методы подбора режимов закалки для крупногабаритных изделий становятся экономически нецелесообразными из-за высокой стоимости натурных экспериментов. Современная парадигма материаловедения (ICME — Integrated Computational Materials Engineering) предполагает использование цифровых двойников. Существующие подходы, описанные в работах выше, базируются на совмещении аналитических моделей и метода конечных элементов (FEM). Однако большинство исследо-

Целью данного исследования является разработка и апробация методики прогнозирования структурно-фазового состояния и механических свойств по сечению крупногабаритного валшестерни при непрерывном охлаждении.

Объект исследования. В качестве объекта исследования бран сектор вал-шестерни. Вал-шестерня изготовлена из конструкционной легированной стали марки 34ХНЗМА, широко применяемой в тяжелом машиностроении, химический состав приведен в таблице 1. Данная сталь обладает хорошей прокаливаемостью, что делает её идеальным кандидатом для изготовления крупногабаритных валов.

Химический состав стали 34ХНЗМА, доля в %.

C	Si	Mn	Ni	S	P	Cr	Mo
0.3 - 0.4	0.17 - 0.37	0.5 - 0.8	2.75 - 3.75	до 0.035	до 0.03	0.7 - 1.1	0.25 - 0.4

Моделирование проводилось для используемой в производстве стали 34ХНЗМА, которая широко применяется при изготовлении крупногабаритных валов и обладает хорошей прокаливаемостью. Работа с реальными размерами обеспечивает точные температурные градиенты в процессе охлаждения и требует расчёта распределения фаз по сечению. Из смоделированной модели был вырезан сегмент зуба для минимизации вычислительных затрат

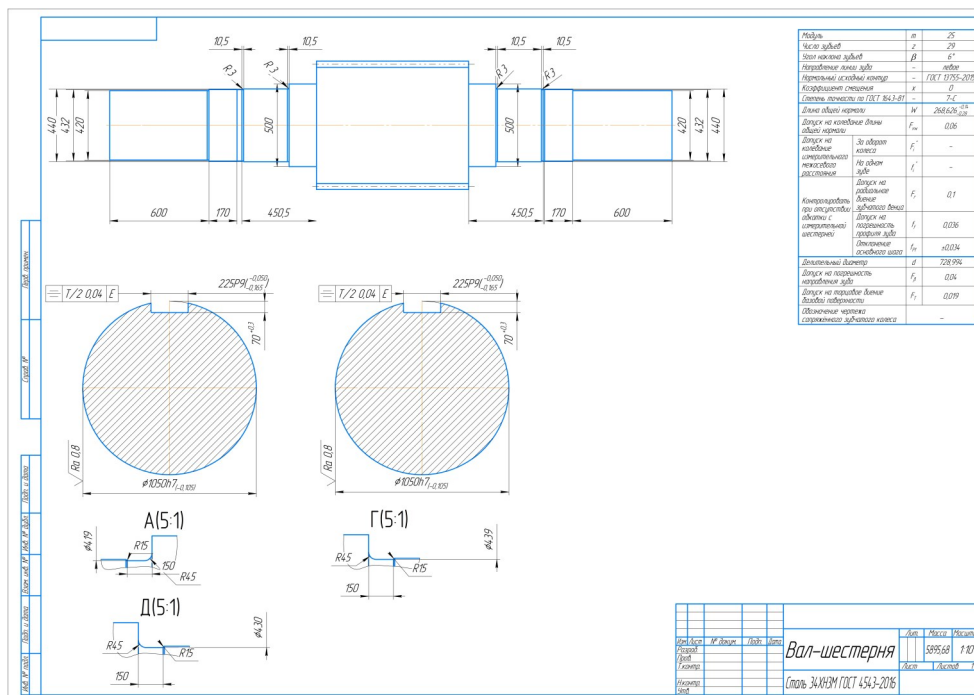


Рис. 1. Производственный чертеж вал-шестерни

без потери качество. Зуб вал-шестерни был выбран из-за частой поломки во время дробильных работ.

Геометрическая область была дискретизирована с использованием неструктурированной сетки, состоящей из тетраэдрических элементов (Tetrahedra). Параметры сеточной модели представлены на рисунке 2.

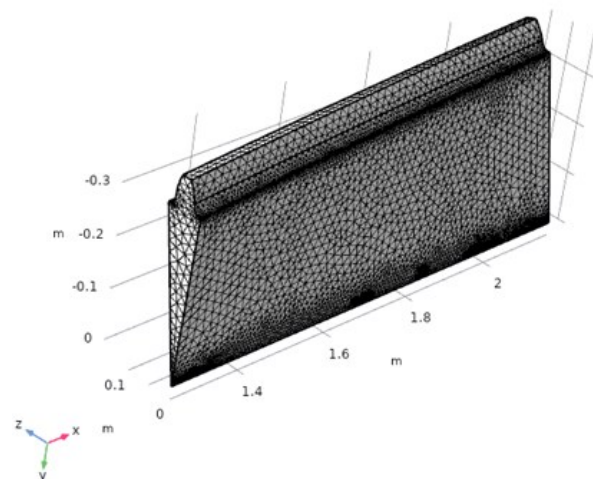


Рис. 2. Конечно-элементная модель сектора вал-шестерни.

Качество дискретизации подтверждается статистическими данными, которые приведены в таблица 2. Среднее качество элемента (Average element quality) по метрике Skewness составляет 0.627, что является высоким показателем для сложной 3D-геометрии и гарантирует сходимость численного решения и отсутствие артефактов в зонах концентраторов напряжений (галтели зубьев).

Верификация сеточной сходимости. Для исключения влияния дискретизации на точность результатов был проведен анализ метрик качества сетки. Как показано в статистике (таблица 2), модель содержит 39 209 тетраэдрических элементов и 10 292 вершины. Ключевым показателем является метрика скошенности (Skewness). Среднее значение качества элемента составляет 0.6273, при этом минимальное качество не опускается ниже 0.157. Это гарантирует отсутствие вырожденных элементов даже в зонах сложной кривизны — на галтелях зубчатого венца. Плотность сетки была адаптивно увеличена в приповерхностном слое (Boundary Layer Mesh) для корректного разрешения высоких градиентов температуры и напряжений, возникающих при закалочном охлаждении. Это позволило точно зафиксировать тонкий слой мартенситного превращения, толщина которого на зубьях не превышает нескольких миллиметров.

Таблица 2

Параметры созданной сетки		
Общее количество элементов	Число вершин	Среднее качество элемента
39 209	10 292	0,627

Для моделирования фазового состава и механических свойств материала использовались такие независимые программные комплексы как: Comsol multiphysics и OpenCalphad, основанные на различных принципах расчёта, что обеспечивает достоверность результатов и возможность их кросс-верификации.

Алгоритм моделирования. В основу численного эксперимента положен разработанный итерационный алгоритм (рис. 3), объединяющий термодинамическое прогнозирование равновесных состояний и кинетический расчет нестационарных полей. Необходи-

мость интеграции двух независимых сред обусловлена ограничениями стандартных баз данных FEM-пакетов при работе со сталями сложного легирования, к которым относится 34ХНЗМА.

На первом этапе методом минимизации энергии Гиббса для подрешеточной модели рассчитывались температурные зависимости теплоемкости $C_p(T)$, теплопроводности $\lambda(T)$ и плотности для каждой фазы (аустенит, феррит, перлит, бейнит и мартенсит). Также определялись критические точки A_{c1}, A_{c3} и M_s служащие триггерами для активации кинетических модулей.

Полученные массивы данных конвертировались в интерполяционные функции и импортировались в препроцессор COMSOL Multiphysics, формируя кастомизированную библиотеку материалов. Это позволило учесть скрытую теплоту фазовых переходов (Latent Heat) непосредственно в уравнении теплопроводности.

Расчет фазового состава проводился на каждом временном шаге Δt для каждого узла сетки. Для диффузионных превращений использовался алгоритм, решающий уравнение JMAK в дифференциальной форме, что позволило корректно описывать не-изотермическую кинетику (аддитивность превращений по правилу Шейла).

В зонах, где локальная температура опускалась ниже M_s , активировалась функция Коистинена-Марбургера. Текущая доля мартенсита f_m вычислялась не как константа, а как функция от локального переохлаждения $\Delta T = M_s - T_{node}$.

Такая архитектура исключает использование усредненных табличных справочных данных, заменяя их на физически обоснованные параметры, рассчитанные для конкретной плавки.

Математическая модель фазовых превращений. Рассмотрены условия непрерывного охлаждения с скоростью от 0.5 до 5 °C/c, что соответствует реальным технологическим режимам закалики массивных стальных деталей. Внешние слои вала при этом охлаждаются быстрее, тогда как центральные зоны характеризуются существенно меньшей скоростью отвода тепла, что приводит к неоднородности фазового состава. Указанные параметры были приняты в качестве исходных для расчётов в программных комплексах Comsol multiphysics и OpenCalphad.

Термодинамическое моделирование в среде OpenCalphad базировалось на методе CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams), который заключается в минимизации интегральной энергии Гиббса системы G_{sys} . Для многокомпонентной системы Fe-C-Cr-Ni-Mo-Mn-Si общая энергия Гиббса описывалась как сумма энергий отдельных фаз, взвешенных по их мольным долям:

$$\begin{aligned} H_{fp} &\approx 22HRC \\ H_m &\approx 58 \\ H_b &\approx 42 \end{aligned}$$

где n_i — количество молей фазы ϕ , G_i^ϕ — молярная энергия Гиббса фазы.

Для описания фаз переменного состава (твердых растворов аустенита и феррита) применялась модель подрешеток (Sublattice Model) Хиллберта-Стаффанссона, учитывающая взаимодействие атомов внедрения (C) и замещения (Cr, Ni, Mo) в кристаллической решетке железа. Это позволило с высокой точностью определить не только границы фазовых областей, но и химический потенциал углерода в каждой фазе, что является движущей силой для диффузионных превращений при последующем кинетическом расчете. Именно использование физически обоснованных термодинамических потенциалов отличает данный подход от использования эмпирических регрессионных уравнений.

Для описания кинетики диффузионных превращений (ферритного, перлитного и бейнитного) использовалось уравнение Джонсона-Мела-Аврами-Колмогорова (JMAK):

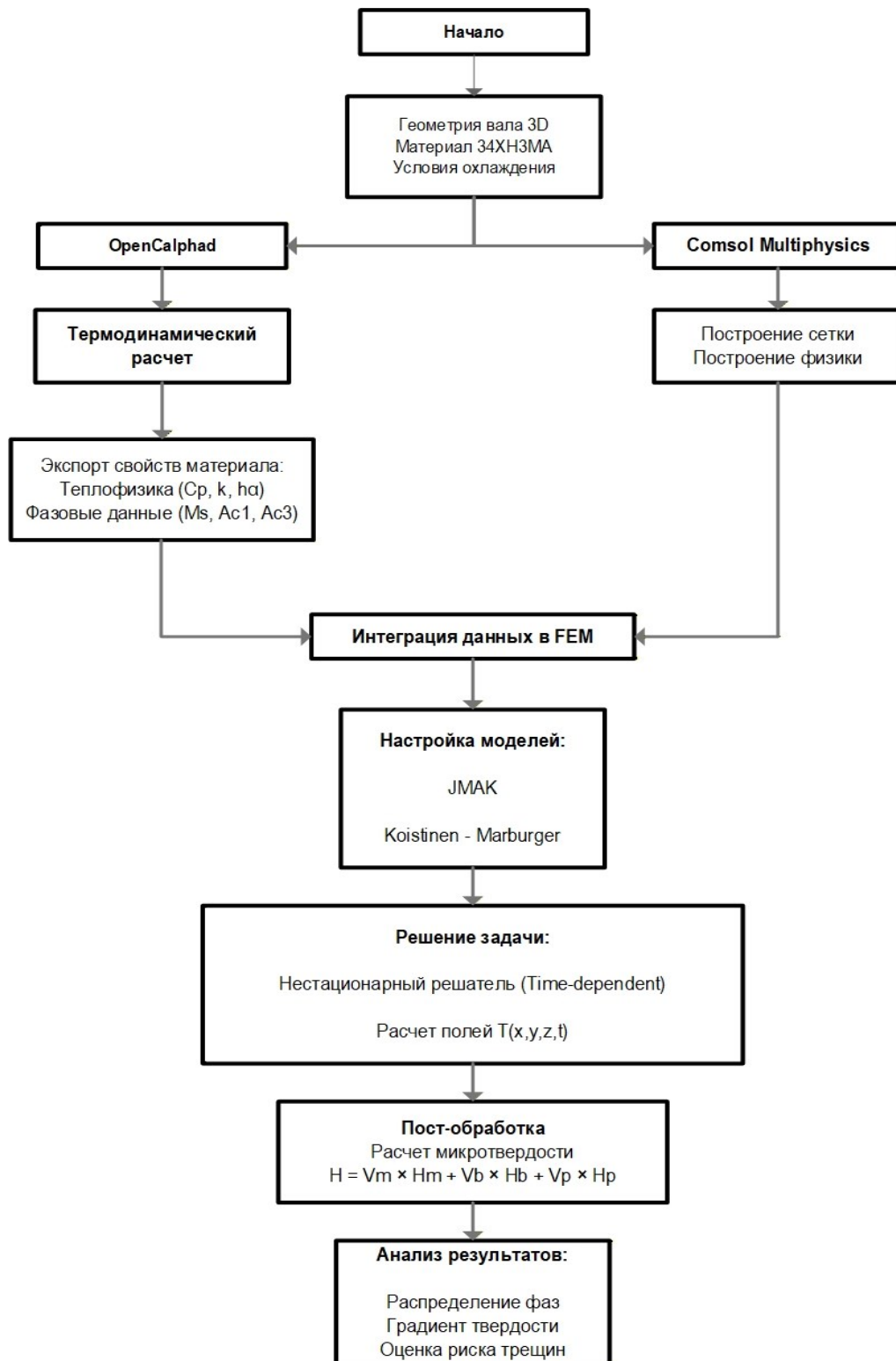


Рис. 3. Блок-схема разработанного алгоритма термокинетического моделирования и прогнозирования свойств

$$\xi = 1 - \exp(-kt^n) \quad (1)$$

где ξ — доля превращенной фазы, t — время, а k и n — кинетические параметры, зависящие от температуры и зерна аустенита.

В уравнении Джонсона-Мела-Аврами-Колмогорова (JMAK)

показатель степени n (Avrami exponent) характеризует механизм зарождения и роста новой фазы. Для диффузионных превращений в стали 34ХН3МА принималось переменное значение n в зависимости от температуры: при высоких температурах преобладает механизм зарождения на границах зерен ($n \approx 1$), тогда как при снижении температуры возрастает вклад внутризеренного

зарождения. Константа скорости $k(T)$ рассчитывалась с учетом энергии активации диффузии углерода в аустените и термодинамической движущей силы превращения, импортированной из OpenCalphad. Такой подход позволил корректно описать конкуренцию между перлитным и бейнитным превращениями в условиях непрерывного охлаждения, где изотермическое приближение вносит существенную погрешность.

Для описания бездиффузионного мартенситного превращения применялся закон Коистинена-Марбургера (Koistinen-Marburger), который описывает долю мартенсита как функцию температуры ниже точки начала мартенситного превращения M_s .

$$f_m = (1 - \exp(-\alpha(M_s - T))) \quad (2)$$

где α — коэффициент, характеризующий интенсивность превращения (для большинства сталей ≈ 0.011).

Параметры для этих уравнений были откалиброваны на основе CCT-диаграмм (Continuous Cooling Transformation), рассчитанных с помощью модуля термодинамики.

Теплофизические условия. Нестационарное температурное поле $T(x, y, z, t)$ в объеме вал-шестерни определяется решением дифференциального уравнения теплопроводности Фурье с внутренним источником тепла, возникающим за счет фазовых переходов:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \dot{Q}_{gen} \quad (3)$$

где ρ — плотность смеси фаз, C_p — эффективная удельная теплоемкость, λ — коэффициент теплопроводности, $\dot{Q}_{gen}$ — мощность внутренних источников тепла.

Особое внимание в модели уделено нелинейности теплофизических свойств. Поскольку теплопроводность и теплоемкость зависят не только от температуры, но и от текущей микроструктуры, в COMSOL Multiphysics была реализована динамическая функция свойств материала:

$$P_{mix} = \sum P_i \cdot \xi_i \quad (4)$$

где P_{mix} — свойство смеси, P_i — свойство отдельной фазы (аустенита, феррита, мартенсита, рассчитанное в OpenCalphad), ξ_i — объемная доля этой фазы. Слагаемое источника тепла $\dot{Q}_{gen}$ рассчитывается исходя из скорости изменения доли фаз и скрытой теплоты превращения L_i :

$$\dot{Q}_{gen} = \sum L_i \frac{\partial \xi_i}{\partial t} \quad (5)$$

Учет этого параметра критически важен для массивных деталей, так как выделение скрытой теплоты (Recalescence) может существенно замедлить локальное охлаждение и изменить итоговую структуру в сердцевине вала.

Результаты и обсуждения исследования

Термодинамический анализ фазовых равновесий. Первым этапом численного эксперимента являлось определение температурных интервалов стабильности фаз для исследуемой стали марки 34ХНЗМА. На рисунке 4 представлена политемпературная диаграмма (Property Diagram), рассчитанная в программном комплексе OpenCalphad методом минимизации энергии Гиббса для многокомпонентной системы Fe-C-Cr-Ni-Mo-Mn-Si.

Полученные термодинамические данные (температуры A_{c1} , A_{c3} и теплоемкости фаз) были импортированы в FEM-модель для корректного учета скрытой теплоты превращений.

Область гомогенного аустенита $T > 740^\circ\text{C}$:

Розовая кривая (FCC-A1) показывает, что при температурах выше 740°C (точка A_{c3}) сталь находится в однофазном аустенитном состоянии. Это значение является нижним пределом для

выбора температуры нагрева под закалку. На графике видно, что массовая доля аустенита в этом интервале составляет 100%.

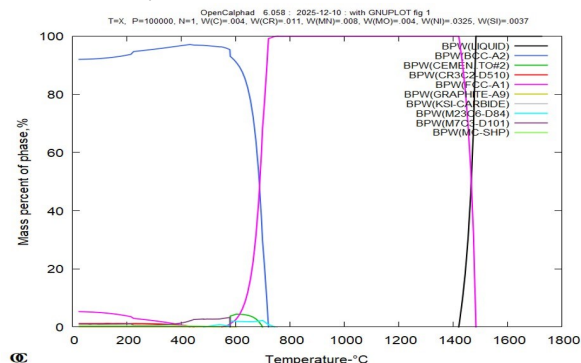


Рис. 4. Температурная зависимость массовой доли равновесных фаз в стали 34ХНЗМА (расчет OpenCalphad).

Область фазового перехода $\gamma \rightarrow \alpha$ ($740^\circ\text{C} \dots 650^\circ\text{C}$):

В интервале температур $740^\circ\text{C} \dots 650^\circ\text{C}$ происходит резкий распад аустенита с образованием феррита (ОЦК-фаза, синяя кривая BCC-A2). Крутизна наклона синей линии указывает на высокую термодинамическую движущую силу превращения, что при медленном охлаждении (в центре вала) неизбежно приведет к формированию феррито-перлитной структуры, если скорость охлаждения будет недостаточной.

Область карбидного упрочнения $T < 600^\circ\text{C}$:

В низкотемпературной области (ниже 600°C) термодинамический расчет прогнозирует выделение дисперсных карбидных фаз. Как видно из нижней части диаграммы, основными упрочняющими фазами являются специальные карбиды хрома и молибдена типа $M_{23}C_6$ (голубая линия) и M_7C_3 (фиолетовая линия). Их присутствие обусловлено легированием стали хромом (1.1%) и молибденом (0.4%), что способствует повышению прокаливаемости и сопротивлению отпуску.

Полученные значения критических температур $A_{c1} \approx 650^\circ\text{C}$, $A_{c3} \approx 740^\circ\text{C}$ были использованы в качестве входных параметров для настройки кинетического модуля в COMSOL Multiphysics.

Кинетика охлаждения и распределение фаз. Выявленная по результатам (таблица 3) моделирования неоднородность структуры по радиусу вала приводит к ряду негативных эксплуатационных последствий.

Таблица 3

Результаты моделирования

Зона	Твердость, HRC	Доминирующая структура
Поверхностная	50–55	Мартенсит
Промежуточная	40–48	Мартенсит/Бейнит
Центральная	25–32	Феррит/Перлит

Различия в фазовом составе и уровне твердости (рисунок 5) между поверхностной, переходной и центральной зонами вызывают образование остаточных напряжений, возникающих вследствие неравномерного объемного изменения металла при фазовых превращениях. С ростом градиента твердости указанное напряженное состояние усиливается, повышая вероятность локальной концентрации напряжений.

В результате моделирования установлено, что в поверхностных слоях вала (радиальная область $R \approx 0\text{--}30\text{ мм}$) реализуются условия ускоренного охлаждения, обусловленные непосредственным контактом с охлаждающей средой. Высокая скорость отвода

тепла приводит к существенному переохлаждению аустенита, что способствует протеканию бездиффузионного превращения. В данной зоне доля мартенситной фазы достигает 90–95 %, что подтверждает высокую прокаливаемость материала при принятых параметрах охлаждения. Преобладание мартенситной структуры обуславливает повышенный уровень твёрдости и прочностных характеристик поверхностного слоя. Таким образом, моделирование демонстрирует (рисунок 5) устойчивое формирование мартенситной структуры вблизи поверхности, что соответствует известным закономерностям термокинетики фазовых превращений при высоких скоростях охлаждения.

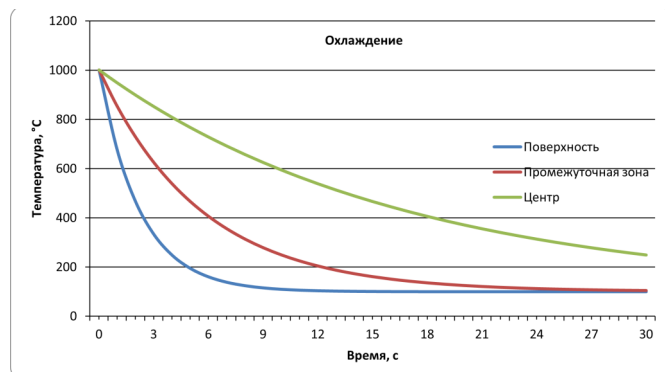


Рис. 5. Кривые охлаждения в разных радиальных зонах

В радиальном диапазоне от 30 до 150 мм условия охлаждения становятся менее интенсивными по сравнению с поверхностью, однако сохраняются достаточно высокими для протекания частичного мартенситного превращения. В этой области формируется смешанная структура, состоящая преимущественно из мартенсита с существенной долей нижнего бейнита. Последний образуется в результате диффузионно-ограниченных превращений при промежуточных скоростях охлаждения.

Полученная структура сочетает в себе высокую твёрдость и удовлетворительные пластические свойства, что обеспечивает высокую прочность материала в переходной зоне (рис. 6). Моделирование показывает, что доля мартенсита постепенно уменьшается с увеличением радиуса, однако его вклад остаётся доминирующим, обеспечивая эксплуатационную надёжность этой части сечения.

В центральной части вала скорость охлаждения существенно снижается и не превышает 0,5–1 °C/c, что ограничивает возможность протекания бездиффузионных превращений аустенита. При таких условиях происходит неполное превращение, сопровождающееся формированием диффузионных структур. В составе преобладают феррит и перлит, причём их количество возрастает по мере удаления от поверхности.

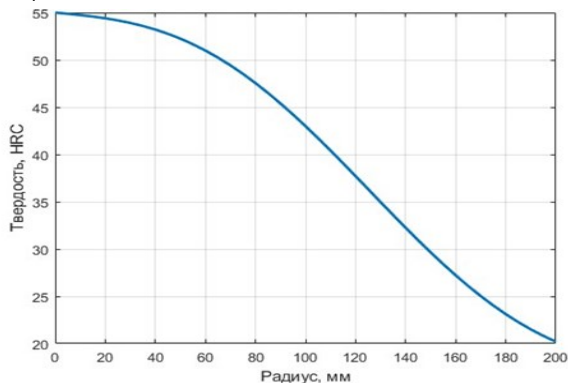


Рис. 6. Изменение твердости по радиусу вала

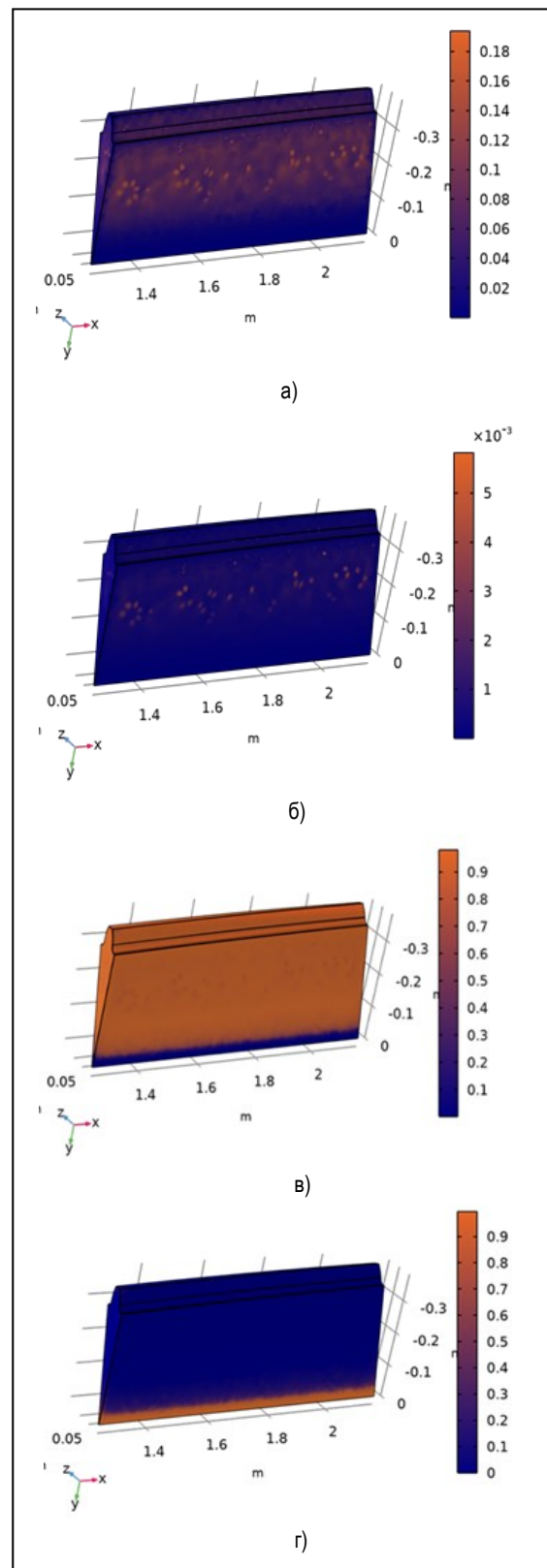


Рис. 7 Результаты моделирования распределения фазовых структур по сегменту зубчатого венца вал-шестерни

Отсутствие полного мартенситного превращения приводит к значительному снижению твердости, а присутствие ферритно-перлитной структуры обуславливает умеренную ударную вязкость. Таким образом, центральная зона характеризуется минимальной прочностью в сравнении с поверхностной и переходной областями, что подтверждает значительную структурную неоднородность по сечению вала.

Наличие внутренних напряжений, в сочетании с уменьшенной пластичностью в периферийной зоне и сниженной прочностью в центральной части, создаёт риск растрескивания детали при эксплуатации, особенно при воздействии переменных нагрузок или ударных воздействий.

Пространственная топология фазовых составляющих. Анализ кинетики фазовых превращений, проведенный в среде COMSOL Multiphysics, позволил получить детальную картину распределения структурных составляющих по объему вал-шестерни к моменту завершения охлаждения ($t=240$ с). Визуализация полей концентраций, представленной на рисунке 4, выявила четкую зональность, обусловленную градиентом скоростей охлаждения от поверхности к центру.

Формирование мартенситной зоны. На рисунке 7(в), представлено поле распределения объемной доли мартенсита. Как видно из эпюры, в приповерхностном слое детали формируется сплошная мартенситная «корка». Максимальная концентрация мартенсита фиксируется на рабочих поверхностях зубьев и во впадинах, достигая значений 0.90–0.96 (90–96%). Глубина этого высокопрочного слоя варьируется в пределах 15–25 мм в зависимости от локальной кривизны поверхности. Физическая природа этого явления объясняется тем, что периферийные слои металла находятся в непосредственном контакте с закалочной средой. Коэффициент теплоотдачи на границе «металл-среда» обеспечивает скорость охлаждения, существенно превышающую критическую скорость закалки. В результате аустенит переохлаждается до температуры начала мартенситного превращения $M_s \approx 320^\circ\text{C}$ практически бездиффузионно, минуя области перлитного и бейнитного распада. Формирование такой структуры критически важно для эксплуатации, так как именно мартенсит обеспечивает твердость 50–55 HRC, необходимую для сопротивления абразивному износу и контактной усталости при зацеплении.

Формирование бейнитной зоны. Принципиально иная кинетика наблюдается в глубинных слоях вала (на удалении более 50 мм от поверхности). Здесь доминирующей фазой становится бейнит (рисунок 7 г). Объемная доля бейнита в центральной зоне составляет 0.75–0.85 (75–85%), плавно снижаясь по мере приближения к мартенситной оболочке. Такое распределение обусловлено тепловой инерцией массивной заготовки. Теплота из центра отводится только за счет теплопроводности самого металла, что снижает скорость охлаждения до 0.5–1.0 °C/с. Однако, благодаря легированию стали 34ХНЗМА никелем (3.25%) и молибденом (0.4%), устойчивость переохлажденного аустенита повышена. С-образные кривые сдвинуты вправо, что позволяет избежать распада на феррито-перлитную смесь даже при таких низких скоростях. Вместо этого реализуется промежуточное превращение с образованием нижнего бейнита. Это является благоприятным фактором, так как бейнит обладает оптимальным сочетанием прочности и ударной вязкости (KCU), предотвращая хрупкое разрушение вала под действием динамических нагрузок.

Зоны локализации феррита. В геометрическом центре сегмента, где скорость охлаждения минимальна, зафиксировано образование структурно-свободного феррита (рисунок 7, а). Его максимальная объемная доля не превышает 0.15–0.18 (15–18%). Феррит выделяется преимущественно по границам зерен аустенита в интервале температур 720–650 °C ($A_{c3}-A_{c1}$), когда диффузионная подвижность атомов углерода еще высока. Хотя феррит

является мягкой фазой (твердость ~180-200 НВ), его ограниченное количество (менее 20%) не оказывает критического влияния на несущую способность сердцевины, выполняя роль пластичной матрицы, демпфирующей напряжения.

Подавление перлитного превращения. Одним из ключевых результатов моделирования является подтверждение отсутствия перлитной структуры. Карта распределения перлита (рисунок 7, б) демонстрирует, что его доля во всем объеме детали пренебрежимо мала и составляет менее 0.005 (0.5%). Это свидетельствует о правильном выборе химического состава стали. Комплексное легирование эффективно подавило диффузионный распад по перлитному механизму. Если бы в сердцевине образовалась перлитная сетка, это привело бы к резкому падению ударной вязкости и риску поломки вала при запуске мельницы (в условиях «холодного старта»). Модель подтверждает, что данная технология закалки гарантирует получение квазиоднородной структуры «мартенсит + бейнит» без опасных мягких включений.

Интерпретация градиента механических свойств. Наблюдаемая неоднородность твердости по сечению вала (падение с 55 HRC на поверхности до 28–32 HRC в осевой зоне) не является следствием недостаточной прокаливаемости стали как таковой, а диктуется физикой формирования композитной микроструктуры. Для верификации полученных в FEM-модели полей твердости была применена аналитическая проверка на основе аддитивного правила смесей (Rule of Mixtures).

Согласно этому подходу, интегральная макротвердость H_{macro} в любой координате радиуса R определяется суперпозицией микротвердостей отдельных фазовых составляющих:

$$H_{macro}(R) = \sum_{i=1}^n V_i(R) \cdot H_i \quad (6)$$

где V_i — объемная доля i -ой фазы, а H_i — ее характеристическая твердость (для мартенсита принято $H_m \approx 58\text{HRC}$, для бейнита $H_b \approx 42\text{ HRC}$, для феррито-перлитной смеси $H_{fp} \approx 22\text{HRC}$).

Таким образом, установлено, что обеспечение сквозной прокаливаемости для сечений данного диаметра при стандартной закалке невозможно. Градиент свойств является структурно-обусловленным и не может быть устранен простым повышением интенсивности охлаждения поверхности, так как лимитирующим фактором выступает теплопроводность самой стали.

Влияние структурной неоднородности на эксплуатационную надежность. Полученная в модели структура, твердая мартенситная корка и вязкая бейнитная сердцевина является оптимальной для вал-шестерни. Мартенситный слой (55 HRC) обеспечивает сопротивление контактной усталости (питтингу) на зубьях. Бейнитная сердцевина (30–35 HRC) демпфирует ударные нагрузки, возникающие при работе мельницы МШЦ. Однако выявленный градиент свойств (Рис. 7) указывает на риск возникновения высоких остаточных напряжений сжатия на поверхности. Разница удельных объемов мартенсита и бейнита создает внутренние напряжения, которые необходимо снимать проведением низкого отпуска сразу после закалки. Модель позволяет рекомендовать температуру отпуска не ниже 200–250 °C для предотвращения хрупкого разрушения зубьев

Заключение

Разработанная методика позволяет прогнозировать распределение фаз и свойств по сечению крупногабаритных валов при непрерывном охлаждении. Полученные результаты хорошо согласуются с классической теорией легирования конструкционных сталей. Известно, что никель (3.75% в 34ХНЗМА) является аустенитообразующим элементом, который эффективно снижает критическую скорость закалки и сдвигает область перлитного распада в сторону больших выдержек. Молибден (0.4%), в свою очередь, подавляет выделение феррита по границам зерен. Сов-

местное действие этих элементов приводит к появлению структуры бейнитной на диаграмме распада аустенита, который становится более доступным при непрерывном охлаждении массивных сечений. Моделирование подтвердило, что даже в центре вала диаметром более 400 мм удастся избежать формирования хрупкой перлитной сетки, что является залогом высокой конструкцион-

ной прочности изделия. Использование двух независимых программных систем (JMatPro и OpenCalphad) обеспечивает высокую достоверность результатов. Это даёт возможность оптимизировать режимы закалки, повысить однородность структуры и улучшить эксплуатационные характеристики изделия.

Библиографический список

1. Krot, P. V., Bobyr, S. V., Biba, N. V., & Dedik, M. O. (2016). *Modeling of phase transformations in the rolls of special alloy steels during quenching and deep cryogenic treatment*. Author's publications series.
2. Coroas, C., et al. (2023). Numerical modeling for the prediction of microstructure, mechanical properties and distortion in steel components. *Journal of Materials Processing Technology*.
3. Isupova, I. L., & Trusov, P. V. (2013). *Mathematical modeling of phase transformations in steels under thermomechanical loading* [in Russian]. Russian Journal of Physical Metallurgy.
4. Bouissa, Y., Jahazi, M., et al. (2020). FEM modeling and experimental validation of quench-induced distortion and residual stress in large forged steel parts. *Materials Science and Engineering A*.
5. Konstantinov, D. V., et al. (2016). *Multiscale modeling of structural and phase transformations in steel during wire drawing* [in Russian]. Metallurgical Science and Technology.
- Sozykina, A. S. (2018). *Modeling of transformations during austenitization and quenching and hardness prediction of high-chromium steels and cast irons* (Doctoral dissertation) [in Russian]. Russian Federation.
1. Li, J., Xu, Y., Wang, H., et al. (2025). A novel model for transformation-induced plasticity and its performance in predicting residual stress in quenched AISI 4140 steel cylinders. *International Journal of Mechanical Sciences*.