

УДК 519.633

doi:10.18720/SPBPU/2/id-114

А.А. Суханов

МЕТОД ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫХ РАЗНОСТЕЙ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАУГЛЕРОЖИВАНИЯ СТАЛИ



Александр Алексеевич Суханов,
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра
Великого
Россия, Санкт-Петербург
Тел.: (812) 552-7801, E-mail: Alexeevich2012@gmail.com

Аннотация

В работе рассмотрены численные методы моделирования процессов науглероживания (цементации) стальных деталей машин и механизмов. Подобная цементация осуществляется посредством термообработки изделия в специальной печи, содержащей углеродосодержащий газ при температуре 900°- 1100° С. В результате чего углерод из атмосферы печи проникает в поверхностный слой металла, повышая его твердость и прочность. Моделирование процессов науглероживания необходимо для прогнозирования глубины проникновения углерода в изделие, являющейся основным параметром газовой цементации. Для проведения численного моделирования нестационарного процесса науглероживания предлагается оригинальный метод интерполяционных разностей, учитывающий возможную зависимость коэффициента диффузии углерода от химического состава стали и имеющий высокие точность и скорость вычислений.

Ключевые слова: сталь, науглероживание, диффузия углерода, теплопроводность, численные методы

Введение

Газовая цементация или науглероживание сталей представляет собой метод химико-термической обработки, широко используемый в современном машиностроении [1-4]. При такой обработке изделия из низкоуглеродистых сталей (шестерни, валы, болты и т.д.) подвергаются длительному нагреву при достаточно высоких температурах в печи с

богатым углеродом газом, таким как метан или монооксид углерода, который при разложении выделяет атомарный углерод, диффундирующий в решетку стали. Обогащенный углеродом поверхностный слой, именуемый чехлом, при последующей закалке превращается в мартенсит с высокой твердостью. Такая обработка изделий значительно повышает их износостойкость и усталостную прочность.

Промышленная газовая цементация является длительным (десятки часов) и весьма дорогостоящим процессом [3-4]. Поэтому очень важно уметь прогнозировать степень проникновения углерода в металл как во времени, так и по сечениям. Трудность непосредственного измерения концентрации углерода в толще металла обуславливает актуальность применения численных методов моделирования процессов науглероживания, заключающихся в решении соответствующего уравнения диффузии [5-7], представляющего собой дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа, вытекающее из второго закона Фика [8]

$$\frac{\partial C(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla [D \nabla C(\mathbf{r}, t)], \quad (1)$$

где C - концентрация углерода, измеряемая обычно в массовых процентах и зависящая от координат радиус-вектора точки изделия \mathbf{r} , s и времени t , D - скалярный коэффициент диффузии, зависящий в общем случае от температуры и химического наполнения стали углеродом и легирующими элементами, m^2/s , ∇ - векторный дифференциальный оператор набла, принимающий, к примеру, в трехмерном евклидовом пространстве вид

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}.$$

Граничными условиями уравнения (1) являются общие условия третьего рода, задающие закон массообмена между поверхностью тела и окружающей средой в виде связи искомой функции с её нормальной производной на границе (задача Робена [6])

$$\frac{\partial C}{\partial n} \Big|_S = \frac{\beta}{D} (C_p - C_s), \quad (2)$$

где β - скорость науглероживания, m/s , C_s - текущая концентрация углерода на поверхности металла в данной точке, мас.%, C_p - углеродный потенциал, мас.%, характеризующий термодинамическое равновесие с газовой атмосферой и определяющий максимальную концентрацию углерода, способного внедриться в металл при бесконечном времени науглероживания, n - внешняя нормаль к поверхности изделия S .

В декартовой системе координат уравнение (1) при $D = D(C)$ и при $D = Const$ запишется соответственно в следующих видах

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (3)$$

В цилиндрической системе координат, если концентрация зависит только от радиуса r и координаты вдоль оси z (для симметричного цилиндра), уравнение (1) при $D = D(C)$ и при $D = Const$ запишется в видах

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (4)$$

В сферической системе координат для изоморфного шара уравнение (1) при $D = D(C)$ и при $D = Const$ запишется в видах

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right), \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right). \quad (5)$$

Граничные условия во всех координатных системах имеют один и тот же вид (2).

Отметим, что при нагреве металлических деталей машин и механизмов (как в естественных условиях эксплуатации, так и при термообработке) возникают не менее важные задачи теплопроводности: задачи определения распределения температуры в металле в зависимости от времени, имеющие такие же уравнения и граничные условия (1)-(5), что и в задачах диффузии. В этом случае вместо концентрации углерода C надо подставить температуру, вместо коэффициента диффузии D – коэффициент температуропроводности a , вместо отношения β/D в граничном условии (2) – относительный коэффициент теплообмена H :

$$a = \frac{\lambda}{\rho c}, \quad H = \frac{\alpha}{\lambda},$$

где λ - коэффициент теплопроводности, ρ - плотность материала, c - удельная теплоемкость, α - коэффициент теплообмена. А под C_p и C_s в (2) следует понимать температуру окружающей среды и температуру на поверхности тела.

Таким образом, все методы исследования нестационарных процессов диффузии и полученные в данной работе результаты применимы и к соответствующим задачам теплообмена [9]. Соответственно, список литературы содержит источники по теории и методам решения как задач диффузии, так и теплопроводности.

Метод интерполяционных разностей для решения уравнений диффузии и теплопроводности

Аналитическое решение уравнения диффузии (1) с граничными условиями (2) возможно только при постоянных коэффициентах диффузии и скорости науглероживания. И исключительно для простейших правильных тел, имеющих формы пластины, цилиндра и шара. Для решения реальных задач диффузии со сложной конфигурацией науглероживаемого тела применяются численные методы, наиболее популярным из которых является неявный метод конечных разностей (МКР) [10-11]. Выбор в пользу неявной схемы обусловлен ее устойчивостью при больших шагах интегрирования [12], что являлось актуально в конце прошлого века, когда быстродействие вычислительных машин было невысоким и время счета представляло собой один из основных критериев выбора метода. В настоящее время в условиях значительного повышения быстродействия компьютеров и распараллеливания вычислительных процессов на многопроцессорных системах актуальность проблемы сместилась в сторону надежности получаемых результатов. В этой связи явные методы становятся предпочтительнее в силу их большей точности при малом шаге интегрирования. К тому же в неявных схемах требуется дополнительно решать большую систему линейных уравнений (обычно методом прогонки для увеличения скорости вычислений [13-14], вносящим дополнительные погрешности решения).

Существующие явные схемы МКР для решения уравнений в частных производных с граничными условиями третьего рода недостаточно эффективны из-за известных проблем согласования решения на границе и внутри тела [15-17]. Поэтому в настоящей работе предлагается оригинальный эффективный явный метод решения уравнений (1)-(2), основанный на МКР внутри тела и интерполяции решения на его границе. Отсюда и название: метод интерполяционных разностей (МИР).

Суть метода изложим на примере одномерной задачи с постоянными коэффициентом диффузии D и скоростью науглероживания β для неограниченной пластины толщиной $2H$ (рис. 1, а).

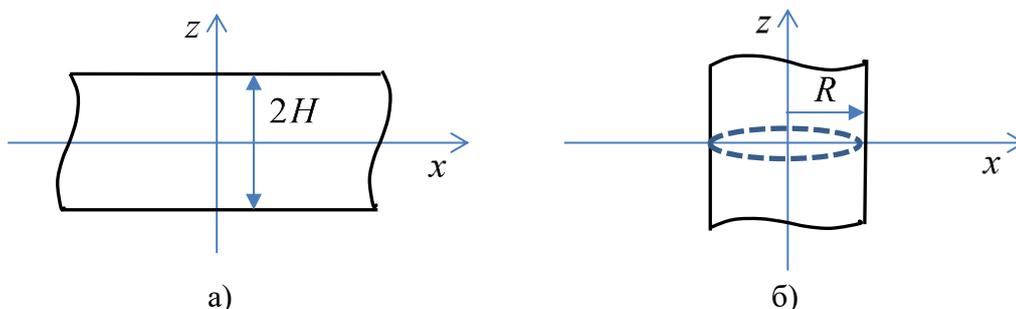


Рис. 1. Бесконечные тела
а) неограниченная пластина, б) неограниченный цилиндр

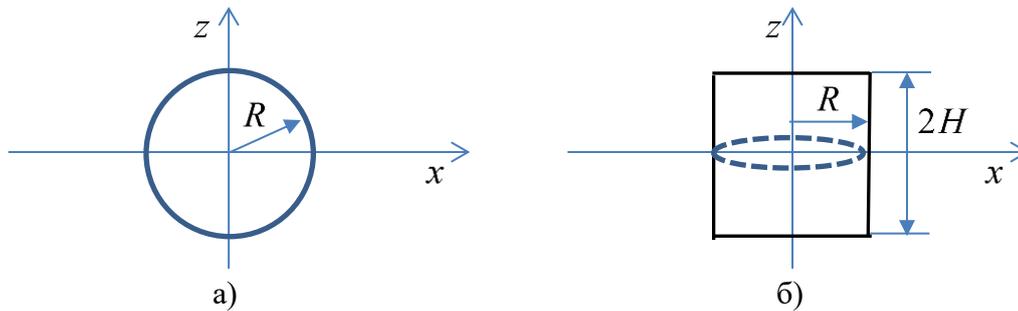


Рис. 2. Конечные тела
а) шар, б) ограниченный цилиндр

Уравнение диффузии (3) для такой пластины примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}. \quad (6)$$

Для численного решения (6), используя симметрию, разобьем интервал $[0, H]$ на n частей с шагом h точками $z_i = ih, i = 0, \dots, n$ (рис. 3).

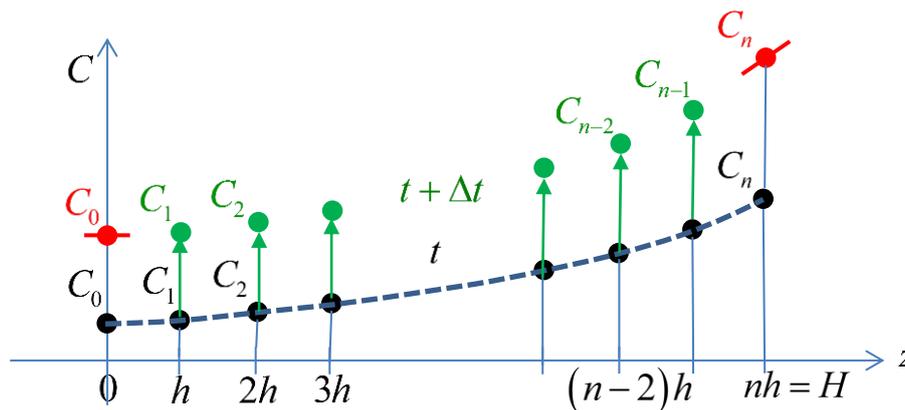


Рис. 3. Дискретизация уравнения диффузии

Пунктирной линией на рис. 3 изображен профиль распределения углерода $C(z)$ в некоторый момент времени t . Жирные черные точки соответствуют значениям концентрации углерода $C_i = C(ih)$ в этот момент времени.

Алгоритм МИР реализуется в три этапа.

Первый этап. В соответствии с МКР найдем приближенные значения вторых производных от C по координате z в (6) во внутренних узлах $ih, i = 1, \dots, n-1$ через трехточечные конечные разности второго порядка

$$C_i'' = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{h^2}, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (7)$$

Второй этап. Далее решаем систему дифференциальных уравнений (6) в пределах одного шага по времени Δt для внутренних точек интервала $[0, H]$, используя явный метод Эйлера первого порядка [12, 18]

$$C_i(t + \Delta t) = C_i(t) + DC_i''(t) \Delta t, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (8)$$

На рис. 3 соответствующие точки и значения обозначены зеленым цветом. Разумеется, вместо метода Эйлера можно использовать более точные методы интегрирования (см., например, [18, 19]). Однако, при численном решении дифференциальных уравнений в частных производных основная погрешность определяется разностными соотношениями относительно невысоко порядка (7) (подробнее об этом ниже) и поэтому при интегрировании нет смысла использовать более точные и сложные методы. Именно так поступают практически все авторы численных методов решения задач диффузии и теплопроводности [17, 20]. Более того, в явных схемах для обеспечения устойчивости метода шаг интегрирования Δt должен быть достаточно малым (см. ниже). Это гарантирует в свою очередь высокую точность вычислений, что подтверждается рассмотренными примерами конкретных расчетов.

Третий этап. Теперь осталось найти граничные значения концентраций углерода в точках $z = 0$ и $z = H$ в момент времени $t + \Delta t$. На этом сходство с МКР заканчивается. Дело в том, что большинство авторов [6, 7, 17] для универсальности определения граничных концентраций вынуждены смещать численную сетку на полшага и вводить внешние узлы, выступающие за рамки интервала $[0, H]$. Мы пойдем другим путем, не требующим подобных действий. Будем подбирать граничные значения концентраций $C_0(t + \Delta t)$ и $C_n(t + \Delta t)$ таким образом, чтобы параболические интерполяции по трем крайним узлам имели бы на границах заданные производные в соответствии с граничными условиями (2), которые в нашем случае принимают вид

$$\frac{\partial C}{\partial z}(0) = C'_0 = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z}(H) = C'_n = \frac{\beta}{D}(C_p - C_n). \quad (9)$$

Здесь на оси симметрии $z = 0$ производная равна нулю вследствие естественного условия плавности кривой $C(z)$. На рис. 3 значения этих производных условно изображены в виде красных черточек с соответствующими углами наклона. Приравнявая далее производные интерполяционных функций в граничных точках значениям (9), получаем линейные уравнения, из которых находим искомые концентрации в момент времени $t + \Delta t$

$$C_0 = \frac{4C_1 - C_2}{3}, \quad C_n = \frac{4C_{n-1} - C_{n-2} + \alpha C_p}{3 + \alpha}, \quad \alpha = 2 \frac{\beta h}{D}, \quad (10)$$

где безразмерный параметр α в наших задачах (см. ниже) принимает значение

$$\alpha = 2 \frac{\beta h}{D} = 2 \frac{2.5 \cdot 10^{-7} \cdot 10^{-5}}{1.25 \cdot 10^{-11}} = 0.4.$$

На рис. 3 найденные граничные значения концентраций при $t + \Delta t$ обозначены красным цветом и красными точками.

Далее процесс повторяется до достижения заданного времени науглероживания. Для старта алгоритма необходимы начальные концентрации углерода при $t = 0$, которые известны и определяются марочным составом рассматриваемой стали.

Замечание 1. Интерполяцию кривой науглероживания вблизи границ можно проводить и по четырем, и по большему числу приграничных узлов. При этом точность расчетов немного повысится. Так, например, при четырехточечной интерполяции формулы для граничных концентраций примут вид

$$C_0 = \frac{18C_1 - 9C_2 + 2C_3}{11}, \quad C_n = \frac{18C_{n-1} - 9C_{n-2} + 2C_{n-3} + \alpha C_p}{11 + \alpha}, \quad \alpha = 6 \frac{\beta h}{D}. \quad (11)$$

Точность такой интерполяционной схемы в наших задачах повысилась на 10-15 %. Сколько-нибудь заметного увеличения времени счета при этом не наблюдается, поскольку количество граничных узлов много меньше их общего числа. Поэтому, скорее всего, имеет смысл использовать более точную интерполяцию (11). Однако дальнейшее увеличение точности разностной интерполяции как во внутренних, так в граничных точках, не имеет особого смысла, т.к. симметричные (наиболее эффективные) интерполяции производных в приграничных точках ($z = h$, $z = H - h$) возможны только при трехточечной схеме интерполяции.

При использовании цилиндрической или сферической систем координат для расчета науглероживания образцов соответствующих форм необходимо иметь первые производные от концентрации углерода по координате вдоль радиуса (см. (4) и (5)). Они рассчитываются также по трехточечным конечным разностям и также только для внутренних узлов по формуле

$$C'_i = \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (12)$$

Остановимся теперь подробнее на коэффициенте диффузии углерода (КДУ) D . При $D = Const$ и $\beta = Const$ уравнение диффузии (1) и граничные условия (2) являются линейными и могут быть решены аналитически для

тел простых форм, изображенных на рис. 1-2. Однако даже для таких тел при переменном КДУ $D(C)$ задача становится нелинейной и может быть решена только численно. В этом случае при раскрытии правой части уравнения (1) появятся производные от D по координатам (см. (3)-(5)). Они вычисляются аналогично производным от концентрации (12):

$$D'_i = \frac{D_{i+1} - D_{i-1}}{2h}, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (13)$$

Дополнительно в этом случае придется решать трансцендентные уравнения (10) или (11) для определения граничных значений концентрации углерода, т.к. параметр α в правой части уравнений зависит через коэффициент диффузии от концентрации C_n , что стоит в левой части уравнений. Для решения этих уравнений хорошо зарекомендовал себя метод простой итерации [14]. При трехточечной интерполяции он выглядит следующим образом

$$C_n^{k+1} = \frac{4C_{n-1} - C_{n-2} + \alpha^k C_p}{3 + \alpha^k}, \quad \alpha^k = 2 \frac{\beta h}{D^k}, \quad D^k = D(C_n^k), \quad C^0 = C_p. \quad (14)$$

Итерационный процесс (14) быстро сходится. За каждый шаг точность увеличивается примерно на один знак. При заданной отсечке относительной погрешности 10^{-15} (что немногим больше машинного эпсилона $2.22 \cdot 10^{-16}$) абсолютная сходимость достигалась примерно за 15 шагов. При этом заметного увеличения времени счета не наблюдалось вследствие, как уже отмечалось, малого количества граничных узлов по сравнению с их общим числом.

Замечание 2. В большинстве задач теплопроводности аналог КДУ коэффициент температуропроводности обычно слабо зависит от температуры. Это позволяет существенно упростить вычисления, используя метод замороженных коэффициентов [21], при котором на каждом временном слое данный коэффициент считается постоянным (замороженным). На следующем шаге по времени он обновляется в соответствии с новыми значениями основных переменных (обычно берется какое-либо среднее). При этом вычисления производных (13) и решение более сложных уравнений (14) не требуются.

В рассматриваемых задачах диффузии КДУ в заданном диапазоне концентраций углерода изменяется весьма существенно и также зависит от наличия легирующих элементов. На рис. 4 приведены такие зависимости для различных марок сталей [22]. Во всех случаях КДУ изменяется от минимального до максимального значения более чем в два раза, что исключает применение метода замороженных коэффициентов для наших задач диффузии, что было подтверждено при сравнительном анализе этих двух подходов. При этом предлагаемый алгоритм МИР успешно справился

с подобными переменными коэффициентами диффузии и двухступенчатым режимом науглероживания при изменении скорости науглероживания.

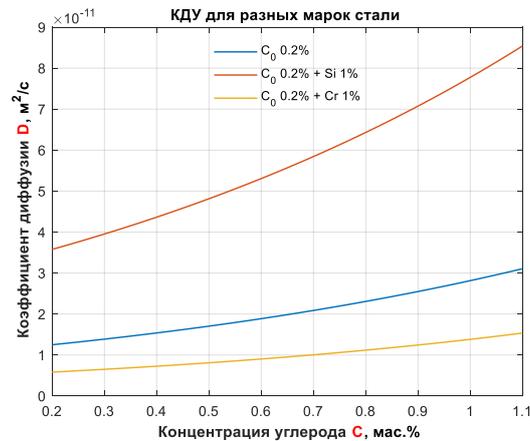


Рис. 4. КДУ в зависимости от концентрации углерода и марки стали

Мы подробно разобрали одномерную задачу диффузии. При моделировании процесса науглероживания объемных изделий необходимо решать многомерные задачи. При этом все соотношения алгоритма МИР сохраняют свою силу с той лишь разницей, что добавятся производные от концентрации и КДУ по другим координатам.

Замечание 3. При численном решении многомерных задач диффузии возникает известная проблема определения концентраций в угловых узлах сетки [20]. Эти концентрации могут в общем случае быть различными при их нахождении согласно формулам, ориентированным на разные оси. Другими словами, полученные градиенты концентраций в угловых точках могут отличаться от направления выбранной нормали, что противоречит физике. И приходится идти на те или иные компромиссы. Например, брать среднее между двумя градиентами, рассчитанными по ортогональным осям. Отличительной особенностью предлагаемого алгоритма МИР является инвариантность угловых концентраций по отношению к расчетным осям. Эта неочевидная опция алгоритма была замечена численно (совпадение всех 16-ти знаков мантиссы), а потом доказана аналитически, что свидетельствует о естественном сочетании алгоритма с физической природой процессов диффузии. Ограниченные объемы статьи не позволяют привести эти доказательства для всех возможных сочетаний граничных условий на внешней поверхности изделия и на оси симметрии.

Отметим еще одно важное и полезное свойство алгоритма МИР. При использовании цилиндрической или сферической систем координат приходится разбираться с неопределенностью типа $0/0$ при делении производной от концентрации на радиус в точке $r=0$ (см. (4) и (5)). И далеко не все методы с этим успешно справляются. Например, берутся достаточно малые отступления от оси [20]. Все это приводит к увеличению погрешности численного решения. Разработанный алгоритм свободен от

необходимости деления на ноль, т.к. все основные расчеты производятся для внутренних узлов дискретной модели. А при определении концентраций в граничных узлах подобных особенностей нет.

Критерий устойчивости метода интерполяционных разностей

Устойчивость дискретной системы (6)-(8) определяется величиной ведущего коэффициента перед C_i в правой части (8), который должен быть положительным и меньше единицы [18]

$$1 - 2 \frac{D}{h^2} \Delta t > 0 \quad \text{или} \quad \gamma = 2 \frac{D}{h^2} \Delta t < 1. \quad (15)$$

Точно такой же критерий отмечается и в [6]. Проверим работу критерия (15) на примерах наших модельных задач (см. ниже) с параметрами

$$\beta = 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ м/с}, \quad D = 1.25 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}, \quad h = 10^{-5} \text{ м}, \quad \Delta t = 1 \text{ с}. \quad (16)$$

Имеем в этом случае четырехкратный запас по устойчивости:

$$\gamma = 2 \frac{D}{h^2} \Delta t = 2 \frac{1.25 \cdot 10^{-11}}{10^{-10}} = \frac{1}{4} < 1,$$

необходимо при возможном изменении КДУ в реальных задачах.

Для более точной верификации критерия (15) проведем численные расчеты вблизи границы устойчивости, изменяя только шаг интегрирования Δt от 3.9 с ($\gamma = 0.975$) до 4.1 с ($\gamma = 1.025$). В первом случае алгоритм сходился, во втором - расходился, что подтверждает справедливость критерия (15).

Аналитические решения модельных задач

Основным критерием работоспособности и точности численных методов является сравнение получаемых результатов с аналитическими решениями. Для всех наших модельных задач при $D, \beta = \text{Const}$ таковые имеются [23]. Ниже представлены аналитические решения соответствующих задач теплопроводности, адаптированных под задачи диффузии и оптимизированных для уменьшения времени счета.

Бесконечная пластина толщиной $2H$ (рис. 1, а).

$$C(z, t) = C_p - (C_p - C_0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\mu_n \frac{z}{H}\right) \exp(-\mu_n^2 F_o). \quad (17)$$

Здесь C_0 - начальная концентрация углерода в пластине при $t = 0$, μ_n - корни характеристического уравнения

$$\operatorname{ctg} \mu_n = \frac{\mu_n}{Bi},$$

где Bi - коэффициент (критерий) Био [23], равный для выбранной пластины

$$Bi = \frac{\beta}{D} H = \frac{2.5 \cdot 10^{-7}}{1.25 \cdot 10^{-11}} 5 \cdot 10^{-3} = 100,$$

F_o - число Фурье [23], играющее роль безразмерного времени и принимающее при 48-ми часовой экспозиции значение

$$F_o = \frac{D}{H^2} t = \frac{1.25 \cdot 10^{-11}}{5^2 10^{-6}} 48 \cdot 3600 = 0.0864.$$

Коэффициенты A_n находятся по формуле

$$A_n = 2 \frac{Bi}{\mu_n} \frac{\sin \mu_n}{Bi + \sin^2 \mu_n}.$$

Теоретическая оценка и численные расчеты показали, что в сумме (17) для абсолютной сходимости ряда вполне достаточно взять 20 членов. При этом для большей точности суммирование следует начинать с меньших слагаемых, т.е. с конца.

Бесконечный цилиндр радиусом R (рис. 1, б).

$$C(r, t) = C_p - (C_p - C_0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0 \left(\mu_n \frac{r}{R} \right) \exp(-\mu_n^2 F_o). \quad (18)$$

Здесь обобщенной координатой является текущий радиус r . J_0 - функция Бесселя первого рода нулевого порядка, μ_n - корни характеристического уравнения

$$\frac{\mu_n}{Bi} = \frac{J_0(\mu_n)}{J_1(\mu_n)},$$

где J_1 - функция Бесселя первого рода первого порядка. Критерий Bi тот же. Коэффициенты A_n находятся по формуле

$$A_n = \frac{2Bi}{J_0(\mu_n)(\mu_n^2 + Bi)}.$$

И здесь для абсолютной сходимости достаточно взять 20 членов ряда (18).

Шар радиусом R (рис. 2, а).

$$C(r,t) = C_p - (C_p - C_0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\sin\left(\mu_n \frac{r}{R}\right)}{\mu_n \frac{r}{R}} \exp(-\mu_n^2 F_0), \quad (19)$$

где μ_n - корни характеристического уравнения

$$\operatorname{tg} \mu_n = -\frac{\mu_n}{Bi - 1}.$$

Коэффициенты A_n находятся по формуле

$$A_n = -\frac{Bi \cos \mu_n}{Bi - 1 + \cos^2 \mu_n}.$$

И здесь для абсолютной сходимости достаточно взять 20 членов ряда (19).

Формула (19) в отличие от (17) и (18) содержит особенность вида 0/0 при $r = 0$. Однако она легко раскрывается, превращаясь в единицу.

Конечный цилиндр радиусом R и высотой (длиной) $2H$ (рис. 2, б).

В [23] доказывается очень полезная и неочевидная теорема о представлении решения для конечного цилиндра в виде своеобразной суперпозиции решений для бесконечных пластины и цилиндра, если уравнение диффузии/теплопередачи и граничные условия линейны, что имеет место при $D, \beta = \text{Const}$. Тогда относительная концентрация углерода в любой точке конечного цилиндра в любое время равна произведению относительных концентраций в бесконечных пластине и цилиндре, пересечением которых образован цилиндр конечных размеров:

$$\frac{C_p - C(r, z, t)}{C_p - C_0} = \frac{C_p - C(z, t)}{C_p - C_0} \cdot \frac{C_p - C(r, t)}{C_p - C_0}, \quad (20)$$

где $C(z, t)$ и $C(r, t)$ - концентрации углерода с той же точке бесконечных пластины и цилиндра, что и в конечном цилиндре. При этом начальные и граничные условия для бесконечных пластины и цилиндра остаются такими же, как и для ограниченного цилиндра.

Справедливость теоремы (20) была успешно проверена двумя способами. Сравнением численного решения двумерной задачи для конечного цилиндра с аналитическим и с численными решениями двух одномерных задач с последующей их суперпозицией. Совпадения решений при параметрах (16) для цилиндра 10 x 10 мм составили 6-8 знаков.

Численные решения модельных задач диффузии и их верификация

Прежде чем решать задачи диффузии с переменным КДУ $D(C)$ (рис. 4), необходимо провести верификацию численного алгоритма и

соответствующего программного обеспечения сравнением численных и аналитических решений модельных задач при $D, \beta = Const$. Ниже приведены такие сравнения для четырех модельных задач (рис. 1-2) с одинаковой характерной длиной 10 мм, одинаковыми физическими свойствами и одинаковыми параметрами численного моделирования (16). Алгоритм МИР запрограммирован в пакете Matlab [24], удобном для вывода графической информации. Однако он основан на построчной интерпретации команд в отличие от компиляторов с языков программирования высокого уровня, которые переводят в машинный код и оптимизируют целые программные блоки. Поэтому указанное время счета следует делить на 10-20, чтобы получить оценку соответствующего времени работы алгоритма, написанного на языках C++, Паскаль и им подобным. Расчеты выполнялись на компьютере с частотой процессора 3.3 ГГц.

Для сокращения времени счета во всех задачах использовалось свойство симметрии, уменьшающее размерность сетки. После решения результаты отзеркаливались относительно осей симметрии.

Погрешности численных вычислений определялись по формуле

$$\Delta C(\mathbf{r}, t) = C(\mathbf{r}, t) - C_a(\mathbf{r}, t),$$

где $C(\mathbf{r}, t)$ - численное значение концентрации углерода в точке \mathbf{r} в момент времени t , $C_a(\mathbf{r}, t)$ - соответствующее аналитическое решение. Эти абсолютные погрешности на фоне примерно единичных концентраций близки к относительным. Максимальные их значения имеют порядок 10^{-6} и заметно уменьшаются с увеличением времени науглероживания и вблизи границ тела, что представляет наибольший интерес.

На всех рисунках вначале изображены наглядные цветные картинки распределения концентрации углерода в соответствующих сечениях с нанесением белых линий одного уровня концентрации от 0.4 до 0.9 мас.% в конце времени экспозиции 48 час. Далее для первых трех тел идут графики зависимости концентрации от координаты в моменты времени 12, 24, 36, 48 час и рядом погрешности в тех же точках по координатам и временам. Для конечного цилиндра приведены графики концентрации в различных сечениях от среднего до торцевого через 1 мм и рядом погрешности в тех же координатных точках в конечный момент времени 48 час.

Для всех задач указывается время счета. При этом на формирование и вывод графической информации уходило дополнительно 1.5 с.

На рис. 5-6 представлены результаты расчета для бесконечной пластины толщиной 10 мм. Время счета составило 0.5 с.

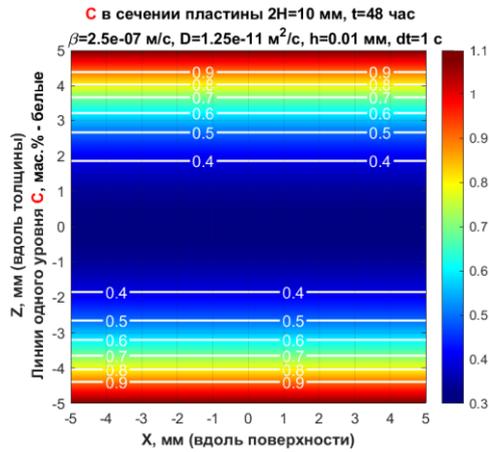


Рис. 5. Концентрации углерода в сечении бесконечной пластины

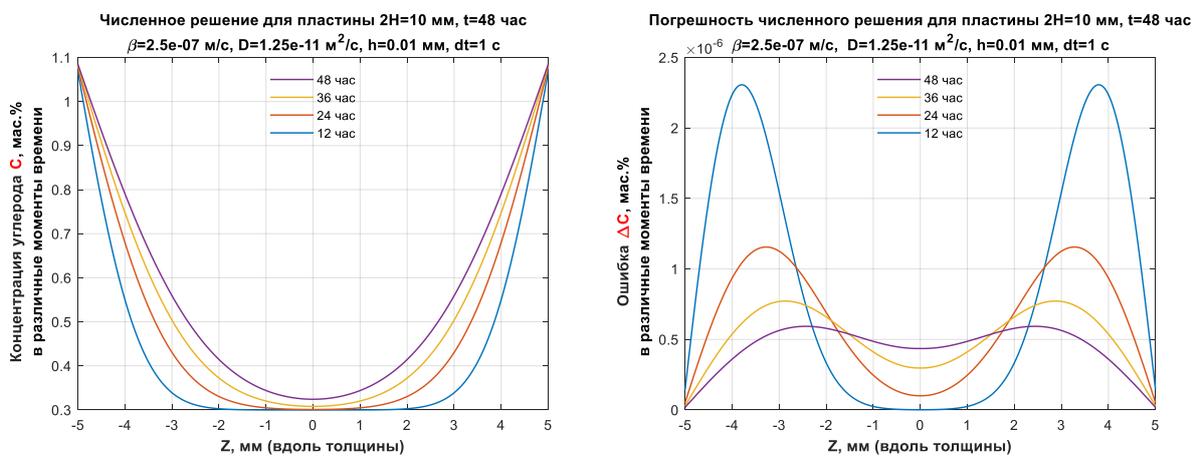


Рис. 6. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени

На рис. 7-8 представлены результаты расчета для бесконечного цилиндра диаметром 10 мм. Время счета составило 0.7 с.

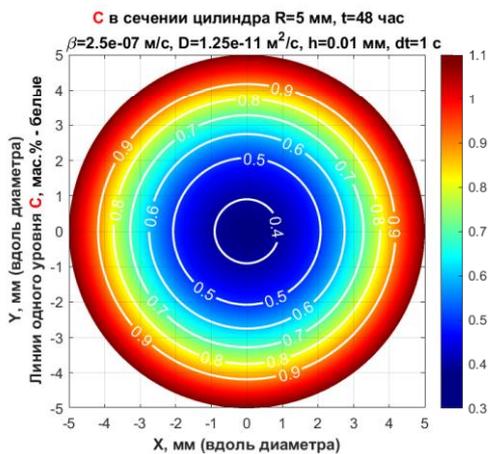


Рис. 7. Концентрация углерода в сечении бесконечного цилиндра

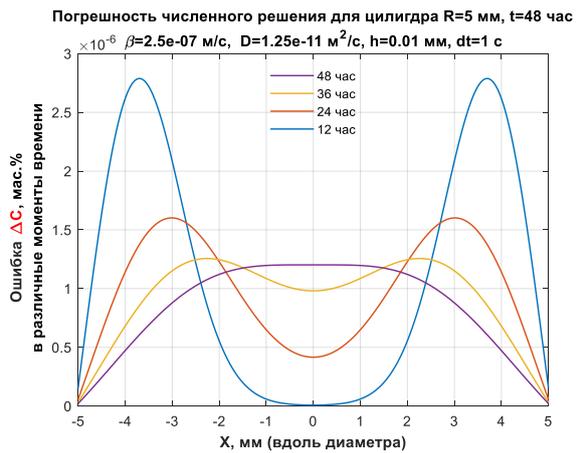
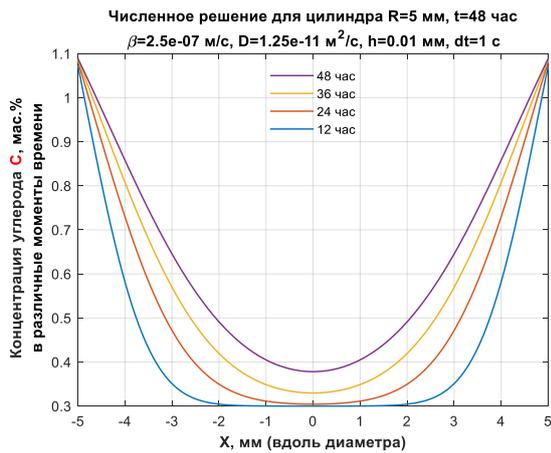


Рис. 8. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени

На рис. 9-10 представлены результаты расчета для шара диаметром 10 мм. Время счета составило 0.7 с.

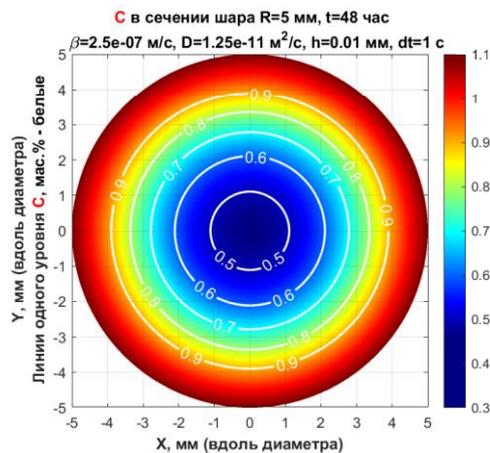


Рис. 9. Концентрация углерода в сечении шара

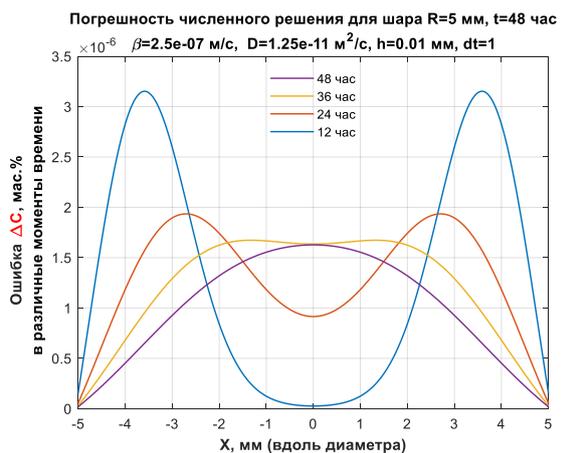
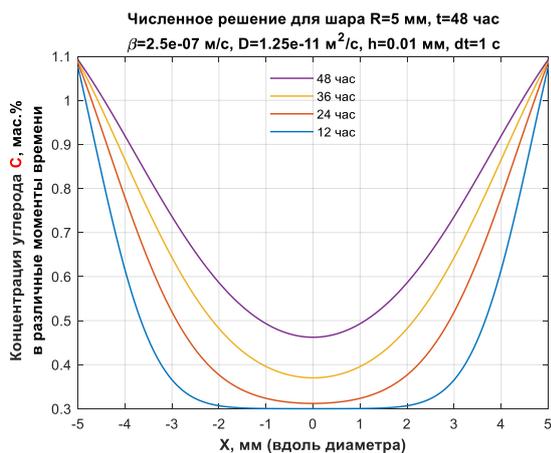


Рис. 10. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени

На рис. 11-12 представлены результаты расчета для конечного цилиндра диаметром 10 мм и высотой 10 мм. Время счета составило 560 с. Отметим, что время решения данной двумерной задачи с той же точностью через суперпозицию двух первых одномерных составило всего 2 с. Для

сравнения время счета такой же задачи на Паскале по классической неявной схеме МКР заняло 94 мин! При этом точность была 3-4 знака.

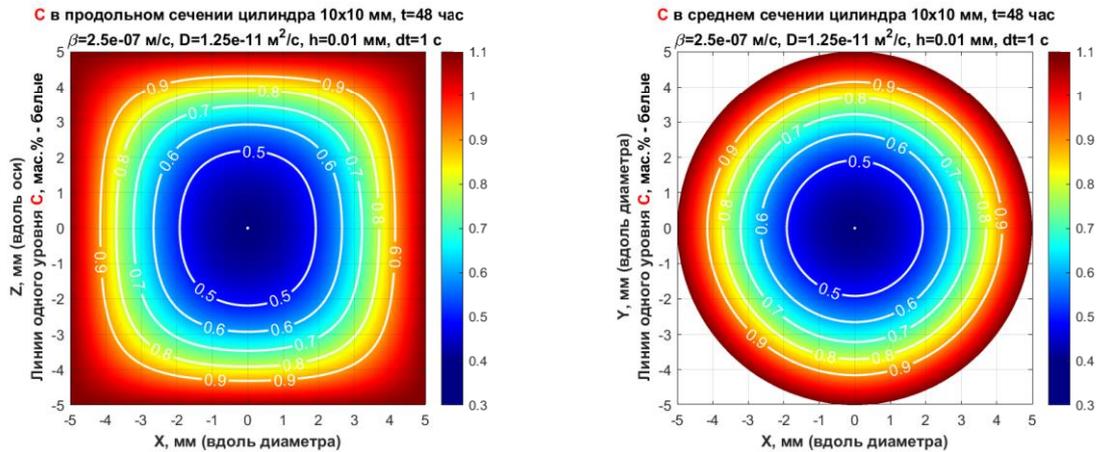


Рис. 11. Концентрации углерода в продольном и среднем сечениях цилиндра

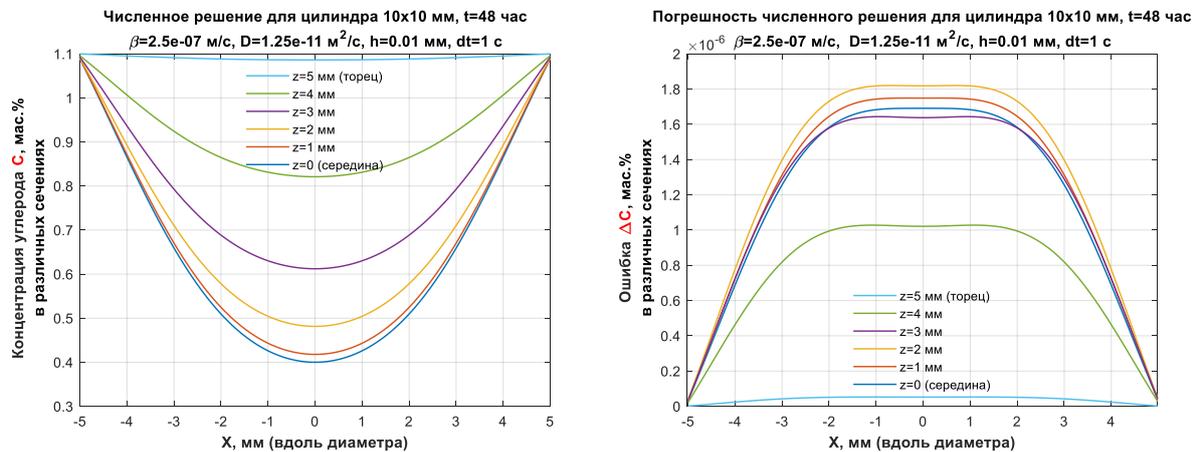


Рис. 12. Численное решение и его погрешность в различных сечениях цилиндра

Заключение

1. Разработанный метод интерполяционных разностей (МИР) для численного решения задач диффузии и теплопроводности зарекомендовал себя как надежный, быстродействующий и точный метод решения актуальных технических задач диффузии и теплопроводности в технологии машиностроения.

2. Хорошие совпадения численных расчетов с результатами натуральных экспериментов, проведенных с конкретными образцами из сталей разного химического состава, показали работоспособность и эффективность алгоритма МИР и при переменных КДУ и скорости науглероживания.

3. Распределение концентрации углерода в сечении бесконечного цилиндра мало отличается от аналогичной концентрации в среднем сечении конечного цилиндра, если длина его больше диаметра. При этом концентрации вблизи торцов цилиндра близки к концентрациям вблизи поверхности бесконечной пластины с таким же характерным размером. Эти

обстоятельства позволяют с приемлемой точностью оценить диффузионные и температурные поля в объектах со сложной геометрией формы, опираясь на решение рассмотренных модельных задач, в том числе с переменными параметрами.

4. Полученные результаты позволяют обоснованно рекомендовать рассматриваемый алгоритм решения диффузионных задач при разработке компьютерных моделей прогнозирования и контроля формирования профилей распределения углерода в реальных условиях промышленной газовой цементации.

5. Автор выражает глубокую благодарность коллегам Васильеву А.А. и Талалову В.А. за полезные консультации и плодотворное обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Корецкий Я. Цементация стали. - Л.: Судпром, 1962. - 231 с.
- [2] Цымбал В. П., Сеченов П. А., Рыбенко И. А. Новые металлургические технологии. - М.: Юрайт, 2025. - 261 с.
- [3] Майсурадзе М.В., Рыжков М.А., Беликов С.В., Корниенко О.Ю. и др. Цементация, нитроцементация и азотирование стальных изделий: учеб. пособие. - Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2021. - 102 с.
- [4] ASM Handbook, Volume 4D. Heat Treating of Irons and Steels, ASM International, 2014. - 943 p.
- [5] Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. - М.: Наука, 1964. - 488 с.
- [6] Бекман И. Н. Математика диффузии: учеб. пособие. - М.: ОнтоПринт, 2016. - 400 с.
- [7] CRANK J. The mathematics of diffusion. - Oxford: Clarendon press, 1975. - 414 p.
- [8] Fick A., Ueber Diffusion, Pogg. Ann. Phys. Chem, 1855. - p. 59-86.
- [9] Ткаченко Л.А., Репина А.В. Теория теплообмена. Учеб. пособие. - Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2017. - 151 с.
- [10] Берковский Б.М., Ноготов Е.Ф. Разностные методы исследования задач теплообмена. - Минск: Наука и техника, 1976. - 144 с.
- [11] Самарский А. А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1989. - 616 с.
- [12] Михлин С.Г., Смолицкий Х.Л. Приближенные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. - М.: Наука, 1965. - 384 с.
- [13] Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т.1. - М.: Наука, 1962. - 464 с.
- [14] Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1973. - 632 с.

- [15] Крукиер Л.А. Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений //Изв. вузов. Математика, 1979, № 7. - с. 41-52.
- [16] Ковеня В.М., Тарнавский Г.А., Яненко Н. Н. Неявная разностная схема для численного решения пространственных уравнений газовой динамики //Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1980, Т.20, № 6. - с. 1465-1482.
- [17] Крайнов А.Ю., Миньков Л.Л. Численные методы решения задач тепло- и массопереноса: учеб. пособие. - Томск: СТУ, 2016. - 92 с.
- [18] Холл Дж, Уатт Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. - М.: Мир, 1979. - 312 с.
- [19] Суханов А.А. Новые схемы интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты пятого порядка //Первая Международная научно-практическая конференция «Дифференциальные уравнения и их применения». - СПб, 1996. - с. 198-199.
- [20] Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. - М.: Энергоатомиздат, 1984. - 124 с.
- [21] Князев А.В., Метод замороженных коэффициентов //Дифференц. уравнения, 1979, Т.15, № 3, с. 551-552.
- [22] Васильев А.А., Голиков П.А. Модели для расчета коэффициента диффузии углерода в сталях и примеры их практического использования. - СПб: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2019. - 186 с.
- [23] Лыков А.В. Теория теплопроводности. - М.: Высшая школа, 1967. – 600 с.
- [24] Дьяконов В.П. Matlab. Полный самоучитель. - М.: ДМК Пресс, 2023. - 769 с.

A.A.Sukhanov

INTERPOLATION DIFFERENCE METHOD OF NUMERICAL MODELING OF STEEL CARBURIZING

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Russia

Abstract

The paper considers numerical methods of modeling the processes of carburizing of steel parts of machines and mechanisms. Such carburizing is carried out by means of heat treatment of the product in a special furnace containing carbon-containing gas at a temperature of 900°- 1100° C. As a result, carbon from the furnace atmosphere penetrates into the surface layer of the metal, increasing its hardness and strength. Modeling of carburizing processes is necessary to predict the depth of carbon penetration into the product, which is the main parameter of gas carburizing. For numerical modeling of non-stationary

carburizing process we propose an original method of interpolation differences, which takes into account the possible dependence of the carbon diffusion coefficient on the chemical composition of steel and has high accuracy and speed of calculations.

Key words: steel, carburizing, carbon diffusion, thermal conductivity, numerical methods.

REFERENCES

- [1] Koretsky J. Cementation of steel. - Leningrad: Sudprom, 1962. - 231 p.
- [2] Tsymbal V. P., Sechenov P. A., Rybenko I. A. New Metallurgical Technologies. - Moscow: Yurait, 2025. - 261 p.
- [3] Maisuradze M.V., Ryzhkov M.A., Belikov S.V., Kornienko O.Yu. et al. Cementation, nitrocementation and nitriding of steel products: textbook. - Ekaterinburg: Izd-vo of Ural University, 2021. – 102 p.
- [4] ASM Handbook, Volume 4D. Heat Treating of Irons and Steels, ASM International, 2014. - 943 p.
- [5] Karslow G., Yeager D. Thermal conductivity of solids. - Moscow: Nauka, 1964. – 488 p.
- [6] Beckman I. N. Mathematics of diffusion: textbook. - Moscow: OntoPrint, 2016. – 400 p.
- [7] CRANK J. The mathematics of diffusion. - Oxford: Clarendon press, 1975. - 414 p.
- [8] Fick A., Ueber Diffusion, Pogg. Ann. Phys. Chem, 1855. - p. 59-86.
- [9] Tkachenko L.A., Repina A.V. Theory of heat exchange. Textbook. -Kazan: Izd-vo of Kazan University, 2017. – 151p.
- [10] Berkovskiy B.M., Nogotov E.F. Differential methods of investigation of heat transfer problems. - Minsk: Nauka i tekhnika, 1976. – 144 p.
- [11] Samarskii A. A. Theory of difference schemes. - Moscow: Nauka, 1989. – 616 p.
- [12] Mikhlin S.G., Smolitsky H.L. Approximate methods for solving differential and integral equations. - Moscow: Nauka, 1965. - 384 p.
- [13] Berezin I.S., Zhidkov N.P. Methods of calculations. T.1. - Moscow: Nauka, 1962. - 464 p.
- [14] Bakhvalov N.S. Numerical methods. - Moscow: Nauka, 1973. – 632 p.
- [15] Krukier L.A. Implicit difference schemes and iterative method of their solution for one class of systems of quasilinear equations //Izvestia Vuzov. Mathematics, 1979, No. 7. - p. 41-52.
- [16] Kovenya V.M., Tarnavskiy G.A., Yanenko N.N. Implicit difference scheme for numerical solution of spatial equations of gas dynamics //Zh. Comput. matem. and matem. phys., 1980, Vol. 20, No. 6. - p. 1465-1482.
- [17] Krainov A.Yu., Minkov L.L. Numerical methods for solving problems of heat and mass transfer: textbook. - Tomsk: STT, 2016. – 92 p.

- [18] Hall G, Watt J.M. Modern numerical methods for ordinary differential equations. - Moscow: Mir, 1979. – 312 p.
- [19] Sukhanov A.A. New schemes of integration of systems of ordinary differential equations by the Runge-Kutta method of the fifth order //First International Scientific and Practical Conference “Differential Equations and Their Applications”. – Saint-Petersburg, 1996. - p. 198-199.
- [20] Patankar S. Numerical methods for solving problems of heat transfer and fluid dynamics. - Moscow: Energoatomizdat, 1984. - 124 p.
- [21] Knyazev A.V. The method of frozen coefficients //Differential Equations, 1979, Vol. 15, No. 3, p. 551-552.
- [22] Vasiliev A.A., Golikov P.A. Models for calculation of carbon diffusion coefficient in steels and examples of their practical use. – Saint-Petersburg: POLYTEKH-PRESS, 2019. – 186 p.
- [23] Lykov A.V. Theory of Heat Conduction. – M.: Vysshaya shkola, 1967. - 600 p.
- [24] Dyakonov V.P. Matlab. Full self-tutorial. – M.: DMK Press, 2023. – 769 p.