



*The mathematical model of cementation process of the object, situated in three-dimensional temperature field for boundary condition, taking into account function of carbonic potential, is developed. Numerical modeling of carbon distribution in surface coatings of steel object is carried out.*

А. Н. ЧИЧКО, О. А. САЧЕК, БНТУ

УДК 669.27:519

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЦЕМЕНТАЦИИ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ДИФФУЗИИ

Известно, что динамика процесса цементации стальных деталей может быть описана с использованием уравнения диффузии. Физически процесс цементации можно разбить на две стадии: первая стадия – нагрев цементируемой детали по заданному тепловому закону, который характеризует нагрев в печи, вторая стадия – проникновение из углеродсодержащей атмосферы углерода в деталь под действием изменяющихся температурных условий.

Исходя из физики процесса, расчет динамики цементации может быть проведен в две стадии: на первой рассчитывается температурное поле детали, формирующееся по закону нагрева печи, на второй стадии – распределение углерода, который проникает в поверхностный слой детали под действием температурного поля. Следует отметить, что, несмотря на многочисленные работы как по тепловым процессам, так и по диффузионным, задача моделирования процесса цементации по-прежнему является актуальной. Однако анализ литературных данных показывает, что значительная часть задач диффузии решается в одномерной постановке, что не позволяет учитывать пространственные особенности деталей. Особенностью решения диффузионной задачи является то, что углеродный потенциал среды насыщающей детали может изменяться, поэтому представляет научный и практический интерес решение задачи с динамически меняющимся значением углеродного потенциала среды. К сожалению, очень многие задачи, как показывает анализ литературных данных, используют постоянство углеродного потенциала на границе раздела. Очень актуальна для практики обратная задача диффузии, заключающаяся в том, чтобы по глубине цементации определить параметры процесса, при которых экспериментальные значения по диффузии совпадали бы с расчетными.

Цель настоящей статьи – разработка математических моделей процесса цементации на основе трехмерного уравнения теплопроводности и одномерного уравнения диффузии и оценка некоторых характеристик этой модели для различных граничных условий цементации, учитываемых функцией углеродного потенциала.

Уравнение диффузии, согласно второму закону Фика, имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $C$  – концентрация углерода, %;  $t$  – время, с;  $x$  – глубина слоя, м.

Для описания процесса диффузии существует ряд аналитических моделей. В частности, в работе [1] представлены следующие модели, использующие уравнение (1) при различных начальных и граничных условиях.

Модель 1. Задача диффузии для полубесконечной трубки (стержня). Пусть трубка занимает интервал  $l \leq x < \infty$ , где  $l \leq 0$ . Решение уравнения диффузии для начального условия  $C|_{t=0} = 0$ , а для  $x > l$  и граничного условия  $C|_{x=l} = \varphi(t)$ , где  $t > 0$  и  $\varphi(t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow 0$ . При этом граничное условие неоднородно и непостоянно.

Аналитическое решение для этой модели имеет вид

$$C(x, t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-l}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} \varphi \left[ t - \frac{(x-l)^2}{4Dz^2} \right] dz. \quad (2)$$

Модель 2. Задача для двух сред с различными коэффициентами диффузии. В тонкой бесконечной непроницаемой трубке находятся две среды: первая удовлетворяет условию  $x < l$  ( $l > 0$ ) с коэффициентом диффузии  $D_1$ ; вторая – условию  $x > l$  с коэффициентом диффузии  $D_2$ . В момент времени  $t=0$  при  $x=0$  вводится «единица» диффундирующего вещества, тогда в первой среде для  $x < l$  решением будет уравнение

$$C_1(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 t}} e^{-\frac{x^2}{4D_1 t}}, \quad (3)$$

а во второй среде

$$C_2(x, t) = \frac{x-l}{2\sqrt{D_2 \pi}} \int_0^t \frac{c_1(l, \tau)}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x-l)^2}{4D_2(t-\tau)}} d\tau, \quad (4)$$

где  $C_1(l, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} e^{-\frac{l^2}{4D_1 \tau}}$ .

Модель 3. Задача для двух сред с различными коэффициентами диффузии. В полубесконечной (непроницаемой) тонкой трубке при  $x > 0$  конец  $x=0$  закрыт непроницаемой перегородкой. В отрезке  $0 < x < l$  имеется постоянная концентрация  $C_0$  в среде с коэффициентом диффузии  $D_1$ . В отрезке трубки  $x > l$  диффундирующего вещества нет, но этот отрезок заполнен средой с коэффициентом диффузии  $D_2$ . При  $x=l$  находится непроницаемая перегородка, которая в момент времени  $t=0$  удаляется. С этого момента начинается процесс диффузии. Тогда для участка трубки  $0 < x < l$  решение имеет вид

$$C_1(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \Phi\left(\frac{x+l}{2\sqrt{D_1 t}}\right) - \Phi\left(\frac{x-l}{2\sqrt{D_1 t}}\right) \right\}, \quad (5)$$

где  $\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\mu^2} d\mu$  – интеграл вероятностей. (6)

При  $x=l$  концентрация будет равна

$$C_1(l, t) = \frac{C_0}{2} \Phi\left(\frac{l}{\sqrt{D_1 t}}\right). \quad (7)$$

Для участка трубки  $x > l$  решение будет иметь вид

$$C_2(x, t) = \frac{C_0(x-l)}{4\sqrt{D_2 \pi}} \int_0^t \frac{\Phi\left(\frac{l}{\sqrt{D_1 \tau}}\right)}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x-l)^2}{4D_2(t-\tau)}} d\tau. \quad (8)$$

Эти модели описывают процесс диффузии и могут быть использованы для цементации, если температурное поле является заданным. Реализация аналитического решения по этим моделям достаточно трудоемкая и приближенная. К тому же очень часто аналитические решения очень жестко привязаны к начальным и граничным условиям и внесение изменений в эти условия приводит к необходимости новых аналитических вычислений, которые с математической точки зрения могут быть очень грубыми, игнорирующими особенности процесса диффузии элемента. Поэтому с целью повышения точности и эффективности необходимо разрабатывать такие модели и численные схемы, которые позволяли бы получать численные решения при универсальных граничных условиях. Следует отметить и то, что модели разрабатываются для оптимизации технологического процесса и, следовательно, граничные условия могут меняться самым разнообразным образом. Изменение геометрии рассчитываемого объекта для аналитических моделей создает серьезные математические трудности, чего нельзя сказать о численном моделировании, которое реализуется для объекта любой пространственной конфигурации и это является очень перспективным для оптимизации технологического процесса.

В основу математической модели положено предположение о том, что диффузия протекает в детали перпендикулярно поверхности, т.е. в одном направлении. В то же время температурное поле, являющееся основой для диффузии, изменяется в трех измерениях. Эта модель позволяет оптимизировать численный ресурс ПЭВМ. Процессы диффузии протекают на микроуровне и требуют очень высокого

разрешения численной сетки, в то же время распределение температур может быть рассчитано и с гораздо меньшим разрешением сетки. Поэтому для совмещения такого типа численных схем и применяется данная математическая модель.

**Постановка задачи цементации**

В печи в углеродсодержащей среде производится нагрев объекта в форме куба с размерами  $a=b=c=10$  см. Материал образца – сталь 20ХН3А. Нижний левый угол объекта совмещен с началом координат.

Математическая модель процесса цементации для проведения расчетов включала уравнение теплопроводности и уравнение диффузии для точек пространственной области  $(x, y, z) \in \Omega_1$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{c(T)\rho(T)} \left( \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right)}{\partial z} \right), \\ \frac{\partial C}{\partial \tau} = D(C, T) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \end{cases} \quad (9)$$

Для задания граничных условий по температуре и углероду в области  $(x, y, z) \in \Omega_2$  использовали две функциональные зависимости, которые задают закон изменения температуры и концентрации углерода (углеродного потенциала) на поверхности рассчитываемого объекта (рис. 1, 2).

$$\begin{cases} C|_{\Omega_2} = f_C(\tau), \\ T|_{\Omega_2} = f_T(\tau). \end{cases} \quad (10)$$

Данные функциональные зависимости являются функциями, используемыми при работе нагревательных печей Ipsen. На рис. 3 показана геометрическая область с граничными условиями, использованными при решении задачи, где величины  $f_T(\tau)$  и  $f_C(\tau)$  – функции изменения концентрации углерода и температуры от времени – граничные условия рассчитываемого объекта. В качестве начальных условий для области  $(x, y, z) \in \Omega_1$  использовалась система:

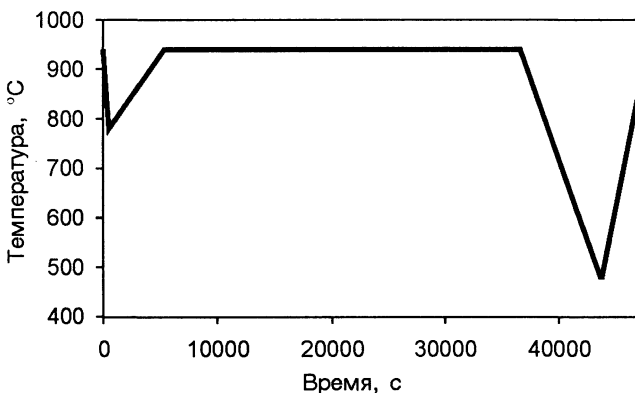


Рис. 1. Функция температуры среды в зависимости от времени цементации, использованная при формировании граничных условий математической модели

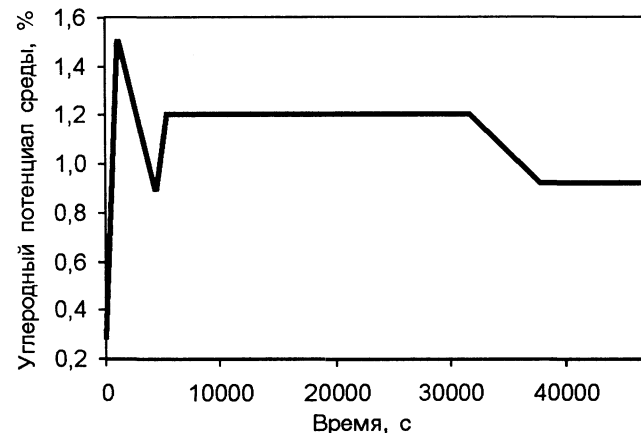


Рис. 2. Функция углеродного потенциала среды в зависимости от времени цементации, использованная при формировании граничных условий математической модели

где  $\Omega_1$  – пространство металлического объекта;  $\Omega_2$  – пространство углеродсодержащей среды печи;  $T$  – функция температуры в точках среды и объекта с координатами  $(x, y, z)$  в момент времени  $\tau$ ;  $c(T)$  – удельная теплоемкость стали при температуре  $T$ ;  $\rho(T)$  – функция плотности стали при температуре  $T$ ;  $\lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности стали при температуре  $T$ ;  $C$  – функция концентрации углерода, %;  $D(C, T)$  – коэффициент диффузии.

$$\begin{cases} C_{t=0} = 0,25, \\ T_{t=0} = 20, \end{cases} \quad (11)$$

где  $\Omega_1$  – пространство металлического объекта;  $\Omega_2$  – пространство углеродсодержащей среды печи;  $T$  – функция температуры в точках среды и объекта с координатами  $(x, y, z)$  в момент времени  $\tau$ ;  $c(T)$  – удельная теплоемкость стали при температуре  $T$ ;  $\rho(T)$  – функция плотности стали при температуре  $T$ ;  $\lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности стали при температуре  $T$ ;  $C$  – функция концентрации углерода, %;  $D(C, T)$  – коэффициент диффузии.

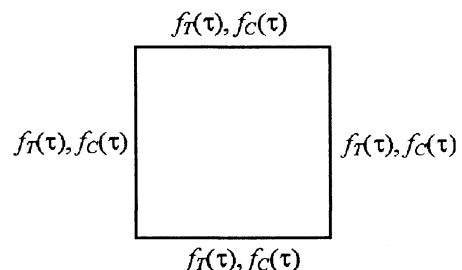


Рис. 3. Иллюстрация граничных условий для температуры и углеродного потенциала среды (проекция объекта)

Данную задачу рассматривали для двух случаев – первый случай соответствует постоянному углеродному потенциалу, второй – меняющемуся углеродному потенциалу. Решение задачи осуществляли методом конечных разностей, в результате чего уравнения системы (9)–(10) были записаны в виде аппроксимации:

$$\begin{cases} T_{i,j,k}^{n+1} = T_{i,j,k}^n + f(\lambda_i, \lambda_{i+1}, \lambda_{i-1}, c_i, \rho_i, T_{i+1,j,k}^n, T_{i,j,k}^n, T_{i-1,j,k}^n, T_{i,j+1,k}^n, T_{i,j-1,k}^n, T_{i,j,k+1}^n, T_{i,j,k-1}^n) \dots, \\ C_j^{n+1} = C_j^n + g(D_{j-1}, D_j, D_{j+1}, C_{j-1}^n, C_j^n, C_{j+1}^n). \end{cases} \quad (12)$$

Для моделирования процесса цементации была разработана программа, позволяющая по уравнению (11), граничным и начальным условиям, а также теплопроводности, плотности, теплоемкости, коэффициенту диффузии объекта определять температурное поле и распределение углерода по трем пространственным координатам. Следует отметить, что в данной модели, хотя используется одномерное уравнение для диффузии, но распределение углерода зависит от трехмерного температурного поля, которое может быть ассиметричным в зависимости от геометрии объекта.

Для расчета температурного поля использовали модули программы ПроЛит 1.0 [2], позволяющие моделировать распределение температурного поля в трехмерных объектах любой пространственной конфигурации. Важной особенностью системы ПроЛит 1.0 является возможность моделирования нескольких процессов одновременно. В процессе моделирования программа предоставляет возможность контроля не только количественных параметров, вывод графиков по различным задаваемым характеристикам объекта и пространства, но и визуальный контроль в виде цветового поля. При моделировании были выбраны следующие параметры численной схемы:  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,00003$  м (сеточный элемент),  $\Delta t = 0,8$  с (шаг по времени). Рассчитываемое число элементов составляло 157464 элемента. При решении диффузионной задачи были использованы экспериментальные данные по глубине слоя цементации, позволившие уточнить коэффициенты диффузии, использованные в математических моделях.

Результаты моделирования приведены на рис. 4–7. На рис. 4 показано распределение углерода в поверхностных слоях объекта для различной продолжительности процесса диффузии в условиях постоянного углеродного потенциала, равного 1,4%. Как видно из рисунка, с увеличением времени поверхностные слои объекта насыщаются углеродом. Наибольшая концентрация углерода в поверхностном слое не превышает 0,8%. Чем меньше продолжительность пребывания объекта в печи, тем ниже концентрация углерода. Закон изменения углерода подчиняется закону убывающей экспоненты. На рис. 5 представлена динамика изменения концентрации углерода в зависимости от времени для различных слоев рассчитываемого объекта при постоянном углеродном потенциале. Как видно из рисунка, наиболее интенсивно концентрация углерода увеличивается в поверхностных слоях объекта.

На рис. 6 показано распределение углерода в поверхностных слоях объекта для различной продолжительности процесса диффузии в условиях меняющегося углеродного потенциала, на рис. 7 представлена динамика изменения концентрации углерода в зависимости от времени для различных слоев рассчитываемого объекта при переменном углеродном потенциале. Углеродный потенциал среды изменяется по закону, приведенному на рис. 2. Как видно из рисунков, изменение концентрации углерода в поверхностных слоях аналогично изменениям углерода, приведенным на рис. 4, 5. Однако как показали расчеты, коэффициент диффузии, вычисленный по заданным экспериментальным значениям поверхностного слоя для второго случая, является по величине более близким к

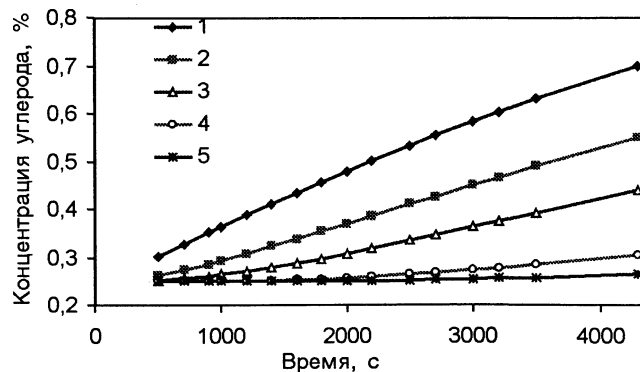
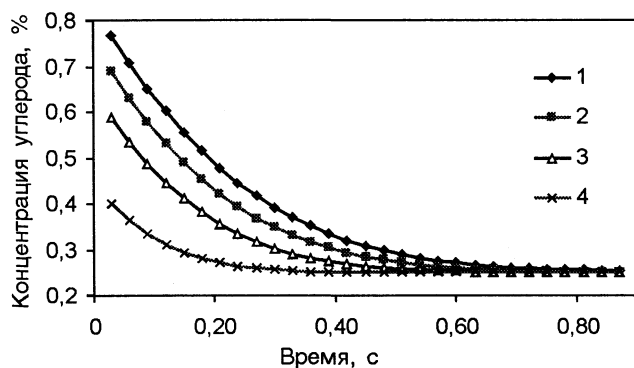


Рис. 4. Моделируемое распределение углерода в поверхностных слоях объекта, рассчитанное при постоянном потенциале углеродсодержащей среды для различной продолжительности процесса цементации: 1 –  $\tau=4300$  с; 2 – 3500; 3 – 2500; 4 – 1000 с

Рис. 5. Расчетная динамика изменения концентрации углерода, рассчитанной при постоянном углеродном потенциале, для различных слоев в зависимости от времени: 1 –  $\tau=0,03$  мм; 2 – 0,12; 3 – 0,21; 4 – 0,42; 5 – 0,6 мм

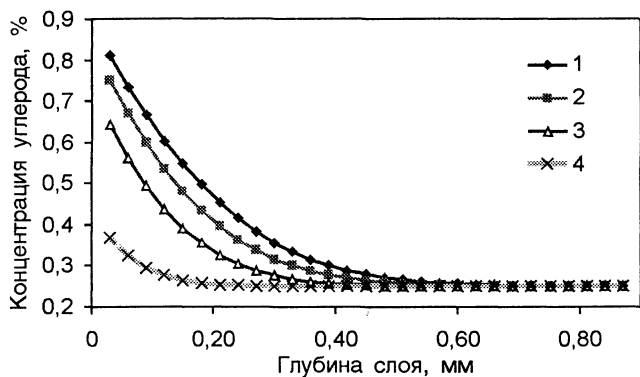


Рис. 6. Моделируемое распределение углерода в поверхностных слоях объекта, рассчитанное при переменном потенциале углеродсодержащей среды для различной продолжительности процесса цементации: 1 –  $\tau=4300$  с; 2 – 3500; 3 – 2500; 4 – 1000 с

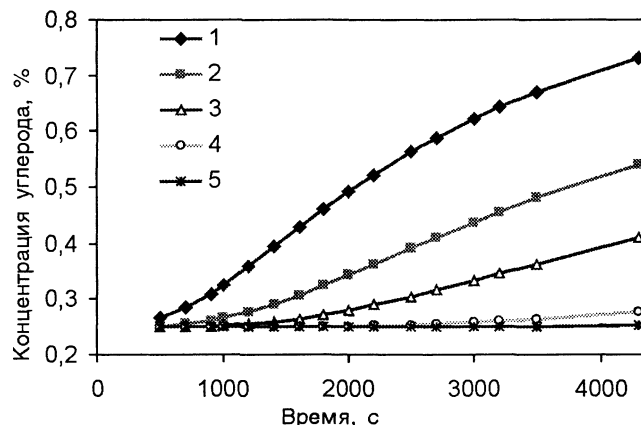


Рис. 7. Динамика изменения концентрации углерода, рассчитанной при переменном углеродном потенциале, для различных слоев в зависимости от времени: 1 –  $\tau=0,03$  мм; 2 – 0,12; 3 – 0,21; 4 – 0,42; 5 – 0,6 мм

экспериментальным значениям (рис. 8). На рисунке показана зависимость коэффициента диффузии углерода в стали (средние результаты из ряда практических опытов) от температуры [3]. Как видно из рисунка, значения коэффициента диффузии изменяются при увеличении температуры от  $0,2 \cdot 10^{-11}$ – $0,6 \cdot 10^{-11}$  до  $1,9 \cdot 10^{-11}$ – $3,4 \cdot 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/с.

Таким образом, разработана математическая модель процесса цементации объекта, учитывающая температурное поле и процесс насыщения углеродом поверхностных слоев, отличающаяся от известных совмещенным решением трехмерного уравнения теплопроводности и одномерного уравнения диффузии в условиях меняющегося углеродного потенциала, позволяющая проводить моделирование распределения углерода в трехмерных объектах, что дает возможность прогнозировать глубину цементованного слоя стального объекта. Численные решения диффузионной задачи показывают, что на качественном уровне рассчитываемое распределение углерода практически не изменяется как при постоянном, так и при меняющемся углеродном потенциале. В то же время на количественном уровне распределение по углероду в объекте различается при постоянном и переменном углеродном потенциале. Причем наилучшее согласование коэффициентов диффузии наблюдается в случае граничных условий, заданных при изменяющемся углеродном потенциале.

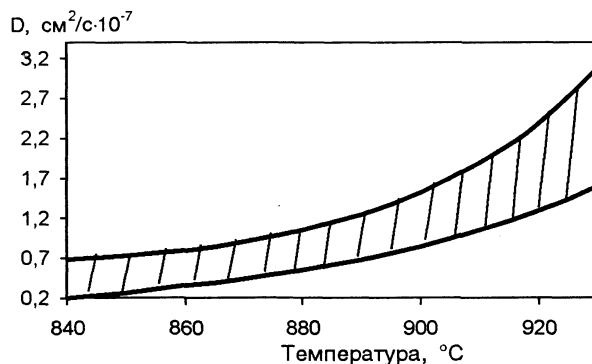


Рис. 8. Диапазон значений коэффициента диффузии в зависимости от температуры [3]

### Литература

1. Араманович И.Г., Левин В.И. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1964. С. 219–225.
2. Чичко А.Н., Соболев В.Ф., Лихоузов С.Г. Комплекс программных средств «ПРОЛИТ» для моделирования процессов течения и охлаждения расплавов // Программные продукты и системы. 2002. №4. С. 47–48.
3. Корецкий Я. Цементация стали. Л.: Гос. союз. изд-во судостр. пром-ти, 1962.