

## Материаловедение

УДК 681.5

### АНАЛИЗ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ПРИ АЗОТИРОВАНИИ

*Т.А. Бенгина*

Самарский государственный технический университет  
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

*Проведен анализ численных методов решения задачи структурообразования при газовом азотировании. Выделены преимущества и недостатки комбинированного метода, основанного на построении конечно-разностной аппроксимации по времени и применении метода конечных элементов по пространственной координате, и метода с преобразованием координат, трансформирующим изменяющуюся во времени область в стационарную. Установлено, что распределение азота по толщине поверхностного слоя существенно влияет на эксплуатационные характеристики изделия и технико-экономические показатели процесса, поэтому использование численных методов решения задачи помогает прогнозировать структуру азотированного слоя при разных технологических режимах.*

**Ключевые слова:** *газовое азотирование, теплоперенос, численное решение, метод конечных элементов, конечно-разностная аппроксимация, многофазная диффузия.*

Для изменения структуры и свойств поверхностных слоев металлов или сплавов часто используется химико-термическая обработка (ХТО). В результате такой обработки изделий повышается их износостойкость, упрочняется поверхностный слой, увеличивается сопротивление коррозии и предел выносливости. Азотирование как один из видов ХТО заключается в диффузионном насыщении поверхностного слоя металла или сплава азотом путем выдержки при определенной температуре в активно газовой среде. Как следствие этого, изменяются его структура и свойства.

Наиболее существенное влияние на показатели качества обрабатываемого изделия при азотировании оказывает именно распределение азота по глубине упрочняемого слоя. Этот процесс описывается краевой задачей теплопереноса [1, 2].

Глубина азотированного слоя значительно меньше толщины детали, поэтому математическое описание процесса определяется дифференциальным уравнением диффузии для бесконечной пластины толщиной  $2R$ :

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_i(C) \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x_i} \right), \quad (1)$$

---

*Татьяна Алексеевна Бенгина (к.т.н.), доцент кафедры «Высшая математика и прикладная информатика».*

где  $\tau > 0$ ,  $0 < x < R$ ,  $D_i(C)$  – коэффициент диффузии азота в  $i$ -той фазе,  $C(x, \tau)$  – концентрация азота в точке  $x$  в момент времени  $\tau$ .

Начальное значение концентрации азота в слое  $C_0(x)$  и положение границы раздела фаз  $\xi_{i0}(x)$  произвольно:

$$C(x, 0) = C_0(x); \quad (2)$$

$$\xi_i(x, \tau)|_{\tau=0} = \xi_{i0}(x). \quad (3)$$

Граничное условие на правой границе:

$$-D_i \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=R} = \beta_i (\Pi_N^0 - \Pi_N^i), \quad (4)$$

где  $\Pi_N^0 = \frac{P_{NH_3}}{P_{H_2}}$  – азотный потенциал печной атмосферы;  $P_{NH_3}, P_{H_2}$  – парциальные давления аммиака и водорода соответственно;  $\Pi_N^i$  – равновесный азотный потенциал соответствующей фазы;  $\beta_i$  – коэффициент массопереноса для  $i$ -той фазы.

Граничное условие на левой границе:

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (5)$$

Условия слева и справа на границах фаз:

$$C(x_i, \tau)|_{x_i=\xi_{i-0}} = C_i^-; \quad (6)$$

$$C(x_i, \tau)|_{x_i=\xi_{i+0}} = C_i^+.$$

Условие сохранения баланса вещества при фазовых переходах определяет положение межфазной границы:

$$j_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \tau} = D_i \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{\xi_{i+0}} - D_{i-1} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{\xi_{i-0}}, \quad (7)$$

где  $j_i = C_i^- - C_i^+$ ,  $i = \overline{1, N}$ ,  $N$  – количество фаз [3, 4].

В условиях конкретного производства весьма затруднительно выбрать определенный технологический режим обработки изделия с целью придания ему конкретных эксплуатационных характеристик. Сложность процесса азотирования, его долгая протяженность по времени не позволяют однозначно выбрать необходимый режим. Поэтому прогнозирование процессов формирования структуры и свойств в диффузионной зоне при азотировании является актуальной задачей.

При разработке и освоении технологического процесса азотирования предварительное моделирование и использование численных методов решения задачи структурообразования позволяют оперативно располагать информацией о формировании диффузионного слоя и скорости образования новых фаз при различных технологических режимах. Это в итоге позволяет сокращать сроки проектирования и освоения процесса обработки изделий, повышает качество и стабильность азотирования, увеличивает производительность оборудования.

Известно достаточно много методов решения задач многофазной диффузии. Чаще всего для их решения используются методы с выделением фронтов [3, 4, 5]. Такие расчетные методы имеют высокую точность, но при условии возникно-

вения или рассасывания фаз становятся практически нереализуемыми из-за сложности алгоритма.

Методы сквозного счета позволяют решать такие задачи в теории теплопроводности, однако не могут быть использованы для решения неизотермических задач многофазной диффузии. В связи с этим для решения модели позднее использовался способ, занимающий промежуточное положение между указанными выше методами. Такой подход основан на приведении вариационного соотношения к виду, удобному для построения конечно-разностной аппроксимации по времени, и применении метода конечных элементов по пространственной переменной к возникающим на каждом временном слое краевым задачам [3, 4].

При решении задачи (1)–(7) на первом шаге было получено вариационное соотношение

$$\sum_{i=0}^N \int_{\xi_i(\tau)}^{\xi_{i+1}(\tau)} \frac{\partial C}{\partial \tau} \eta dx = \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i(\tau)}^{\xi_{i+1}(\tau)} \eta \frac{\partial}{\partial x} \left( D_i \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (8)$$

где  $\eta(x)$  – произвольная функция из  $H(0, L)$ .

Вместо пространственно-временных конечных элементов применяется МКЭ только по  $x$ , а перед разностной аппроксимацией производных по времени используется формула для интегрирования по частям правой части (1) и формула

$$\int_{\xi_i(\tau)}^{\xi_{i+1}(\tau)} \frac{\partial C}{\partial \tau} \eta dx = \frac{d}{d\tau} \int_{\xi_i(\tau)}^{\xi_{i+1}(\tau)} C \eta dx - C \eta \Big|_{\xi_{i+1-0}}^{\xi_{i+1}} + C \eta \Big|_{\xi_i}^{\xi_{i+0}}; \quad (9)$$

$$\sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \eta \frac{\partial}{\partial x} \left( D_i \frac{\partial C}{\partial x} \right) dx = \sum_{i=0}^N \eta D_i \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} - \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{d\eta}{dx} D_i \frac{\partial C}{\partial x} dx. \quad (10)$$

С учетом (9), (10) соотношение (1) переписывается в виде

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\tau} \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} C \eta dx - \sum_{i=0}^N C \eta \Big|_{\xi_{i+1-0}}^{\xi_{i+1}} \frac{d\xi_{i+1}}{d\tau} + \sum_{i=0}^N C \eta \Big|_{\xi_{i+0}}^{\xi_i} \frac{d\xi_i}{d\tau} + \\ & + \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{d\eta}{dx} D_i \frac{\partial C}{\partial x} dx - \sum_{i=0}^N \eta D_i \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} = 0. \end{aligned}$$

Окончательно получим

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\tau} \int_0^L C \eta dx + \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{d\eta}{dx} D_i \frac{\partial C}{\partial x} dx + \varphi_0 \eta(0) + \varphi_N \eta(L) + \\ & + \sum_{i=1}^N \eta(\xi_i) \frac{d\xi_i}{dt} (C_i^+ - C_i^- - j_i) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Пространство пробных функций  $H^1(0,1)$  аппроксимируется конечномерным пространством  $V_N$  функций, непрерывных на  $[0, L]$  и линейных в каждом из интервалов  $(x_i; x_{i+1})$ . Набор функций  $\{\eta_1, \dots, \eta_N\}$  из  $V_N$ , в т. ч.  $\eta_k(x_j) = \delta_{kj}$ , образует базис в  $V_N$ .

Подставим  $\eta = \eta_k$  в интегральное тождество (11) и проведем неявную раз-

ностную аппроксимацию по времени:

$$\begin{aligned} & \frac{I_k - I_k^\vee}{h} + \sum_{i=0}^N \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} D_i \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \eta_k}{\partial x} dx + \varphi_0 \eta_k \Big|_{x=0} + \varphi_N \eta_k \Big|_{x=L} + \\ & + \sum_{i=1}^N \eta_k(\xi_i) (C_i^+ - C_i^- - j_i) \frac{\xi_i - \xi_i^\vee}{h} = 0, \end{aligned} \quad (12)$$

здесь  $h$  – шаг разностной схемы по времени;  $I_k = \int_0^L C \eta_k dx$ , а  $F^\vee$  означает  $F/\tau - h$ .

Уравнения МКЭ в матричной форме получаются после вычисления и суммирования вкладов конечных элементов :

$$A(\xi)C = B(\xi), \quad (13)$$

где  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$ ,  $C = (C^1, \dots, C^N)^T$ .

Вычисление концентраций  $C$  в узлах сетки (13) и определение положения границ  $\xi$  путем интегрирования уравнений (7) на каждом шаге по времени осуществляются итерационно.

Если оказывается, что для некоторого  $i$ ,  $1 \leq i \leq N+1$ , имеет место  $\xi_{i-1}^{(s+1)} \geq \xi_i^{(s+1)}$ , считается, что одна из фаз рассосалась. В этом случае одна или несколько границ выбрасываются из рассмотрения, а оставшиеся перенумеровываются. Затем вычисляются  $A(\xi^{(s+1)})$ ,  $B(\xi^{(s+1)})$  и система (13) решается относительно  $C^{(s+1)}$ . После сходимости итераций производится процесс проверки соответствия получившихся значений  $C^1$  и  $C^N$  имеющимся на концах  $[0; L]$  фазам. Если соответствие нарушилось, в точке  $x = 0$  или  $x = L$  устанавливается новая межфазная граница.

Данный метод имеет ряд достоинств: отслеживание появления и рассасывания фаз, фиксирование скачков концентраций на границах, учет переменного числа фаз и границ. Однако при этом коэффициенты диффузии и азотные потенциалы рассматриваются как линейные функции концентрации азота, что приводит к значительному упрощению задачи. Невозможность явно выделить положения границ раздела фаз, а также узнать скорости их перемещения можно также отнести к недостаткам рассмотренного метода. Учесть подобные недостатки помогает метод, основанный на преобразовании координат, которое переводит изменяющуюся во времени область в стационарную. Этот подход впервые был предложен Ландау.

В задаче (1)–(7) рассмотрим изолированную произвольную фазу, заключенную между границами  $\xi_{i-1}$  и  $\xi_i$ , и введем безразмерные координаты:

$$x_i \rightarrow \eta_i = \frac{x_i - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}}, \quad 0 \leq \eta_i \leq 1. \quad (14)$$

Уравнение (1) в новых координатах примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \left[ (\eta_i - 1) \frac{d\xi_{i-1}}{d\tau} - \eta_i \frac{d\xi_i}{d\tau} \right] \cdot \frac{\partial C}{\partial \eta_i} \cdot \frac{\partial \eta_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \eta_i} \left( D_i(C) \frac{\partial C}{\partial \eta_i} \right) \cdot \left( \frac{\partial \eta_i}{\partial x_i} \right)^2, \quad (15)$$

где

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial x_i} = \frac{1}{\xi_i - \xi_{i-1}}. \quad (16)$$

Для крайних фаз уравнение (15) имеет тот же вид, только одна из границ имеет нулевую скорость. Соответственно преобразуются граничные условия:

– для последнего уравнения

$$D_N \frac{\partial C}{\partial \eta_N} \cdot \frac{\partial \eta_N}{\partial x} \Big|_{\eta_N=1} = \beta_i \left( \pi_N^0 - \pi_N^i \Big|_{\eta_i=1} \right);$$

– для первого уравнения

$$\frac{\partial C}{\partial \eta_1} \cdot \frac{\partial \eta_1}{\partial x} \Big|_{\eta_1=0} = 0.$$

Скорости  $v_i = \frac{d\xi_i}{d\tau}$  находятся на каждом шаге по времени из уравнений (10),

которые после преобразования имеют вид

$$\gamma_i \frac{d\xi_i}{d\tau} = D_i(C) \frac{\partial C}{\partial \eta_i} \cdot \frac{\partial \eta_i}{\partial x_i} \Big|_{\xi_i+0} - D_{i-1}(C) \frac{\partial C}{\partial \eta_{i-1}} \cdot \frac{\partial \eta_{i-1}}{\partial x_{i-1}} \Big|_{\xi_i-0}. \quad (17)$$

Появление в уравнениях (15) членов, аналогичных конвективным, требует соблюдения консервативности при выборе численной аппроксимации. С учетом преобразования координат расчетная область остается постоянной. А для решения таких задач можно уже использовать численные методы с фиксированным числом узлов в каждой фазе.

В результате конечно-разностной аппроксимации система уравнений (15) примет вид

$$\lambda_\tau C + \lambda_\tau \xi \cdot \lambda_\eta C \cdot \lambda_x \eta = \lambda_{\eta\eta}^2 (DC) \cdot (\lambda_x \eta)^2. \quad (18)$$

Граничные условия:

$$\lambda_\tau C \cdot \lambda_x \eta \Big|_{\eta_i=0} = 0; \quad (19)$$

$$D_N \lambda_\eta C \cdot \lambda_x \eta \Big|_{\eta_N=1} = \beta_i \cdot (\pi_N^0 - \pi_N^i); \quad (20)$$

$$j_i \cdot \lambda_\tau \xi_i = D_i \cdot \lambda_{\eta_i} C \cdot \lambda_x \eta_i \Big|_{\eta_i=1} - D_{i-1} \cdot \lambda_{\eta_{i-1}} C \cdot \lambda_x \eta_{i-1} \Big|_{\eta_{i-1}=0}, \quad (21)$$

где  $\lambda_\tau$ ,  $\lambda_\eta$ ,  $\lambda_x$  – дифференциально-разностный оператор по  $\tau$ ,  $\eta$ ,  $x$  соответственно.

Для решения системы уравнений (18–21) используется неявный метод с конечным числом итераций, количество которых зависит от порядка системы уравнения.

К преимуществам данного метода следует отнести возможность моделирования процесса с произвольным числом одновременно существующих фаз и их чередования в области  $[0, L]$ . Для этого на очередном временном шаге осуществ-

ляется проверка на появление фазы и выбираются новые граничные условия. Расчет концентрации  $C(x, \tau)$  и скоростей  $v_i = \frac{d\xi_i}{d\tau}$  производится методом прогонки. С полученными значениями скоростей проводятся итерации с целью уточнения скоростей межфазных границ:

$$\bar{v}_i = \frac{v_i + \hat{v}_i}{2};$$

$$\xi_i = \hat{\xi}_i + \bar{v}_i \cdot \tau,$$

где  $\hat{\xi}_i, \hat{v}_i$  – значения на предыдущем временном слое.

В конце итерационного процесса необходима проверка на исчезновение фаз. Если область существования некоторых фаз оказалась меньше некоторой заранее заданной точности, то из системы уравнений (15) исключаются уравнения, соответствующие таким фазам. Соответственно преобразовываются расчетные области.

Предложенный метод численного решения задач многофазной диффузии позволяет отследить положение межфазной границы, скорость ее передвижения, при этом возможно моделирование переменного числа фаз и их толщины, разрывы концентраций на границах также учитываются. Это является несомненным достоинством при решении задач структурообразования при азотировании, так как учитываются именно те факторы, которые в конечном итоге влияют на свойства поверхностного слоя изделия.

По итогам исследования образцов технического железа были получены данные моделирования. Результаты численных расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными, что свидетельствует об адекватности рассмотренных моделей расчетов [3].

В таблице приведены данные расчетов по первому и второму численному методу решения задачи многофазной диффузии (в числителе дроби) и экспериментальные (в знаменателе).

**Расчет толщины азотируемого слоя\***

№ метода	Температура, °С	Время процесса, ч	Азотный потенциал, ат <sup>1/2</sup>	Толщина слоя, мкм		
				$\alpha$	$\gamma'$	$\varepsilon$
1	540	9	2,64	300/260	0,7/1–2	1,5/1–2
2	540	9	1,98	600/550	4/4–5	8/7–10

\*Материал – техническое железо.

Рассмотренные численные методы решения задачи многофазной диффузии при азотировании позволяют получать различное число фаз, фиксировать их появление и рассасывание, учитывать скачки концентраций на границах. Однако первый из методов затрудняет явное выделение межфазной границы и скорость ее перемещения. Поэтому в случае необходимости точного отслеживания положения межфазных границ целесообразно использовать метод решения, основанный на подстановке Ландау.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Лахтин Ю.М.* Регулирование фазового состава и содержания азота в нитридном слое при азотировании стали 38Х2МЮА // *МиТОМ*. – 1996. – № 1. – С. 5–11.
2. *Лахтин Ю.М., Коган Я.Д., Булгач А.А.* Азотирование в машиностроении // *Сб. научных трудов МАДИ*. – 1986. – С.42–49.
3. *Бенгина Т.А.* Оптимизация технологического процесса газового азотирования: Дисс. ... канд. техн. наук. – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2008. – 155 с.
4. *Коган Я.Д., Булгач А.А.* Моделирование на ЭВМ кинетики диффузионного насыщения при газовом азотировании // *МиТОМ*. – 1984. – № 1. – С. 10–19.
5. *Лившиц М.Ю.* Теория и алгоритмы оптимального управления термодиффузионными процессами технологической теплофизики по системным критериям качества: Дисс. ... докт. техн. наук. – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2001. – 425 с.

*Статья поступила в редакцию 16 февраля 2015 г.*

## ANALYSIS METHODS FOR SOLVING PROBLEMS OF STRUCTURE FORMATION DURING NITRIDING

***T.A. Bengina***

Samara State Technical University  
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation

*The paper carries out the analysis of numerical methods for solving the problem of structure formation during gas nitriding. The paper highlights the advantages and disadvantages of the combined method based on the finite-difference time approximation and the use of finite element method by the spatial coordinate, and the method with coordinate transformation which transforms a time-varying part into stationary. It was found that the distribution of nitrogen throughout of the surface layer significantly affect the performance of the product and the technical and economic parameters of the process, so the use of numerical methods for solving the problem helps predict the structure of the nitrated layer at different technological modes.*

**Keywords:** *gas nitriding, heatmass transfer, numeral decision, method of eventual elements, finite difference approximation, multiphase diffusion.*