



*Optimization mathematical models of evolution of the steel details chemical-thermal treatment are developed. Numerical modeling of distribution for carbon in the surface layers of the object is carried out.*

А. Н. ЧИЧКО, О. А. САЧЕК, БНТУ

УДК 669.27:519

## ОПТИМИЗАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ДЕТАЛЕЙ

Известно, что процесс управления химико-термической обработкой деталей является важнейшей задачей, от решения которой непосредственно зависит эффективность работы термических цехов промышленных предприятий. До сих пор, несмотря на актуальность этой задачи, многие вопросы, связанные с расчетом диффузии и моделированием процессов термической обработки, остаются уделом скорее физиков-теоретиков, чем практиков-металловедов. Многообразие математических моделей, основанных на уравнении диффузии, скорее отражает теоретические взгляды на процесс термической обработки, чем предлагает конкретные расчеты технологического процесса химико-термической обработки. Это приводит к тому, что выбор режимов термической обработки для каждой новой детали осуществляется в значительной степени на основе опыта технологов и носит эмпирический характер. Следует отметить, что современные термические цеха оснащены оборудованием, позволяющим управлять и контролировать процесс химико-термической обработки, проводимой из газовой фазы, в частности, это касается проведения цементации для стальных деталей. Известно, что оптимизация процесса цементации на основе математического моделирования является актуальной задачей, так как она дает возможность снизить энергозатраты на проведение химико-термической обработки, связанной с пространственной конфигурацией детали.

В настоящей работе предлагаются математические модели, позволяющие с высокой степенью точности проводить моделирование процесса цементации металлических конструкций. Модели используют целевую функцию, на основе которой выбирается функция коэффициента диффузии от температуры, позволяющая наилучшим образом минимизировать разброс теоретических и экспериментальных данных по концентрации углерода.

Целью настоящей работы является разработка математических моделей цементации для оптимизации и моделирования распределения углерода в образцах, помещенных в углеродсодержащую термическую среду с изменяющимся углеродным потенциалом.

Для оптимизации процесса цементации предлагаются две математические модели, каждая из которых несет свою смысловую нагрузку при расчете процесса цементации. Первая математическая модель (А) процесса цементации состоит из уравнений для оптимизации и выбора диффузионной зависимости по экспериментальным данным. Вторая модель (Б) предназначена для моделирования распределения углерода в стали. Математические модели состоят из:

- системы уравнений (модель А): теплопроводности (1) и уравнений диффузии (2)–(4) для модельного объекта, целевой функции  $F$  (5), значение которой необходимо минимизировать по отношению к функции диффузии;
- системы уравнений (модель В): теплопроводности (11) и уравнений диффузии (12)–(14) для моделирования и расчета распределения углерода в объекте.

Модель А (оптимизация)

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{c(T)\rho(T)} \left( \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right)}{\partial z} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = a_p e^{b_p T} \frac{\partial^2 C^p(x, a_p, b_p, \tau)}{\partial x^2}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = a_p e^{b_p T} \frac{\partial^2 C^p(y, a_p, b_p, \tau)}{\partial y^2}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = a_p e^{b_p T} \frac{\partial^2 C^p(z, a_p, b_p, \tau)}{\partial z^2}, \quad (4)$$

$$F_p = \sum_{i=1}^{40} (C_i^p - C_i^{\text{эксн}})^2 \rightarrow \min, \quad (5)$$

где  $(x, y, z) \in \Omega_1$ ;  $\Omega_1$  – пространство модельного металлического объекта;  $\Omega_2$  – пространство углеродсодержащей среды печи (рис. 1);  $T(x, y, z, \tau)$  – функция температуры в точке среды и объекта с координатами  $(x, y, z)$  в момент времени  $\tau$ ;  $c(T)$  – удельная теплоемкость стали модельного объекта при температуре  $T$ ;  $\rho(T)$  – функция плотности стали модельного объекта при температуре  $T$ ;  $\lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности стали модельного объекта при температуре  $T$ ;  $C_i^p = C^p(h_i, a_p, b_p, \tau)$  – значения концентрации углерода в металлическом объекте, рассчитанные с использованием модели А для  $h_i$ -й глубины куба и коэффициентов  $a_p, b_p$ ;  $C_i^{\text{эксн}}$  – значения концентраций углерода в металлическом объекте для  $h_i$ -й глубины модельного объекта – заданные режимы печи «Epsen»;  $h_i, i = 1, 40$  – глубина  $i$ -го слоя модельного объекта начиная от поверхности с шагом 0,05 мм;  $F_p$  – целевая функция, значение которой необходимо минимизировать с целью нахождения оптимальных значений  $a_p, b_p$ .

Решением системы (1)–(5) являются коэффициенты  $a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}$  позволяющие минимизировать  $F_p$ . Граничные условия II рода для температуры и концентрации углерода:

$$\begin{cases} T(x, y, z, \tau)|_{\Omega_{12}} = f_T(\tau), \\ C(x, y, z, \tau)|_{\Omega_{12}} = f_C(\tau) \end{cases} \text{ для точек с координатами } (x, y, z) \in \Omega_{12},$$

где  $\Omega_{12}$  – граница модельного объекта с углеродсодержащей средой (рис. 1);  $f_T(\tau)$  – функциональная зависимость, которая задает закон изменения температуры на границе рассчитываемого объекта (рис. 1, 2);  $f_C(\tau)$  – функциональная зависимость, которая задает закон изменения концентрации углерода (углеродного потенциала) на границе рассчитываемого объекта (рис. 1, 3).

В качестве углеродного потенциала были взяты экспериментальные данные, характеризующие закон изменения углеродного потенциала от времени в печах типа «Epsen» РУП «МАЗ». В качестве начальных значений коэффициента диффузии взяты экспериментальные данные из работы [1].

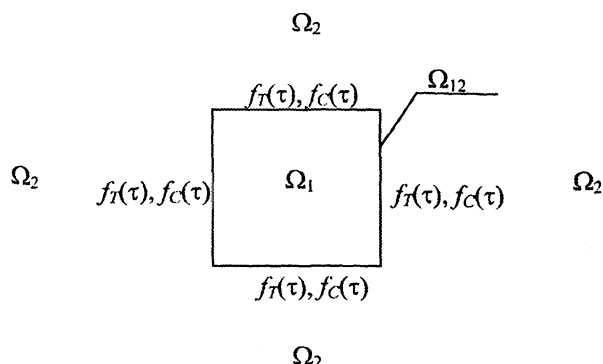


Рис. 1. Иллюстрация граничных условий для температуры и углеродного потенциала среды (проекция модельного объекта исследования)

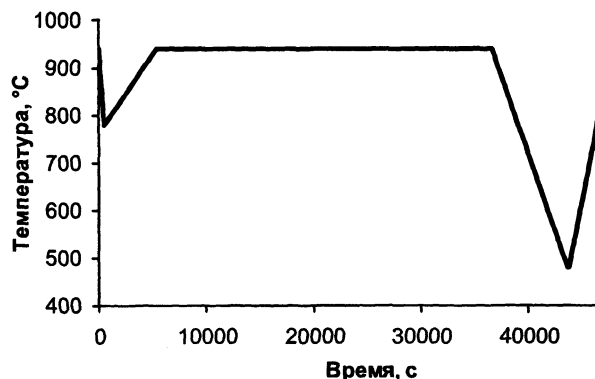


Рис. 2. Изменение температуры среды в зависимости от времени цементации

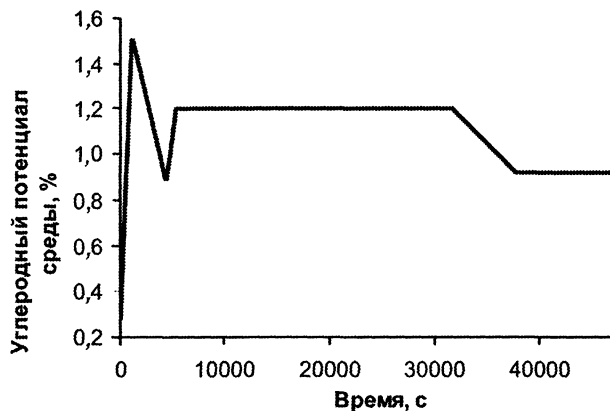


Рис. 3. Изменение значения углеродного потенциала среды в зависимости от времени цементации

На рис. 3 показана геометрическая область с иллюстрацией граничных условий рассчитываемого объекта.

Начальные условия:

$$\begin{cases} C_{t=0} = 0,1, \\ T_{t=0} = 20 \end{cases} \text{ для точек } (x, y, z) \in \Omega_1.$$

В качестве модельного объекта исследования для применения описанной выше математической модели был выбран образец из стали с размерами  $a = b = c = 100$  мм.

При решении уравнений модели А использовали следующий алгоритм оптимизации.

#### Алгоритм оптимизации диффузионной функции

**Шаг 1.** Вычисление температурного поля модельного объекта.

*Начало цикла*

**Шаг 2.** Задание  $j = 1$  (1-я итерация цикла).

**Шаг 3.** Задание коэффициентов  $a_1, b_1$  для определения функции изменения коэффициента диффузии

$$D_1 = a_1 e^{b_1 T}.$$

**Шаг 4.** Расчет диффузионного поля куба (распределение углерода по глубине объекта – функция  $C_1$ ).

**Шаг 5.** Определение значения целевой функции  $F_1$ .

**Шаг 6.** Увеличение  $j$  на 1 ( $j = 2$ ) (2-я итерация цикла).

**Шаг 7.** Задание коэффициентов  $a_2, b_2$  для определения функции изменения коэффициента диффузии

$$D_2 = a_2 e^{b_2 T}.$$

**Шаг 8.** Расчет диффузионного поля куба (распределение углерода по глубине объекта – функция  $C_2$ ).

**Шаг 9.** Определение значения целевой функции  $F_2$ .

Повторять шаги 2–5 пока  $j \leq n$ , где  $n$  – число итераций цикла.

*Конец цикла*

**Шаг k.** Определение оптимальных параметров  $a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}$ , при которых целевая функция  $F_p$  достигает минимума.

*Конец алгоритма*

После нахождения коэффициента диффузии  $D_{\text{опт}}$  было проведено моделирование распределения углерода в образцах с заданным углеродным потенциалом среды.

Моделирование температурного поля объекта производили с использованием явной схемы метода конечных разностей для трехмерного объекта (6) с помощью программных модулей системы ПроЛит 1.0. Применение и последовательность работы в системе ПроЛит описаны в [2]. При моделировании были использованы следующие параметры численной схемы:  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0005$  м,  $\Delta \tau = 0,02$  с. Теплофизические характеристики объекта:  $c = 600$  Дж/(кг·К),  $\lambda = 40$  Вт/(м·К),  $\rho = 7600$  кг/м<sup>3</sup>.

В результате моделирования была рассчитана динамика нагревания модельного объекта (рис. 4). Как видно из рисунка, она определяется функцией изменения температуры среды (граничное условие – функция  $f_T(\tau)$ ).

Моделирование диффузионного поля производили с использованием явной схемы метода конечных разностей для одномерного уравнения (7). При моделировании были использованы следующие параметры численной схемы:  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,00003$  м,  $\Delta \tau = 0,8$  с.

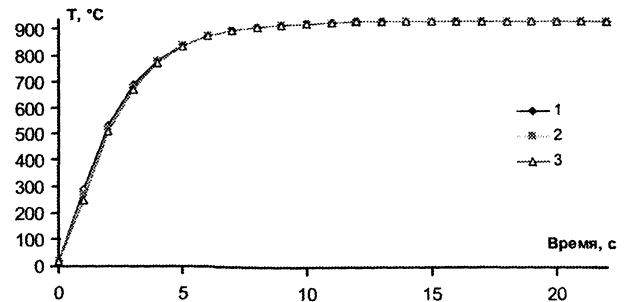


Рис. 4. Динамика изменения температуры модельного объекта на глубине: 1 – 1 мм; 2 – 2; 3 – 3 мм

Таким образом, с учетом решений уравнений системы с помощью метода конечных разностей системе уравнений (1)–(5) можно записать в следующем виде:

$$T_{i,j,k}^{m+1} = T_{i,j,k}^m + \frac{\lambda}{c\rho} \left( \frac{T_{i-1,j,k}^m - 2T_{i,j,k}^m + T_{i+1,j,k}^m}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j-1,k}^m - 2T_{i,j,k}^m + T_{i,j+1,k}^m}{\Delta y^2} + \right. \quad (6)$$

$$\left. + \frac{T_{i,j,k-1}^m - 2T_{i,j,k}^m + T_{i,j,k+1}^m}{\Delta z^2} \right),$$

$$(C_k^{m+1})^p = (C_k^m)^p + D_p \left( \frac{(C_{k-1}^m)^p - 2(C_k^m)^p + (C_{k+1}^m)^p}{\Delta x^2} \right), \quad (7)$$

$$(C_l^{m+1})^p = (C_l^m)^p + D_p \left( \frac{(C_{l-1}^m)^p - 2(C_l^m)^p + (C_{l+1}^m)^p}{\Delta y^2} \right), \quad (8)$$

$$(C_l^{m+1})^p = (C_l^m)^p + D_p \left( \frac{(C_{l-1}^m)^p - 2(C_l^m)^p + (C_{l+1}^m)^p}{\Delta z^2} \right), \quad (9)$$

$$F_p = \sum_{i=1}^{40} (C_i^p - C_i^{\text{эксп}})^2 \rightarrow \min, \quad (10)$$

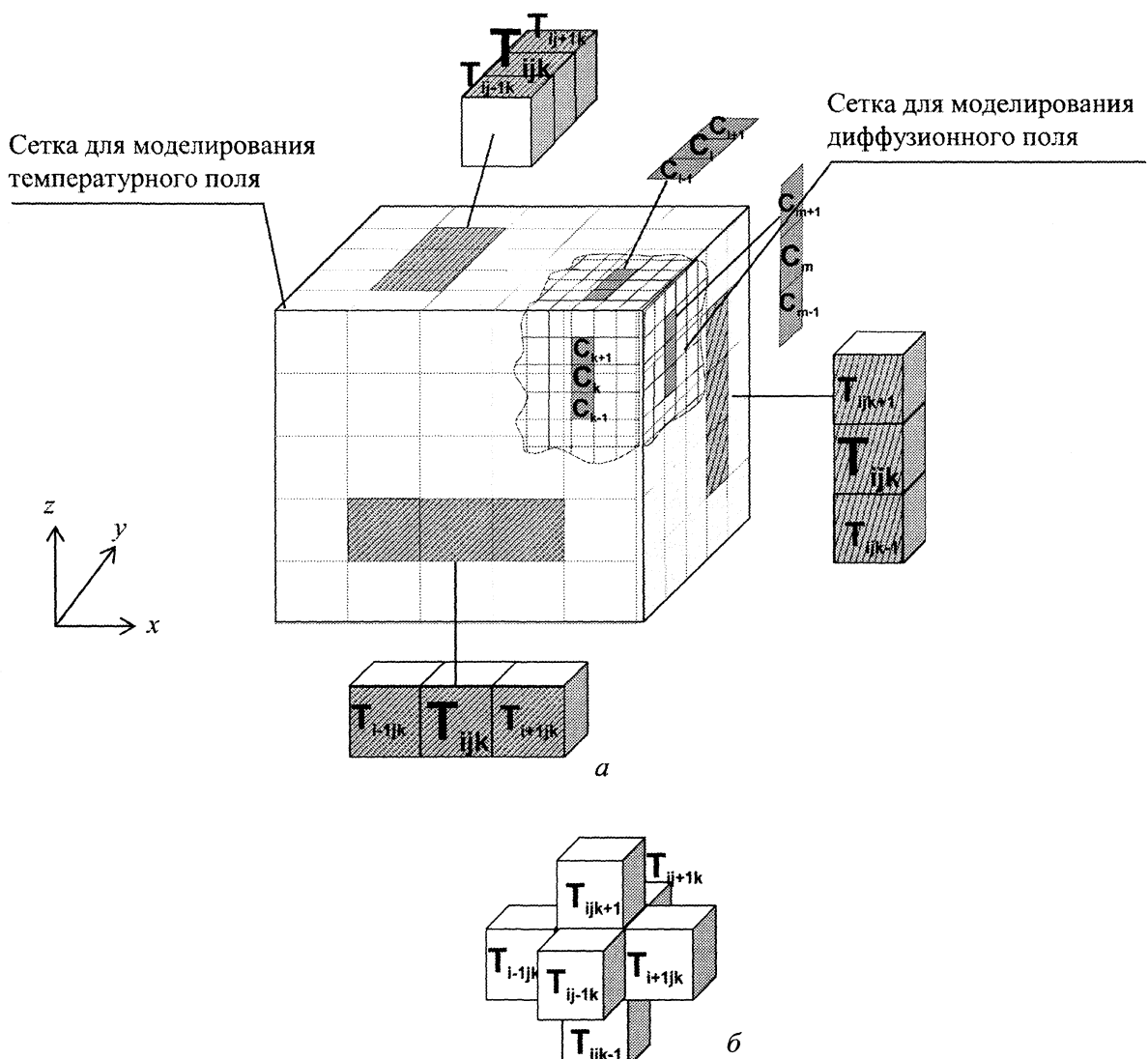


Рис. 5. Иллюстрация применения явной схемы метода конечных разностей для моделирования температурного и диффузионного полей модельного объекта: а – совмещение сеток для моделирования температурного и диффузионного полей; б – фрагмент сетки температурного поля

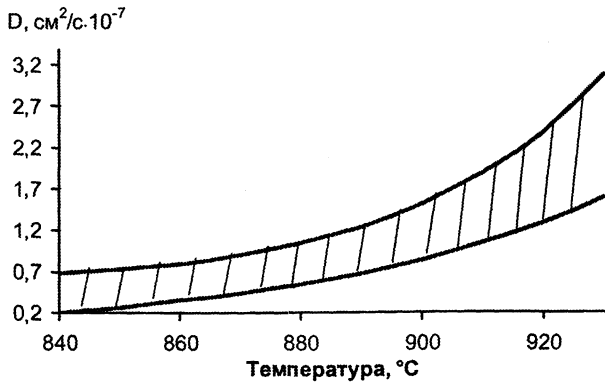


Рис. 6. Диапазон значений коэффициента диффузии в зависимости от температуры

где уравнение (6) – формула для определения температуры для  $(m + 1)$ -го временного слоя;  $i, j, k$  – узлы сеточной структуры температурного поля модельного объекта; уравнения (7)–(9) – формулы для определения концентраций на  $(m + 1)$ -м временном слое;  $k, l, n$  – узлы сеточной структуры диффузионного поля модельного объекта.

Иллюстрация применения явных схем метода конечных разностей для моделирования температурного и диффузионного полей представлена на рис. 5. Как видно из рисунка, различие между условиями моделирования температурного и диффузионного полей состоит в размере сеточного элемента. Для диффузионного поля шаг пространственной сетки меньше, чем шаг пространственной сетки температурного поля.

Для моделирования коэффициенты  $a_p, b_p$  задавались таким образом, чтобы приблизить функцию изменения значения коэффициента диффузии  $D_p(a_p, b_p, T)$  к заданному диапазону (рис. 6) [1].

**Модель В (моделирование)**

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{c(T)\rho(T)} \left( \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right)}{\partial z} \right), \tag{11}$$

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = a_{\text{опт}} e^{b_{\text{опт}} T} \frac{\partial^2 C(x, a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}, \tau)}{\partial x^2}, \tag{12}$$

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = a_{\text{опт}} e^{b_{\text{опт}} T} \frac{\partial^2 C(y, a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}, \tau)}{\partial y^2}, \tag{13}$$

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = a_{\text{опт}} e^{b_{\text{опт}} T} \frac{\partial^2 C(z, a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}, \tau)}{\partial z^2}. \tag{14}$$

При решении уравнений систем для модели В использовали следующий алгоритм расчета.

**Алгоритм расчета детали**

*Шаг 1.* Вычисление температурного поля детали.

*Шаг 2.* Расчет диффузионного поля детали (функция  $C$ ) с использованием полученных оптимальных параметров  $a_{\text{опт}}, b_{\text{опт}}$

Результаты моделирования с использованием уравнений системы для модели А приведены в таблице:

- для каждого варианта  $p$  (столбец 1) значения коэффициентов  $a_p, b_p$  (столбцы 2 и 3) и вид кривой изменения функции коэффициента диффузии  $D$  в сравнении с диапазоном, приведенным на рис. 6 (пунктирные линии);
- распределение углерода в модельном объекте по окончании цементации (период времени = 49 000 с), рассчитанное с использованием модели А (сплошная кривая) и заданные режимы печи «Ersen» (пунктирная кривая); на графики нанесены заданные значения ( $h_{\text{зад}}$ ) и расчетные значения ( $h_{\text{расч}}$ ) глубины цементации (столбец 4);
- значение целевой функции  $F_p$ .

Как видно из таблицы, вид распределения углерода в модельном объекте по окончании цементации в сравнении с заданными режимами печи «Ersen» для значений концентраций углерода различен. Например, для функции  $D = D_4 = 0,000000001e^{0,021T}$  после  $h > 0,2$  мм наблюдается слишком резкое убывание расчетной функции по распределению углерода в сравнении с заданными режимами. Для функции  $D = D_9 = 0,0000000045e^{0,022T}$  после  $h > 0,5$  мм также наблюдается расхождение расчетной функции с заданной. Подобная тенденция наблюдается и для функции  $D = D_1 = 0,000000058e^{0,019T}$ .

Моделирование распределения углерода по глубине модельного объекта для различных коэффициентов  $a_p, b_p$

$p$	$b_p$	$a_p$	Распределение углерода по глубине объекта	$F_p$
	Функция $D_p$			
1	0,019	0,000000058		0,382
2	0,0247	0,000000002		0,691
3	0,0223	0,0000000015		0,360
4	0,021	0,000000001		2,712
5	0,0226	0,000000002		0,496
6	0,0227	0,00000000165		0,381

p	$b_p$	$a_p$	Распределение углерода по глубине объекта	$F_p$
	Функция $D_p$			
7	0,2265	0,00000000165		0,334
8	0,02265	0,00000000145		0,234
9	0,0232	0,0000000009		0,261
10	0,022	0,00000000045		0,876

Анализ проведенных результатов показал, что наилучшей функцией диффузии является  $D = D_7 = 0,00000000145e^{0,02265T}$ , которая обеспечивает минимальный разброс заданного и расчетного углерода в образце (значение целевой функции  $F_7 = 0,234$ ), поэтому для проведения дальнейших расчетов была выбрана эта функция в качестве исходной для модели В. Как видно из рисунка таблицы, заданное значение глубины цементации ( $h_{зад} = 1,48$  мм) достаточно близко к экспериментальному ( $h_{эксп} = 1,4$  мм). Было проведено исследование изменения концентрации углерода в поверхностной кромке объекта. На рис. 7 показано изменение концентрации углерода во времени в поверхностной кромке модельного объекта, рассчитанное с использованием функций  $D_4$  (кривая 1),  $D_9$  (кривая 2),  $D_7$  (кривая 3), заданные режимы машины «Ersen» (кривая 4), в углеродсодержащей среде (кривая 5 – функция  $f_c(\tau)$ ). Как видно из рисунка, в начальный период диффузии наблюдается резкий подъем в проникновении углерода в металл, который далее для критического момента времени снижается. Для различных функций  $D$  динамика насыщения поверхностного слоя носит различный характер. Процесс диффузии углерода в сталь можно разделить на шесть областей:

- интервал  $t \in (0; 3500)$  – происходит активное насыщение углеродом поверхностной кромки;
- интервал  $t \in (3500; 5100)$  – величина концентрации углерода падает;

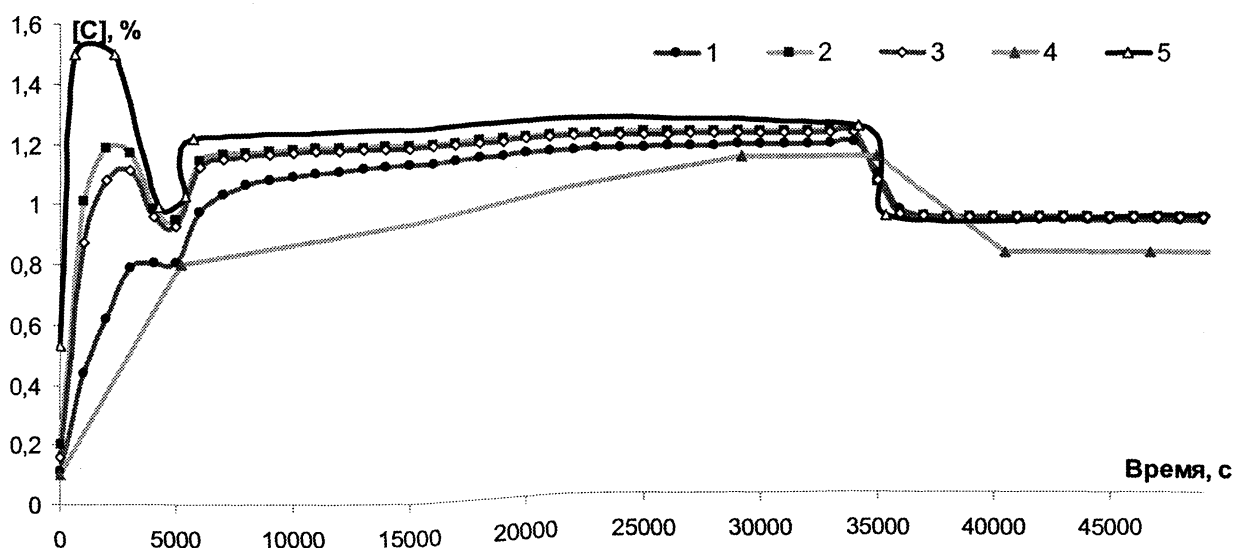


Рис. 7. Распределение углерода в поверхностной кромке объекта по времени цементации в зависимости от функции диффузии: 1 – функция  $D_4$ ; 2 – функция  $D_9$ ; 3 – функция  $D_7$ ; 4 – заданные режимы печи «Erpen»; 5 – изменение углеродного потенциала среды

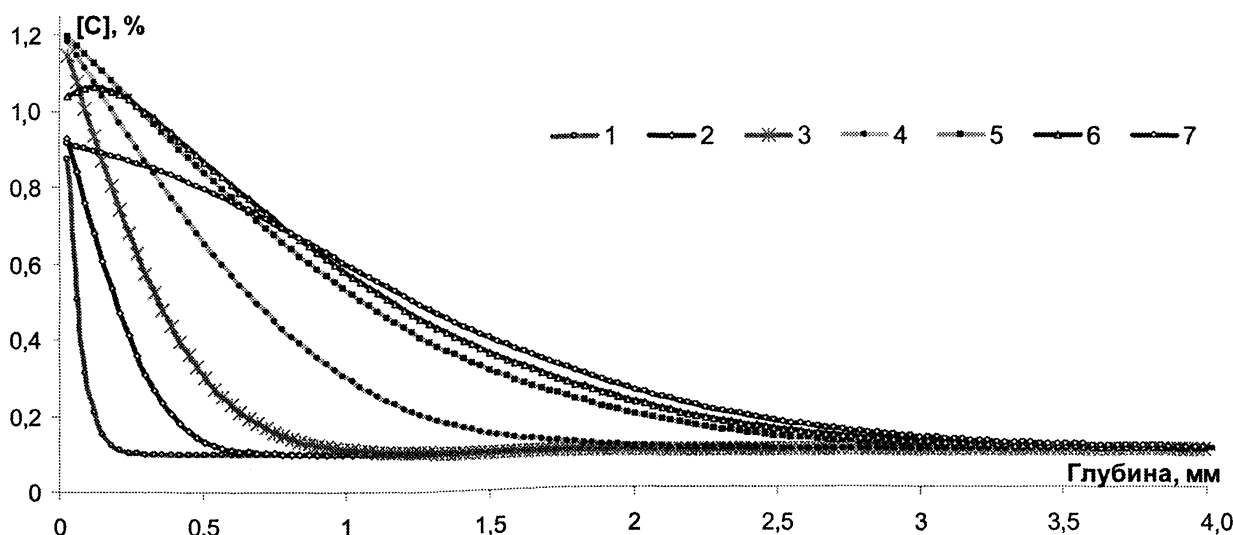


Рис. 8. Распределение углерода по глубине объекта для различных периодов времени  $\Delta t$ : 1 –  $\Delta t = 1000$  с; 2 – 5000; 3 – 7000; 4 – 15000; 5 – 30000; 6 – 35000; 7 –  $\Delta t = 49000$  с

- интервал  $t \in (5100; 6000 \dots 11000)$  – значение концентрации углерода увеличивается до значения 1,16–1,2%;
- интервал  $t \in (6000 \dots 11000; 34000)$  – величина концентрации углерода постоянна;
- интервал  $t \in (34000; 37000)$  – происходит резкое снижение концентрации до значения ...;
- интервал  $t \in (37000; 49000)$  – производится медленное снижение содержания углерода.

На начальном участке диффузии распределение углерода повторяет ход заданного углеродного потенциала и изменения температурного режима.

На рис. 8 показано распределение углерода по глубине модельного объекта для различных периодов времени. Как видно из рис. 7 и 8, процесс диффузии можно условно разбить на два этапа: вначале происходит активное насыщение углеродом (кривые 1–5, рис. 8), затем производится перераспределение углерода внутри объекта (кривые 6, 7, рис. 8). Это явление связано с уменьшением температуры среды (см. рис. 2). Поскольку при понижении температуры коэффициент диффузии и соответственно насыщение углеродом поверхностных слоев уменьшаются, углерод диффундирует в глубь объекта.

На рис. 9 приведены изменения концентраций углерода для слоев модельного объекта различной глубины, рассчитанные с использованием функции  $D_7$ . Как видно из рисунка, для различных слоев ди-



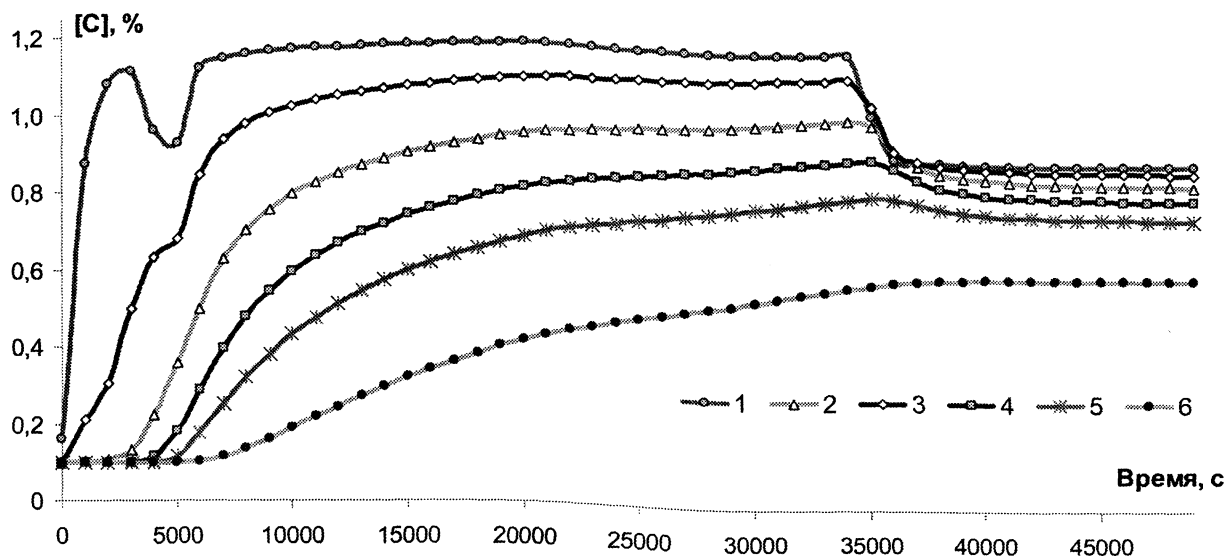


Рис. 9. Изменение концентрации углерода для слоев модельного объекта различной глубины  $h$ : 1 —  $h = 0$  (в поверхностной кромке объекта); 2 —  $h = 0,15$  мм; 3 — 0,3; 4 — 0,45; 5 — 0,6; 6 — 1 мм

намика насыщения углеродом различна. Для слоев объекта, находящихся ближе к поверхности, функция изменения концентрации повторяет характер функции изменения углеродного потенциала среды (функция  $f_C(\tau)$ ). Для более глубоких слоев динамика насыщения носит более плавный характер.

Таким образом, разработана модель химико-термической обработки стальных деталей, состоящая из трехмерного уравнения теплопроводности, одномерного уравнения диффузии по трем координатам ( $x, y, z$ ), отличающаяся от известных наличием целевой функции, граничными условиями, что дает возможность проводить численный послойный анализ распределения концентрации углерода в детали. Это имеет важное практическое значение для химико-термической обработки деталей. Представленные результаты показывают широкие возможности по моделированию распределения углерода в стали, подвергнутой цементации.

### Литература

1. Корецкий Я. Цементация стали. Л.: Гос. союз. изд-во судостроит. пром-ти, 1962.
2. Чичко А. Н., Сачек О. А., Ганжа В. А., Гашникова О. П. Алгоритмы для автоматизации обработки изображений макро- и микроструктуры сплавов // Литье и металлургия. 2008. № 1. С. 79–84.