1992年11月
第15卷第6期

重 庆 大 学 学 报
JOURNAL OF CHONGQING UNIVERSITY

Vol. 15, №. 6
Nov. 1992

(11)
65-69

两段式渗碳数学模型的精确解*

THE PRECISE SOLUTION OF MATHEMATICAL MODEL FOR TWO--STEP CARBURIZATION TREATMENT

TG156.81

曹登驹 江 涛 徐 凯
Chao Denju Juang Tao Xui Kai
(重庆大学资源综合利用工程研究中心) (重庆农机厂)

摘 要 导出了在第三类边界条件下两段式渗碳数学模型的精确解。与有限差分法数值解进行了比较，说明精确解的正确性和适应性。

关键词 渗碳；数学模型；热处理，两段式
中国图书资料分类法分类号 TG156.81

ABSTRACT The precise solution of mathematical model for two-step carburigation has been induced which is under the condition of the third boundary. This solution has been compared with the finite difference technique and its correctness and practicality have been proved.

KEY WORDS carburizing; mathematical model

0 前 言

两段式气体渗碳工艺在强渗期和扩散期采用不同的气氛碳势，具有渗速快，便于控制表面含碳量和渗层碳浓度梯度的特点，已获得广泛的应用。迄今为止，所有模拟渗碳过程的数学模型都是建立在菲克扩散定律的基础上的。在相当长的时期内，人们均认为工件表面的碳浓度即等于炉气碳势。此即是第一类边界条件。文献[1]首先提出，第三类边界条件更符合气体渗碳的客观实际。目前这一观点已得到广大研究者的认同[2-3]。在第三类边界条件下，一段式气体渗碳模型的精确解已经获得[1]。在此边界条件下，两段式渗碳的数学模型多是采用数值解法，并已应用于计算机精确控制渗碳。本文提出了在第三类边界条件下，两段式气体渗碳数学模型的解析解法，供同行们参考。

1 两段式渗碳的数学模型及边界条件

研究渗碳过程动力学的基础是菲克扩散第二定律。但是由于初始条件和边界条件的选取不同，扩散方程解的形式和物理意义则有很大的区别。经典的处理方法认为：一经渗碳过程开始进行($t>0$)，工件表面的碳浓度即等于气氛碳势。$C_s=C_g$ 被称为第一类边界条件。当

* 收文日期 1991-09-17

扩散系数为常数时，对于半无限长平面模型，两段式气体渗碳扩散方程、初始条件和边界条件表为(1)式：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c}{\partial t}=D\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2}\\ C(x,0)=C_0\\ C(\infty,t)=C_0\\ C(0,t)=C_g\end{cases}\qquad C_g=\begin{cases}C_{g1} & 0<t<T\\ C_{g2} & t>T\end{cases}\tag{1}$$

式中：　C— 碳的重量百分浓度；　C_0— 工件原始含碳量；　t— 渗碳时间

T— 第一阶段渗碳时间；　D— 碳的扩散系数；　x— 至工件表面的距离

C_{g1}，C_{g2}— 第一、二阶段的气氛碳势

近年的研究认为[1]：渗碳时由气氛到工件表面的碳的质量传递速度与两者间的碳势差成正比，即为一级反应过程。工件表面的碳浓度不等于气氛碳势，而是受界面传递和内部扩散控制的变量。此称为第三类边界条件。两段式渗碳扩散方程和边界条件表为：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c}{\partial t}=D\dfrac{\partial_2 C}{\partial x^2}\\ C(x,0)=C_0\\ C(\infty,t)=C_0\\ \beta[C_g(t)-C_s(t)]=-D\dfrac{\partial c}{\partial x}\end{cases}\qquad C_g=\begin{cases}C_{g1} & 0<t<T\\ C_{g2} & t>T\end{cases}\tag{2}$$

式中：　β— 界面反应的质量传递系数；　C_s— 工件表面的碳浓度

理论研究和渗碳实践都表明，第三类边界条件更符合气体渗碳的实际。但是第三类边界条件的建立，则增加了数学模型求解的困难。一段式渗碳模型的解析解早有报[1]，但未见求解过程。两段式渗碳模型的解析解法则未见报道。目前普遍采用有限差分法求数值解。

2　模型的精确解法

2.1　在第一类边界条件下的精确解

已知在第一类边界条件下的数学模型为(1)式，由微分方程解的叠加原理，(1)式可作如下分解：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c}{\partial t}=D\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2}\\ C(x,0)=C_0\\ C(\infty,t)=C_0\\ C(0,t)=0\end{cases}\tag{3}$$

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c}{\partial t}=D\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2}\\ C(x,0)=0\\ C(\infty,t)=C_0\\ C(0,t)=C_g(t)\end{cases}\tag{4}$$

容易得到(3)式的解：

$$C_1=C_0\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)\tag{5}$$

对于(4)式，由求解偏微分方程的杜赫美原则得到：

$$C_{II} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x/2\sqrt{Dt}}^{\infty} C_g(t) e^{-\mu^2} d\mu^2 \tag{6}$$

将 C_{g1}，C_{g2} 带入，积分得到[4]

$$C_{II} = C_{g1}\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) - (C_{g1} - C_{g2})\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)$$

故获得第一类边界条件下的解：

$$C = C_{I} + C_{II} = C_0 + (C_{g1} - C_0)\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) - (C_{g1} - C_{g2})\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(t-T)}}\right) \tag{7}$$

2.2　在第三类边界条件下的精确解

第三类边界条件下气体渗碳的数学模型表为(2)式，由解的叠加原理(2)式可作如下分解：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2} \\ -D \cdot \dfrac{\partial c}{\partial x} + \beta C_s = \beta C_g \\ C(x,0) = 0 \end{cases} \tag{8}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2} \\ -D \cdot \dfrac{\partial c}{\partial x} + \beta C_s = 0 \\ C(x,0) = C_0 \end{cases} \tag{9}$$

首先求解(8)式：设函数　$\Phi(x,t) = C - \dfrac{D}{\beta} \cdot \dfrac{\partial C}{\partial x}$　(10)

函数 $\Phi(x,t)$ 有：　$\dfrac{\partial \Phi}{\partial t} = D \cdot \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$

故可将(8)式改写为：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial t} = D \cdot \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \\ \Phi(0,t) = C_g(t) \\ \Phi(x,0) = 0 \end{cases} \tag{11}$$

由杜赫美原理求得(11)式的解为：$\Phi(x,t) = \dfrac{2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} C_g e^{-\mu^2} d\mu$　(12)

(10)式可表为 $\dfrac{\partial C}{\partial x} - \dfrac{\beta}{D} \cdot c = \dfrac{\beta}{D} \cdot \Phi(x,t)$，这是一阶线性微分方程，可方便地解得：

$$C_I = Ae^{\frac{\beta}{D}x} - \frac{\beta}{D} \cdot e^{\frac{\beta}{D}x} \int_{\infty}^{x} \Phi(\xi,t) e^{-\frac{\beta}{D}\xi} d\xi \tag{13}$$

令 $\xi = x + \eta$，则有：$C_I = Ae^{\frac{\beta}{D}x} + \dfrac{\beta}{D} \cdot \displaystyle\int_0^{\infty} \Phi(x+\eta,t) e^{-\frac{\beta}{D}\eta} d\eta$

对于半无限大模型，当 $x \to \infty$ 时，$C \to C_0$，因此必有 $A \to 0$，所以将(12)式带入后得到：

$$C_I = \frac{2\beta}{D \cdot \sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\beta}{D}\eta} \left[\int_{\frac{x+\eta}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} C_g \cdot e^{-\mu^2} d\mu \right] d\eta \tag{14}$$

采用分部积分的方法：

$$C_1=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\left[\int_{\frac{x+\eta}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_g\cdot e^{-\mu^2}d\mu\right]d(-e^{-\frac{\beta}{D}\eta})$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left[-e^{-\frac{\beta}{D}\eta}\int_{\frac{x+\eta}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu\right]_0^{\infty}+\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}e^{-\frac{\beta}{D}\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\int_{\frac{x+\eta}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu\right]$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x+\eta}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu-\frac{1}{\sqrt{\pi Dt}}\int_0^{\infty}C_ge^{-\frac{\beta}{D}\eta-(x+\eta)^2/4Dt}d\eta \tag{15}$$

首先考虑(15)式的后项，令：

$$U=\frac{1}{\sqrt{\pi Dt}}\int_0^{\infty}C_ge^{-\frac{\beta}{D}\eta-(x+\eta)^2/4Dt}d\eta$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi Dt}}\cdot e^{(\frac{\beta}{D}x+\frac{\beta^2t}{D})}\int_0^{\infty}C_ge^{-(x+\eta+2\beta t)^2/4Dt}d\eta$$

令 $\mu=(x+\eta+2\beta t)/2\sqrt{Dt}$，则有：

$$U=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot e^{(\frac{\beta}{D}x+\frac{\beta^2t}{D})}\int_{\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu \tag{16}$$

于是：

$$C_{\rm I}=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu-e^{(\frac{\beta}{D}x+\frac{\beta^2t}{D})}\cdot\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty}C_ge^{-\mu^2}d\mu$$

运用(6)式的积分方法，得到：

$$\begin{aligned}C_{\rm I}=&C_{g1}\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)-(C_{g1}-C_{g2})\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)\\&-C_{g1}\cdot\left[e^{(\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2t}{D})}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right)\right]\\&+(C_{g1}-C_{g2})\left[e^{(\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2(t-T)}{D})}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta(t-T)}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)\right]\end{aligned} \tag{17}$$

然后用完全相同的方法，求得(9)式的解：

$$C_{\rm II}=C_0\left[\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)+e^{(\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2t}{D})}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right)\right] \tag{18}$$

由解的叠加原理，两段式气体渗碳数学模型(2)式的解为：

$$\begin{aligned}C=&C_{\rm I}+C_{\rm II}\\=&C_0\left[\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)+e^{(\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2t}{D})}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right)\right]+C_{g1}\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)\\&-(C_{g1}-C_{g2})\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)-C_{g1}\left[e^{(\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2t}{D})}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right)\right]\\&+(C_{g1}-C_{g2})\left[e^{\frac{\beta x}{D}+\frac{\beta^2(t-T)}{D}}\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta(t-T)}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)\right]\end{aligned} \tag{19}$$

整理后得到：

$$\frac{C-C_0}{C_{g1}-C_0}=C'-\frac{C_{g1}-C_{g2}}{C_{g1}-C_0}\cdot C'' \tag{20}$$

式中：

$$C'=\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)-\exp\left(\frac{\beta x+\beta^2t}{D}\right)\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right) \tag{21}$$

$$C''=\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)-\exp\left(\frac{\beta x+\beta^2(t-T)}{D}\right)\cdot\mathrm{erfc}\left(\frac{x+2\beta(t-T)}{2\sqrt{D(t-T)}}\right) \tag{22}$$

3 精确解与数值解的比较

在(2)式中令 $\beta \to \infty$，因为 $D \cdot \frac{\partial c}{\partial x}$ 是有界的，故必有 $(C_g - C_s) \to 0$，即 $C(0,t) = C_g$，因此第一类边界条件是第三类边界条件下当界面碳传递系数 β 趋于无穷大时的特例。在(21)和(22)式中，当 $\beta \to \infty$ 时，余误差函数 $\operatorname{erfc}\left(\frac{x + 2\beta t}{2\sqrt{Dt}}\right)$ 和 $\operatorname{erfc}\left(\frac{x + 2\beta(t-T)}{2\sqrt{D(t-T)}}\right)$ 均等于零，(20)式与(7)式则完全等同。这在一定意义上说明了(20)式的正确性。

为了检验两段式模型的精确解的正确性，特将精确解与有限差分法数值解的结果进行比较。有限差分法采用 Crank-Nicolson 差分格式[5]，其线性方程组表为：

$$\begin{cases} -KC_{i-1}^{n+1} + 2(1+K)C_i^{n+1} - KC_{i+1}^{n+1} = KC_{i-1}^{n} + 2(1-K)C_i^{n} + KC_{i+1}^{n} \\ (1+K+L)C_0^{n+1} - KC_1^{n+1} = (1-K-L)C_0^{n} + KC_1^{n} + 2LC_g \\ (i = 1,2,3,\cdots\cdots m-1) \quad (n = 0,1,2\cdots\cdots) \end{cases} \tag{23}$$

其中 $K = \frac{D \cdot \triangle t}{(\triangle x)^2}$，$L = \frac{\beta \cdot \triangle t}{\triangle x}$，$\triangle x$ 和 $\triangle t$ 分别是距离步长和时间步长。此方程组具有三对角矩阵的特征，采用追赶法求解，编程后在计算机上运算。

设 $D = 0.271 \times 10^{-4}$mm/s，$\beta = 0.352 \times 10^{-4}$mm/s，$C_0 = 0.18\%$，$C_{g1} = 1.46\%$，$C_{g2} = 0.65\%$，$t_1 = 3$h，$t_2 = 1$h，$\triangle x = 0.05$mm，$\triangle t = 30$s。分别按(20)式和(23)式计算，结果见后表。从计算机结果看，精确解与有限差分法解基本一致。这说明精确解(20)式是正确的。

表　渗碳扩散后的碳浓度分布

x(mm)	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
C%[(20)式]	0.5715	0.5510	0.5036	0.4462	0.3831	0.3179	0.2857
C%[(23)式]	0.5695	0.5502	0.5016	0.4418	0.3827	0.3153	0.2820

由于有限差分解法中线性程组十分庞大，必须依靠计算机求解。本文导出的精确解法，既可以方便地用计算机求解，也可以采用手算，普通热处理技术人员均能用以模拟两段式气体渗碳的全过程。

参 考 文 献

1 J. Pavlossoglau. 气体渗碳数学模型的建立及应用. 见：黄士彦. 渗碳及碳氮共渗. 上海：上海科技出版社，1981年. 154～166

2 卜仁栖等. 气体渗碳中几个问题的研究. 金属热处理，1989，(5)：22～28

3 潘健生等. 钢铁化学热处理原理. 上海：上海交大出版社，1988. 83～85

4 H. S. Carslaw. Conduction of Heat in solid. 2nd ed. Great Britain：ClareDon Press，1986，60～63