



Научное программное обеспечение в образовании и науке

<https://doi.org/10.25559/SITITO.021.202503.527-538>

УДК 519.633

Интерполяционно-разностный метод решения уравнений диффузии и теплопроводности

А. А. Суханов

Оригинальная статья

ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»,
г. Санкт-Петербург, Российская Федерация

Адрес: 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29
alexeevich2012@gmail.com

Аннотация

В статье рассматривается численный метод решения параболического уравнения в частных производных, описывающего нестационарные процессы массо- и теплообмена тела с окружающей средой, с граничными условиями третьего рода, для решения которого предлагается комбинированный явный интерполяционно-разностный метод, заключающийся в сочетании метода конечных разностей (МКР) во внутренних узлах с интерполяцией разыскиваемой функции в приграничных узлах. Отсюда и название метода: интерполяционно-разностный. Такое объединение двух различных подходов позволило существенно упростить и значительно повысить точность численного решения во внутренних и граничных узлах без традиционного смещения сетки и введения внешних узлов при использовании классического МКР.

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

Конфликт интересов: автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования: Суханов А. А. Интерполяционно-разностный метод решения уравнений диффузии и теплопроводности // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2025. Т. 21, № 3. С. 527-538. <https://doi.org/10.25559/SITITO.021.202503.527-538>

© Суханов А. А., 2025



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.



Interpolation-Difference Method for Solving Diffusion and Thermal Conductivity Equations

A. A. Sukhanov

Original article

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg, Russian Federation

Address: 29 Polytechnicheskaya St., 195251 St. Petersburg, Russian Federation

alexeevich2012@gmail.com

Abstract

This article discusses a numerical method for solving a parabolic partial differential equation describing non-stationary processes of mass and heat exchange between a body and its environment, with boundary conditions of the third kind. A combined explicit interpolation-difference method is proposed for its solution. This method combines the finite difference method (FDM) at interior nodes with interpolation of the sought function at boundary nodes. This derives the name of the method: interpolation-difference. This combination of two different approaches significantly simplifies and significantly improves the accuracy of the numerical solution at interior and boundary nodes without the traditional grid shifts and external nodes required by the classical FDM.

Keywords: carburizing, carbon diffusion, thermal conductivity, numerical methods

Conflict of interests: The author declares no conflict of interests.

For citation: Sukhanov A.A. Interpolation-Difference Method for Solving Diffusion and Thermal Conductivity Equations. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2025;21(3):527-538. <https://doi.org/10.25559/SITITO.021.202503.527-538>



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 $\mathbf{r}$ и времени t , D – скалярный коэффициент диффузии, зависящий в общем случае от температуры и химического наполнения стали углеродом и легирующими элементами, $\text{м}^2/\text{с}$, ∇ – 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, $\text{м}/\text{с}$, 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 $D = \text{Const}$ 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 $D = \text{Const}$ 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 $D = \text{Const}$ 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 .

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 задач теплопроводности.

Алгоритм интерполяционно-разностного метода

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

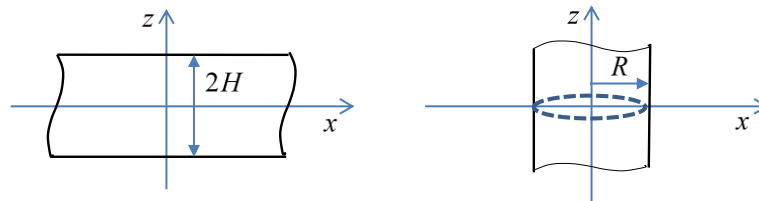


схемы обусловлен ее устойчивостью при больших шагах интегрирования [12], что являлось актуально в конце прошлого века, когда быстродействие вычислительных машин было невысоким и время счета представляло собой один из основных критериев выбора метода. В настоящее время в условиях значительного повышения 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 комбинированный явный метод решения уравнений (1)-(2), основанный на МКР внутри тела и интерполяции решения на его границе. Отсюда и название: интерполяционно-разностный метод (ИРМ).

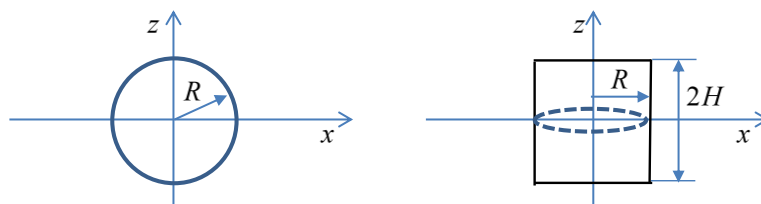
Суть метода изложим на примере одномерной задачи с постоянными коэффициентом диффузии D и скоростью науглероживания β для неограниченной пластины толщиной $2H$ (рис. 1, а).



Р и с. 1. Бесконечные тела: а) неограниченная пластина, б) неограниченный цилиндр
F i g. 1. Infinite bodies: a) infinite plate; b) infinite cylinder

Источник: здесь и далее в статье все рисунки составлены автором.

Source: Hereinafter in this article all figures were drawn up by the author.

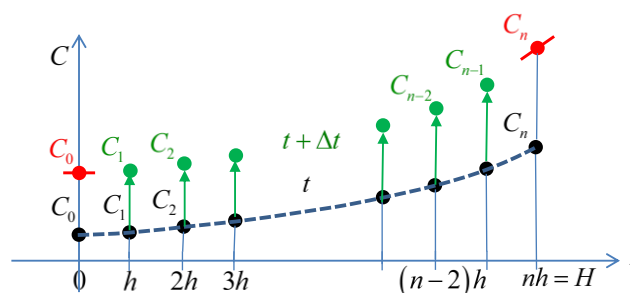


Р и с. 2. Конечные тела: а) шар, б) ограниченный цилиндр
F i g. 2. Finite bodies: a) sphere; b) finite cylinder

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).



Р и с. 3. Численная сетка и схема алгоритма
F i g. 3. Numerical grid and algorithm scheme

Пунктирной линией на рис. 1 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 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 невысокого порядка (7) 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 α – безразмерный параметр, принимающий в наших задачах 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. 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

$$C_i' = \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (11)$$

Остановимся теперь подробнее на коэффициенте диффузии углерода (КДУ) D . При $D = \text{Const}$ и $\beta = \text{Const}$ 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 (11):

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

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

$$C_n^{k+1} = \frac{4C_{n-1} - C_{n-2} + \alpha^k C_p}{3 + \alpha^k}, \quad \alpha^k = 2 \frac{\beta h}{D^k}, \quad D^k = D(C_n^k), \quad C^0 = C_p. \quad (13)$$

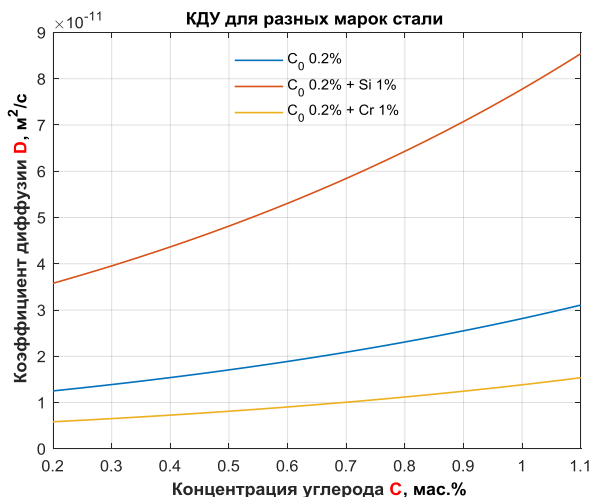
Итерационный процесс (13) быстро сходится. За каждый шаг точность увеличивается примерно на один знак. При заданной отсечке относительной погрешности 10^{-15} (что немногим больше машинного эпсилон $2.22 \cdot 10^{-16}$) абсолютная сходимость



достигалась примерно за 15 шагов. При этом заметного увеличения времени счета не наблюдалось вследствие 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 (12) и решение более сложных уравнений (13) 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 успешно справился с подобными переменными коэффициентами диффузии и даже двухступенчатым режимом науглероживания при скачкообразном изменении скорости науглероживания.



Р и с. 4. КДУ в зависимости от концентрации углерода и марки стали
F i g. 4. Carbon diffusion coefficient depending on carbon concentration and steel grade

Мы подробно разобрали одномерную задачу диффузии. При моделировании процесса науглероживания объемных изделий необходимо решать многомерные задачи. При этом все соотношения алгоритма 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 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. 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 интерполяционно-разностного метода

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

$$1 - 2 \frac{D}{h^2} \Delta t > 0 \quad \text{или} \quad \gamma = 2 \frac{D}{h^2} \Delta t < 1. \quad (14)$$

Точно такой же критерий отмечается и в [6]. Проверим работу критерия (14) на примерах наших модельных задач (см. ниже) с параметрами

$$\beta = 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ м/с}, \quad D = 1.25 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}, \quad h = 10^{-5} \text{ м}, \quad \Delta t = 1 \text{ с}. \quad (15)$$

Имеем в этом случае четырехкратный запас по устойчивости:

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

необходимый при возможном изменении КДУ в реальных задачах.

Для более точной верификации критерия (14) 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 (14).



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).

$$C(z, t) = C_p - (C_p - C_0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\mu_n \frac{z}{H}\right) \exp(-\mu_n^2 F_o). \quad (16)$$

Здесь C_0 – начальная концентрация углерода в пластине при $t=0$, μ_n – корни характеристического уравнения $\text{ctg} \mu_n = \frac{\mu_n}{Bi}$, 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

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

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 (16) для 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).

$$C(r, t) = C_p - (C_p - C_0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0\left(\mu_n \frac{r}{R}\right) \exp(-\mu_n^2 F_o). \quad (17)$$

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 (17).

Шар радиусом R (рис. 2, а).

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

где μ_n – корни характеристического уравнения

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

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 (18).

Формула (18) в отличие от (16) и (17) 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:

$$\frac{C_p - C(r, z, t)}{C_p - C_0} = \frac{C_p - C(z, t)}{C_p - C_0} \cdot \frac{C_p - C(r, t)}{C_p - C_0}, \quad (19)$$

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 (19) 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 (15) 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 $D, \beta = \text{Const}$. Ниже приведены такие сравнения для четырех модельных задач (рис. 1-2) с одинаковой характерной длиной образцов 10 мм, одинаковыми физическими свойствами и одинаковыми параметрами численного моделирования (15). Алгоритм запрограммирован в пакете Matlab [24], удобно для вывода графической информации. 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 оси симметрии. Погрешности численных вычислений определялись по формуле

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

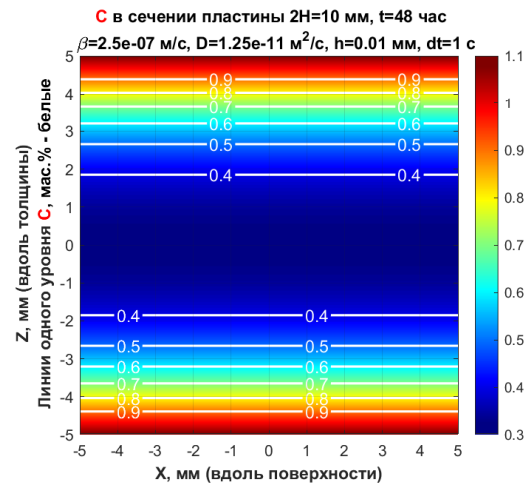
где $C(\mathbf{r}, t)$ – численное значение концентрации углерода в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t , $C_a(\mathbf{r}, t)$ – соответствующее аналитическое решение. Эти абсолютные погрешности на фоне примерно единичных концентраций близки к относительным. Максимальные их значения имеют порядок 10^{-6} 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

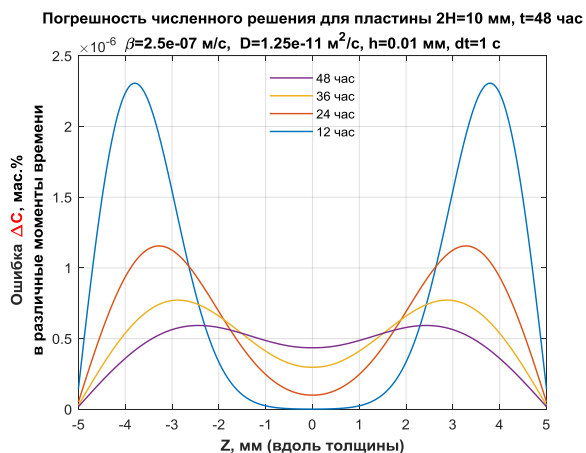
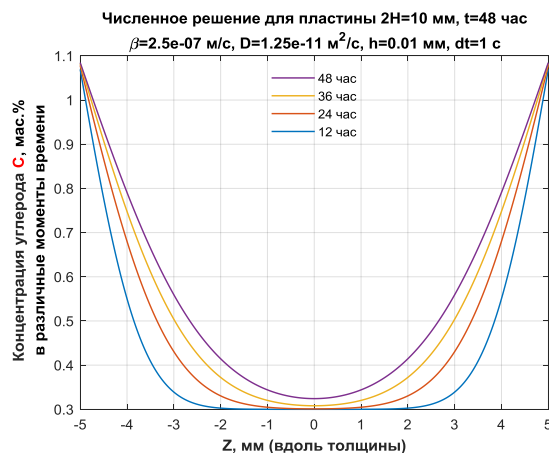
погрешности в тех же координатных точках в конечный момент времени 48 час.

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

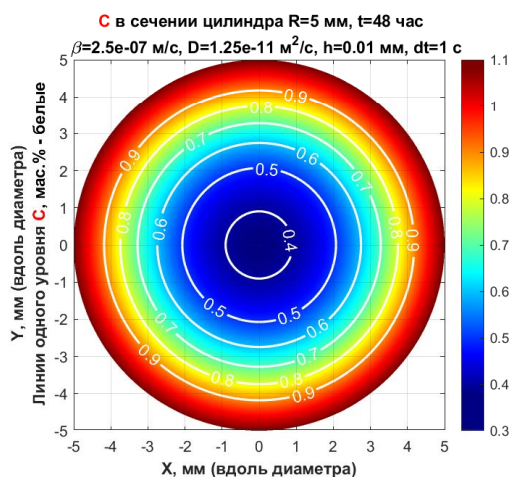
На рис. 5-6 представлены результаты расчета для бесконечной пластины толщиной 10 мм. Время счета составило 0.5 с.



Р и с. 5. Концентрации углерода в сечении бесконечной пластины
F i g. 5. Carbon concentrations in the cross-section of an infinite plate

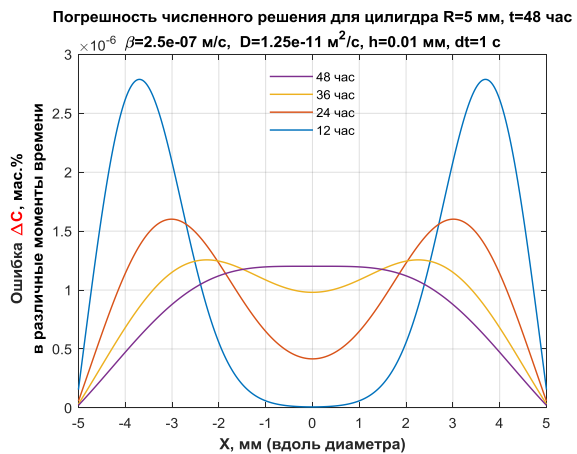
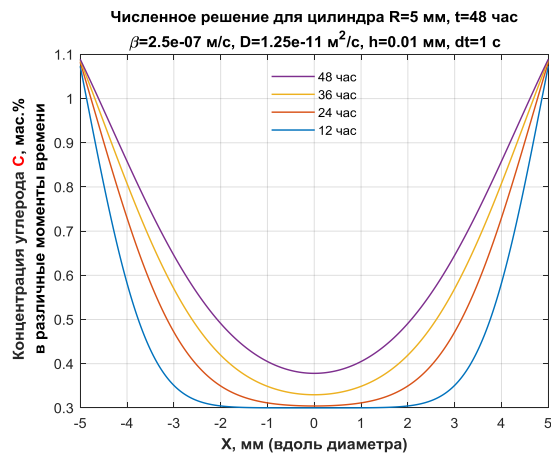


Р и с. 6. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени
F i g. 6. Numerical solution and its error at different times



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

Р и с. 7. Концентрация углерода в сечении бесконечного цилиндра
F i g. 7. Carbon concentration in the cross-section of an infinite cylinder

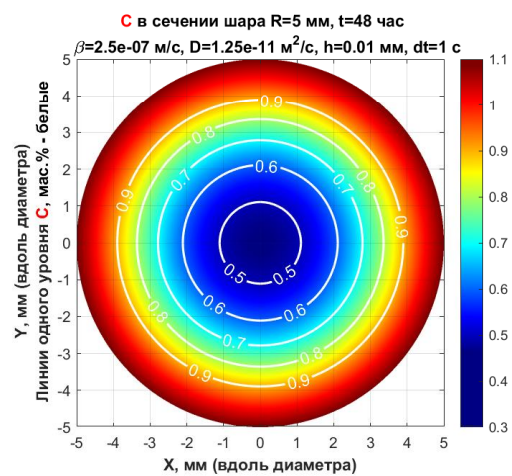


Р и с. 8. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени

F i g. 8. Numerical solution and its error at different times

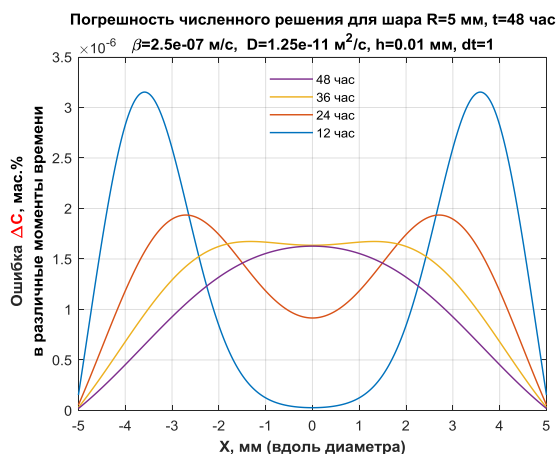
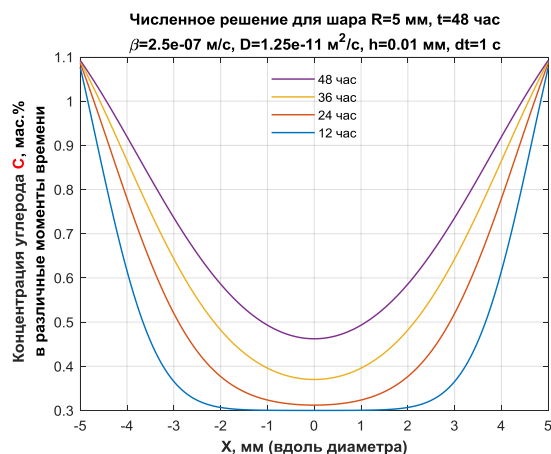
На рис. 9-10 представлены результаты расчета для шара диаметром 10 мм. Время счета составило 0.7 с.

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.



Р и с. 9. Концентрация углерода в сечении шара

F i g. 9. Carbon concentration in the cross-section of a sphere



Р и с. 10. Численное решение и его погрешность в различные моменты времени

F i g. 10. Numerical solution and its error at different times

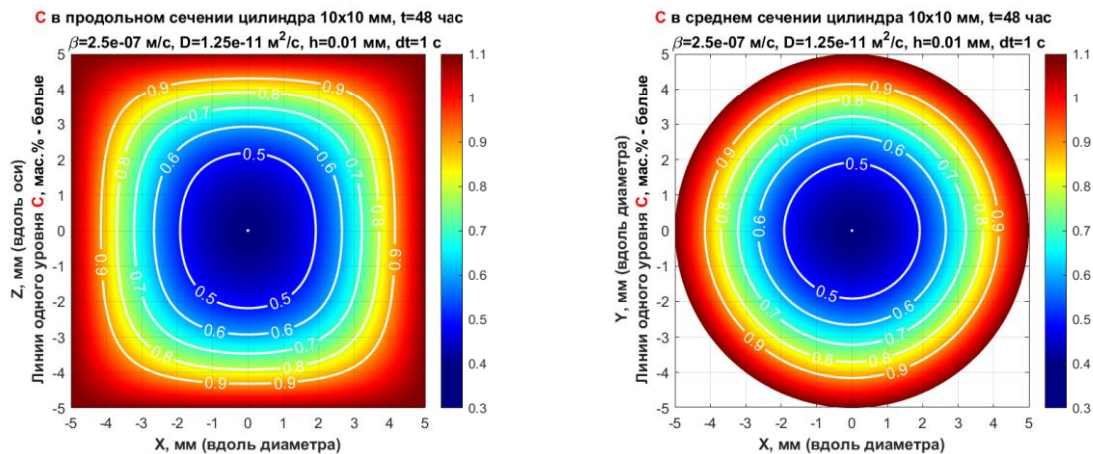
Порядок точности интерполяционно-разностного метода

Оценим порядок точности предлагаемого интерполяционно-разностного метода. Он определяется степенью шага дискретизации m в окончательной ошибке численного решения

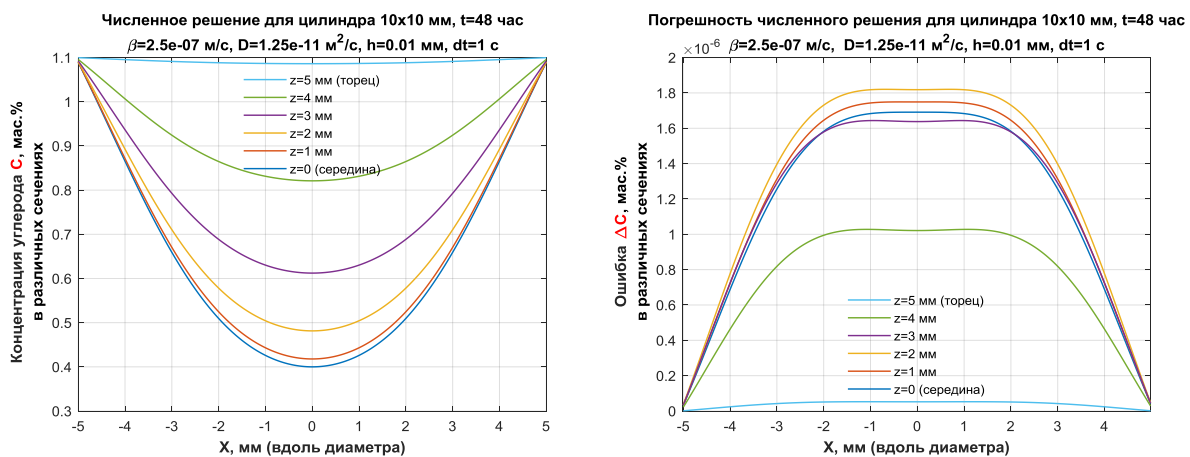
$$\delta = O(h^m). \quad (20)$$

Здесь мы привязали ошибку к шагу по координате, т.к. задачи диффузии и теплообмена представляют собой достаточно медленные процессы во времени, и шаг по времени не является определяющим. На рис. 13 представлены погрешности численного решения для нашей пластины толщиной 10 мм при номинальных шагах по координате и времени

$$h = 0.01 \text{ мм}, \quad \Delta t = 1 \text{ с}$$



Р и с. 11. Концентрации углерода в продольном и среднем сечениях цилиндра
F i g. 11. Carbon concentrations in the longitudinal and middle cross-sections of the cylinder



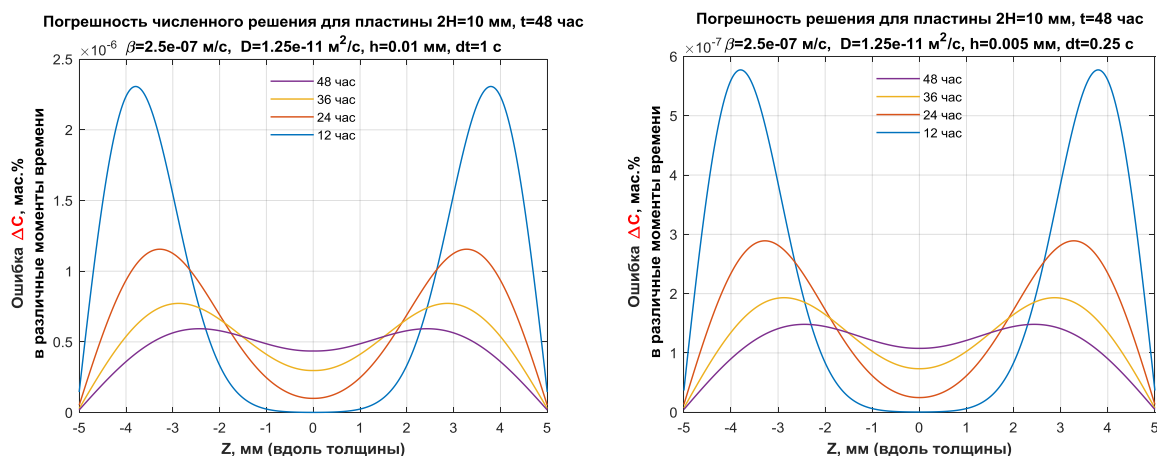
Р и с. 12. Численное решение и его погрешность в различных сечениях цилиндра
F i g. 12. Numerical solution and its error in various cross-sections of the cylinder

и вдвое уменьшенном шаге по координате, и вчетверо уменьшенном шаге по времени

$$h = 0.005 \text{ мм}, \quad \Delta t = 0.25 \text{ с}.$$

Уменьшение в 4 раза шага по времени необходимо для неизменности критерия устойчивости (14).

Из рис. 13 хорошо видно, что погрешность при уменьшении шага по координате в два раза (и соответственном уменьшении шага по времени в четыре раза) в точности уменьшилась в четыре раза, что свидетельствует о втором порядке точности метода по координате, что весьма неплохо.



Р и с. 13. Погрешности численных решений при различных шагах дискретизации
F i g. 13. Errors of numerical solutions at different discretization steps



Заключение

1. Разработанный интерполяционно-разностный метод (ИРМ) для численного решения задач диффузии и теплопроводности зарекомендовал себя как надежный, быстродействующий и достаточно точный метод решения актуальных технических задач диффузии и теплопроводности. Во всех задачах точность численного решения составляла 6-8 знаков.
2. Метод имеет достаточно высокий второй порядок точности по координате.
3. Хорошие совпадения численных расчетов с результатами натурных экспериментов, проведенных с конкретными образцами из сталей разного химического состава, показали работоспособность и эффективность

алгоритма ИРМ и для нелинейных задач при переменных КДУ и скорости науглероживания.

4. Распределение концентрации углерода в сечении бесконечного цилиндра мало отличалась 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.

Список использованных источников

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. Цементация, нитроцементация и азотирование стальных изделий / М. В. Майсурадзе [и др.] : учеб. пособие. Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2021. 102 с. EDN: XVEECY
4. ASM Handbook, Volume 4D. Heat Treating of Irons and Steels / J. L. Dossett, G. E. Totten. 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 // Annalen der Physik. 1855. Vol. 170, issue 1. P. 59-86. <https://doi.org/10.1002/andp.18551700105>
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 // Известия высших учебных заведений. Математика. 1979. № 7(209). С. 41-52. URL: <https://www.mathnet.ru/links/8af39f91872607e2ded99dc631890c00/ivm5513.pdf> (дата обращения: 26.08.2025).
16. Ковеня В. М., Тарнавский Г. А., Яненко Н. Н. Неявная разностная схема для численного решения пространственных уравнений газовой динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. Т. 20, № 6. С. 1465-1482. EDN: LECRKX
17. Крайнов А. Ю., Миньков Л. Л. Численные методы решения задач тепло- и массопереноса: учеб. пособие. Томск: STT, 2016. 92 с. EDN: WDALPN
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. 150 с.
21. Князев А. В. Метод замороженных коэффициентов // Дифференциальные уравнения. 1979. Т. 15, № 3. С. 551-552. URL: <https://www.mathnet.ru/links/70ea53417e4db655b29c62a18c88cfad/de3662.pdf> (дата обращения: 26.08.2025).
22. Васильев А. А., Голиков П. А. Модели для расчета коэффициента диффузии углерода в сталях и примеры их практического использования. СПб.: Политех-Гресс, 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.



References

1. Koretsky J. Cementation of steel. Leningrad: Sudprom; 1962. 231 p. (In Russ.)
2. Tsymbal V.P., Sechenov P.A., Rybenko I.A. New Metallurgical Technologies. Moscow: Yurait; 2025. 261 p. (In Russ.)
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. (In Russ.) EDN: XVEECY
4. ASM Handbook, Volume 4D. Heat Treating of Irons and Steels. In: Dossett J.L., Totten G.E. (eds.) ASM International; 2014. 943 p.
5. Karslow G., Yeager D. Thermal Conductivity of Solids. Moscow: Nauka; 1964. 488 p. (In Russ.)
6. Beckman I.N. Diffusion Mathematics. Moscow: OntoPrint; 2016. 400 p. (In Russ.)
7. Crank J. The mathematics of diffusion. Oxford: Clarendon press; 1975. 414 p.
8. Fick A. Ueber Diffusion. *Annalen der Physik*. 1855;170(1):59-86. (In German)
<https://doi.org/10.1002/andp.18551700105>
9. Tkachenko L.A., Repina A.V. Theory of heat exchange. Kazan: Kazan University; 2017. 151 p. (In Russ.)
10. Berkovskiy B.M., Nogotov E.F. Differential methods of investigation of heat transfer problems. Minsk: Nauka i tekhnika, 1976. 144 p. (In Russ.)
11. Samarskii A.A. Theory of difference schemes. Moscow: Nauka; 1989. 616 p. (In Russ.)
12. Mikhlin S.G., Smolitsky H.L. Approximate methods for solving differential and integral equations. Moscow: Nauka, 1965. 384 p. (In Russ.)
13. Berezin I.S., Zhidkov N.P. Methods of calculations. Vol. 1. Moscow: Nauka, 1962. 464 p. (In Russ.)
14. Bakhvalov N.S. Numerical methods. Moscow: Nauka; 1973. 632 p. (In Russ.)
15. Krukier L.A. Implicit difference schemes and iterative method of their solution for one class of systems of quasilinear equations. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Matematika*. 1979;(7):41-52. Available at: <https://www.mathnet.ru/links/8af39f91872607e2ded99dc631890c00/ivm5513.pdf> (accessed 26.08.2025). (In Russ.)
16. Kovenya V.M., Tarnavsky G.A., Yanenko N.N. Implicit difference scheme for a numerical solution of three-dimensional equations of gas dynamics. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 1980;20(6):1465-1482. (In Russ., abstract in Eng.) EDN: LECRKX
17. Krainov A.Yu., Minkov L.L. Numerical methods for solving problems of heat and mass transfer. Tomsk: STT; 2016. 92 p. (In Russ.) EDN: WDALPN
18. Hall G., Watt J.M. Modern numerical methods for ordinary differential equations. Moscow: Mir; 1979. 312 p. (In Russ.)
19. Sukhanov A.A. New schemes of integration of systems of ordinary differential equations by the Runge-Kutta method of the fifth order. In: First International Scientific and Practical Conference "Differential Equations and Their Applications". Saint-Petersburg; 1996. p. 198-199. (In Russ.)
20. Patankar S. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Boca Raton, London, New York: Taylor & Francis; 1980. 214 p. <https://doi.org/10.1201/9781482234213>
21. Knyazev A.V. The method of frozen coefficients. *Differential Equations*. 1979;15(3):551-552. Available at: <https://www.mathnet.ru/links/70ea53417e4db655b29c62a18c88cfad/de3662.pdf> (accessed 26.08.2025). (In Russ.)
22. Vasiliev A.A., Golikov P.A. Models for calculation of carbon diffusion coefficient in steels and examples of their practical use. Saint-Petersburg: Polytekhn-Press; 2019. 186 p. (In Russ.)
23. Lykov A.V. Theory of Heat Conduction. M.: Vysshaya shkola; 1967. 600 p. (In Russ.)
24. Dyakonov V.P. Matlab. Full self-tutorial. M.: DMK Press; 2023. 769 p. (In Russ.)

Поступила 26.08.2025; одобрена после
рецензирования 29.09.2025; принята к публикации
07.10.2025.

Submitted 26.08.2025; approved after reviewing
29.09.2025; accepted for publication 07.10.2025.

Об авторе:

Суханов Александр Алексеевич, доцент кафедры механики и процессов управления Физико-механического института, ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29), кандидат технических наук, **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0002-2067-8703>, alexeevich2012@gmail.com

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

About the author:

Alexander A. Sukhanov, Associate Professor of the Department of Mechanics and Control Processes of the Physics & Mechanics Institute, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University (29 Polytechnicheskaya St., 195251 St. Petersburg, Russian Federation), Cand. Sci. (Eng.), **ORCID:** <https://orcid.org/0000-0002-2067-8703>, alexeevich2012@gmail.com

The author has read and approved the final manuscript.