

Компьютерное моделирование процессов диффузии водорода при сварке.**77-48211/624768**

10, октябрь 2013

Розанов Д. С.

УДК. 621.791

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

rozanovds@rambler.ru

В основе моделирования процесса диффузии при сварке лежит дифференциальное уравнение второго закона Фика, описывающее неизотермическую диффузию водорода с учетом термодиффузионных потоков.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \cdot k \cdot \frac{\partial \Pi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \cdot k \cdot \frac{\partial \Pi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \cdot k \cdot \frac{\partial \Pi}{\partial z} \right), \quad (1)$$

где C – концентрация диффузионного водорода [$\text{см}^3/100 \text{ г ме}$]; D – коэффициент диффузии [$\text{см}^2/\text{с}$]; k – растворимость водорода в металле [$\text{см}^3/100 \text{ г ме}$], $\Pi = C/k$ – водородный потенциал. Характеристики материала D и k являются функциями его состава, структуры и температуры, поэтому уравнение (1) нелинейно.

Аналитическое решение уравнения второго закона Фика в нелинейной постановке является чрезвычайно трудной задачей, а в ряде случаев при расчете сложных крупногабаритных конструкций аналитическое решение является практически невозможным. По этой причине возникла необходимость разработки алгоритма численного решения уравнения диффузии. Численное решение уравнения диффузии проводится МКЭ совместно с решением температурной задачи и задачи о структурных превращениях в материале.

Разработанная методика позволяет определять концентрацию диффузионного водорода в каждой точке многослойного сварного соединения из углеродистых и низколегированных сталей в любой момент времени в течение всего процесса сварки (включая предварительный подогрев и послесварочный нагрев). Решение основано на анализе кинетики перераспределения диффузионного водорода в металле сварного соединения, в объёме основного металла с учетом десорбции водорода с поверхности сварного соединения.

Основные положения, используемые при расчётах процессов диффузии.

1. Применяется схема дискретизации тела в виде сочетания водородосодержащих масс - центров конечных элементов (КЭ), и водородопроводящих стержней (границ КЭ).
2. Каждому КЭ соответствует свой материал с собственным комплексом диффузионных свойств.
3. Состояние каждого КЭ характеризуется концентрацией водорода, температурой и соотношением структурных компонентов материала. Для расчета необходимо задать начальное распределение диффузионного водорода во всех КЭ.
4. Масса водорода, переходящая через границу с обеих сторон, одинакова, т.е. модель является консервативной (выполняется закон сохранения массы водорода).
5. Для расчета процессов диффузии водорода в сварном соединении требуется предварительно определить температурное поле.

Схема диффузии водорода через границу элементов представлена на рис. 1.

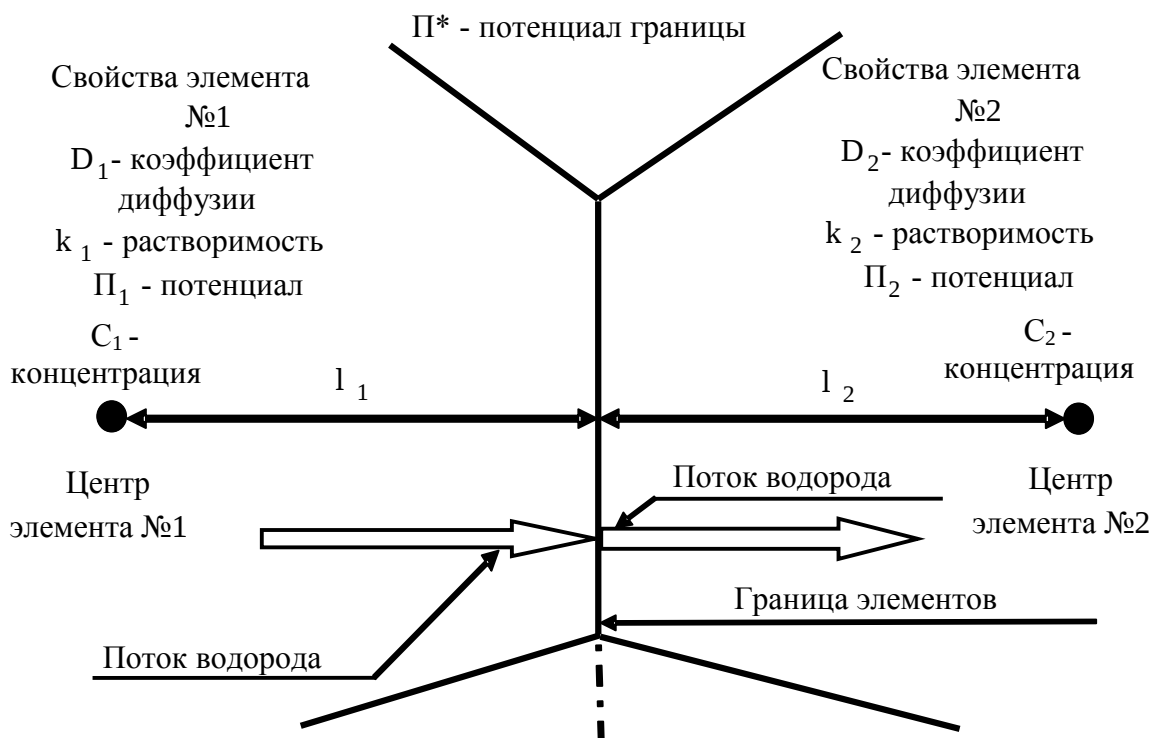


Рис. 1 Схема диффузии водорода через границу элементов

Для практической реализации разработанной методики численного решения в виде модуля расчетов процессов диффузии и десорбции водорода используются следующие уравнения.

Масса диффундировавшего через границу КЭ водорода за промежуток времени Δt определяется уравнением

$$\Delta m = -D \cdot k \cdot \frac{\partial \Pi}{\partial x} \cdot S \cdot \Delta t, \quad (2)$$

где S – площадь границы.

Уравнение баланса массы водорода на границе двух элементов:

$$\Delta m_{12} = \Delta m_{21}, \quad (3)$$

где из (2) $\Delta m_{12} = -D_1 \cdot k_1 \frac{\Pi_1 - \Pi^*}{l} S \cdot \Delta t$, $\Delta m_{21} = -D_2 \cdot k_2 \frac{\Pi^* - \Pi_2}{l} S \cdot \Delta t$.

Из решения уравнения (3) определяется Π^* - значение потенциала границы между конечными элементами, через которую проходит поток диффузии водорода.

$$\Pi^* = \frac{\Pi_1 \cdot D_1 \cdot k_1 + \Pi_2 \cdot D_2 \cdot k_2}{D_2 \cdot k_2 + D_1 \cdot k_1}. \quad (4)$$

При этом граница рассматривается как звено, участвующее в процессе диффузии, которое на каждом шаге решения принимает от одного элемента и отдает в другой элемент равные объемы водорода. Сетка элементов построена так, что граница равноудалена от центров элементов (сетка Вороного).

С учетом (4), масса диффундировавшего через границу КЭ водорода за единичный отрезок времени определяется уравнением:

$$\Delta m_{12} = \Delta m_{21} = \frac{D_1 \cdot D_2 \cdot k_1 \cdot k_2}{D_1 \cdot k_1 + D_2 \cdot k_2} \cdot \frac{\Pi_1 - \Pi_2}{l} S \cdot \Delta t. \quad (5)$$

В значениях концентрации уравнение будет иметь следующий вид:

$$\Delta m_{12} = \Delta m_{21} = \frac{D_1 \cdot D_2 \cdot k_1 \cdot k_2}{D_1 \cdot k_1 \cdot l + D_2 \cdot k_2 \cdot l} \cdot \left(\frac{C_1}{k_1} - \frac{C_2}{k_2} \right) S \cdot \Delta t. \quad (6)$$

Расчет приращения концентрации в элементе от диффузии через одну границу ΔC производится по массе диффундировавшего через границу водорода и объему элемента $V_{\text{эле}}$

$$\Delta C = \frac{D_1 \cdot D_2 (C_2 k_1 - C_1 k_2)}{(D_1 \cdot k_1 + D_2 \cdot k_2) \cdot l \cdot S \cdot \Delta t \cdot \rho_H \cdot \rho_{\text{мет}} \cdot V_{\text{эле}}}, \quad (7)$$

где ρ_H - плотность водорода, $\rho_{\text{мет}}$ - плотность металла.

После определения приращения концентрации за счет диффузии через границы двух элементов производится аналогичный расчет (по уравнениям (2 - 7) для всех остальных КЭ. После того, как проведён расчёт для всех КЭ на текущем шаге решения, производится определение новых значений концентрации водорода в КЭ путем

суммирования исходной концентрации и приращений концентрации от диффузии через каждую границу (n – количество границ в элементе)

$$c_{нов} = c_{исх} + \sum_{i=1}^n \Delta c_i. \quad (8)$$

На следующих шагах по времени ($i \dots i+n$) повторяются решения уравнений (2 – 8), определяются новые приращения концентрации диффузионного водорода (Δc , см³/100 г ме) в каждом элементе и новые концентрации (рис. 2).

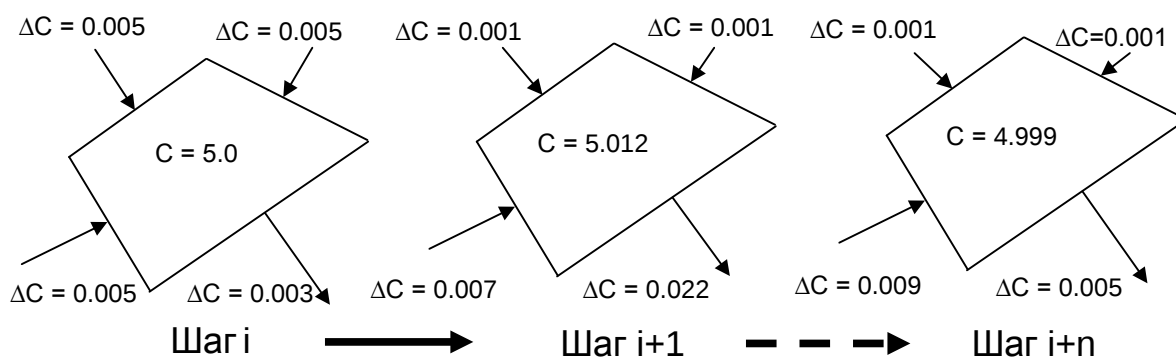


Рис. 2 Изменение концентрации диффузионного водорода в элементе на каждом шаге решения

Граничные условия для диффузионной задачи аналогичны граничным условиям для температурной задачи.

Предложенная методика практически реализована в виде модуля расчета процессов диффузии водорода в составе программного комплекса «Сварка» [1].

С целью проверки правильности работы реализованной методики был произведён расчет концентрации водорода, соответствующий ранее произведённым и описанным в [2] экспериментам. Произведено экспериментальное измерение распределения диффузионного водорода по высоте многослойного шва. Сваривался образец размером 200x300x22 мм с X - образной разделкой кромок 6

слоями покрытыми электродами при сварочном токе 200 А при симметричной схеме заполнения разделки. Начальное содержание водорода $H_{ш(0)} = 2.7 \text{ см}^3/100 \text{ г мет.}$ На рис. 3 приведены результаты экспериментального и расчётного распределения концентрации водорода по высоте шва после сварки и через 8 часов после сварки.

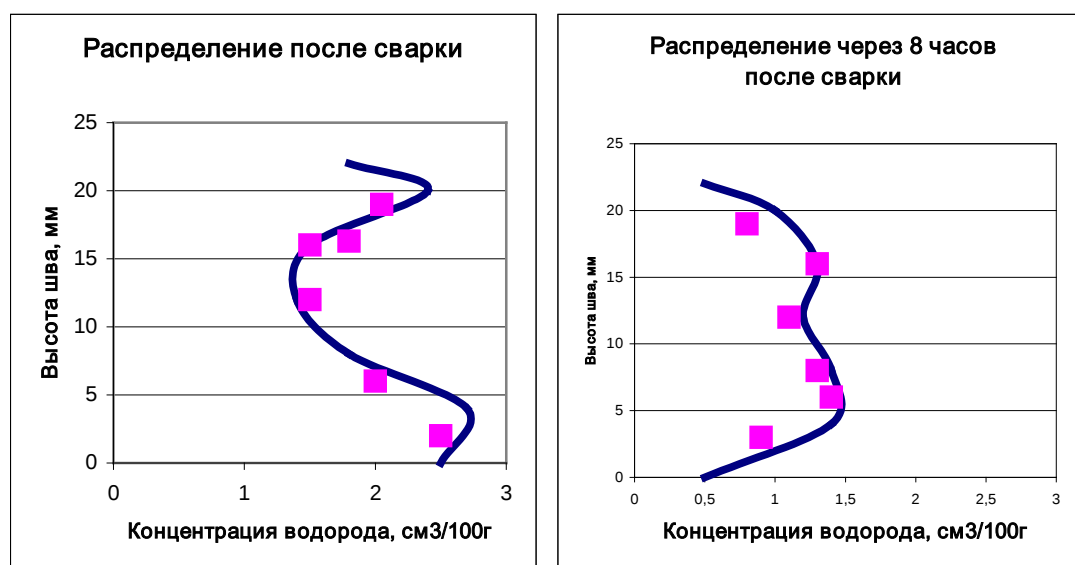


Рис. 3 Сравнение экспериментальных данных Э.Л. Макарова и Н.И.Егорова [2] и результатов расчета. Сплошной линией показан результат расчета, точками – экспериментальные результаты

Список литературы.

1. Куркин А.С., Программный комплекс «Сварка» - инструмент решения практических задач сварочного производства/ А.С. Куркин, Э.Л. Макаров // Сварка и диагностика. -2010. -№ 1. -С. 16 – 24.
2. Макаров Э.Л., Распределение водорода в многослойных сварных соединениях легированных сталей /Э.Л. Макаров, Н.И. Егоров // Сварочное производство. -1984. -№ 3. -С. 3 – 6.