

金属材料激光相变硬化的三维数值模拟*

马天驰 陈概**

(华南师范大学 量子电子学研究所 **数学系, 广州 510631)

提要 给出了用有限差分法对金属材料激光相变硬化过程建立的三维数值模型。模型考虑了工件有限尺度、工件材料热物理性质的温度依赖关系、激光处理参数以及对流、辐射造成的表面热损失。根据模型可以得出工件表面和内部任意部位的三维温度分布像,可以预测激光处理的相变层深,并据此优化激光处理参数的选定。通过对一种锆合金的激光相变硬化实验,验证了所得结果与模型理论计算的一致。

关键词 激光相变硬化, 三维数值模拟, 金属材料

1 引言

金属材料激光相变硬化是一个多参数综合的工艺过程。目前在实践上仍主要依靠实验和经验来获得最佳的激光处理参数,这就导致大量人力物力的浪费。由于激光处理加热体积小,温度变化快,用实验方法难于直接测定处理过程的温度分布及冷却速率。用实验方法来验证工艺的合理性又难于对过程的机理有一个清晰的了解。近代计算技术的发展有可能用数学方法来表达激光相变硬化过程的热传递图像,并对影响过程的诸因素作出定量的分析。

已有许多数学模型用来描述激光加工(包括激光相变硬化)过程的温度场。它们均基于不同的假设,如把工件作为半无限体几何尺度^[1~4],认为材料的热物理性能与温度无关^[5,6],把工件与激光束看作相对静止^[1,3]等。许多人用经过简化的解析法来计算温度场,包括采用 Creen 函数, Fourier 变换, 误差函数等^[6,7]。Cerri 等人^[8]认为,如若工件的厚度大于 $2(4Kt/\rho C_p)^{0.5}$,其中 K 是材料的导热系数, t 为激光辐照时间, ρ 和 C_p 分别为材料的比重和比热,则工件厚度对热流的影响可以忽略不计。而实际上,有些工件可能很薄或很细,用无限或半无限的假设就显得不合理。Kar 和 Mazumder^[7]提出了一个三维的数学模型,用于描述有限尺度工件激光处理时的瞬态温度场。通过 Kirchhoff 变换和 Fourier 变换,温度分布采用 Taylor 级数形式来表达。但当工件形状比较复杂,材料的热物理性能随温度而改变,或者激光扫描速度并不恒定等情况下, Kirchhoff 变换和 Fourier 变换将难于采用。另一方面,现代数值计算技术使得有可能把上述最复杂的情况都加以考虑。本文提出了一个用于描述激光相变硬化过程的瞬态温度场的通用的数学模型。并用以计算一种锆合金(Zr-2.5Nb)激光表面硬化过程的温度场。本模型可以用于预测工件表面及内部的温度场,研究这一温度分布对工艺质量的影响,优化工艺参数的选定。

* 广东省科委自然科学基金资助项目。

收稿日期: 1995年12月11日; 收到修改稿日期: 1996年1月31日

本模型是研究激光相变硬化工艺过程的一种有力工具。

2 实 验

激光表面相变硬化处理实验采用 PRC 公司的 1.5 kW CW-CO₂ 激光加工系统。TEM₀₀ 光束

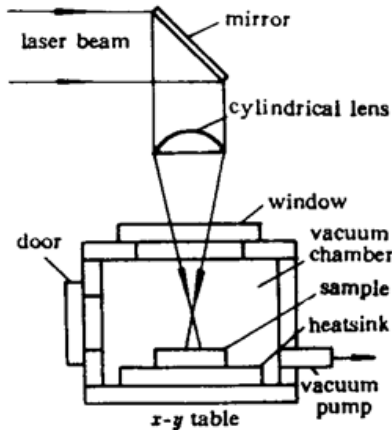


Fig. 1 Schematic diagram of the experimental setup

经柱面透镜聚焦后在工件表面形成一个尺寸为 8 × 2 mm² 的矩形光斑。为避免大气污染,试样放置在真空盒内,盒内真空度为 0.266 Pa。激光束通过 NaCl 窗口辐照到工件表面上。试验用工件材料为 Zr-2.5Nb 合金,其化学成分为含 2.5%Nb,其余为 Zr。试样尺寸加工成厚 $L_z = 4$ mm,长 $L_x = 50$ mm,宽 $L_y = 25$ mm。为增加散热,试样放置在一块铝板上,铝板尺寸为 100 mm × 100 mm × 10 mm。为增加表面对激光能量的吸收,试样的上表面预先经玻璃丸喷射毛化处理,玻璃丸为直径

8 mm 的 ZrO₂,喷射气流压力为 20PSI(1.4 atm)。经过一系列预备试验以确定最佳的激光处理参数:功率 1.5 kW,扫描速度 40IPM(1.7 cm/s)。为获得全面积的硬化层,采用重叠率为 25% 的光斑扫描,只限于处理经喷丸毛化的上表面。为避免温度的影响,每次扫描之后均暂停数分钟,待试样冷却后再进行下一次扫描。激光处理时用快速响应的光学高温计实测试样表面光斑部位的温度。实验装置简图如图 1 所示。然后,沿着与激光扫描方向垂直切取试样,抛光后用 45% 的水 + 45% 的硝酸 + 10% 的氢氟酸溶液腐蚀。分别用光学和透射电子显微镜观察试样表面硬化层的显微组织。用显微硬度计(载荷为 100 gm)测定试样硬化层的剖面硬度分布。

3 数学模型

具有一定功率分布的激光束,以一定的相对扫描速度辐射到材料表面上。部分入射光能被反射,其余部分被材料吸收。被吸收的能量中的一部分由于辐射和对流从材料表面损失掉,其余部分主要以热的形式在材料内部传播。三维瞬态热传导数学模型是基于如下的假设,即材料的热物理特性(包括导热系数 K ,比热 C ,热扩散系数 k 等)以及试样表面吸收系数 α 是仅与温度的变化有关。

对试样的能量平衡方程可以写成^[9,10]:

$$\rho(T)C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} + U\rho(T)C_p(T) \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right] + H \quad (1)$$

方程把试样内任意点 (x, y, z) 在某一给定时间 t 的温度 $T(x, y, z, t)$ 与试样相对于激光束的扫描速度 U ,试样的热物理参数,以及试样的内部热源 H (如相变潜热)连系起来了。

方程(1)的解要满足如下的起始与边界条件:

1) 当 $t = 0$ 时,试样具有均匀的温度 T_0 (= 298 K),即:

$$T(x, y, z, 0) = T_0 \quad (2)$$

2) 在试样的周边,能量通过辐射和对流进行交换:

$$K(T)\left[\frac{\partial T(L_x, y, z, t)}{\partial x}\right] = h[T(L_x, y, z, t) - T_{\text{gas}}] + e\sigma\{[T(L_x, y, z, t)]^4 - T_{\text{gas}}^4\} \quad (3)$$

$$K(T)\left[\frac{\partial T(0, y, z, t)}{\partial x}\right] = h[T(0, y, z, t) - T_{\text{gas}}] + e\sigma\{[T(0, y, z, t)]^4 - T_{\text{gas}}^4\} \quad (4)$$

$$K(T)\left[\frac{\partial T(x, L_y, z, t)}{\partial y}\right] = h[T(x, L_y, z, t) - T_{\text{gas}}] + e\sigma\{[T(x, L_y, z, t)]^4 - T_{\text{gas}}^4\} \quad (5)$$

$$K(T)\left[\frac{\partial T(x, 0, z, t)}{\partial y}\right] = h[T(x, 0, z, t) - T_{\text{gas}}] + e\sigma\{[T(x, 0, z, t)]^4 - T_{\text{gas}}^4\} \quad (6)$$

其中, h 为对流热传导系数, T_{gas} 为与试样表面相邻气体的温度, 如试样未经预热, 则 $T_{\text{gas}} = T_0$, e 为试样的表面发射系数, σ 为 Stefan-Boltzmann 常数, 且 $\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ 。

3) 试样底面 ($z = L_z$), 能量通过接触热传导传递到热沉:

$$q_{\text{contact}} = K_c[T(x, y, L_z, t) - T_b] \quad (7)$$

其中, K_c 为接触导热系数 ($\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$), T_b 为热沉温度。由于作为热沉材料的铝导热性很好, 可以认为热沉的温度分布是均匀的, 其温度由下式计算:

$$T_b = Q_{\text{contact}} / (MC) \quad (8)$$

式中, Q_{contact} 为试样传到热沉的总能量 (Js^{-1}), M 为热沉的质量 (kg), C 为热沉的比热 ($\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$), 热沉的体积 $V = 100 \times 100 \times 10 \text{ mm}^3 = 10^5 \text{ mm}^3 = 10^{-4} \text{ m}^3$, 热沉的密度 $\rho = 2375 \text{ kg/m}^3$ ($T < T_m$ 时), 热沉的质量 $M = 0.2375 \text{ kg}$, 热沉的比热 $C = 759 + 0.458T \text{ J/kgK}$ ($T < T_m$ 时)。

4) 在试样的上表面, 有两个不同的热传递区域:

(a) 在光斑处 (即 $z = 0; x = x_1, x_1 + dx; y = y_1, y_1 + dy$; 其中 dx 和 dy 分别为激光光斑的宽度和长度), 能量平衡方程为:

$$K(T)\left[\frac{\partial T(x, y, 0, t)}{\partial z}\right] = \alpha \cdot \epsilon \cdot \frac{P}{A} - q_c - q_r \quad (9)$$

其中, α 为表面吸收系数 ($= 0.29$), ϵ 为 NaCl 窗口的透过率 ($= 0.92$), P 为激光功率 ($= 1500 \text{ W}$), A 为光斑面积 ($= 1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2$), q_c 为对流热损失 ($\text{Js}^{-1}\text{m}^{-2}$), 且 $q_c = h[T(x, y, 0, t) - T_{\text{gas}}]$, q_r 为辐射热损失 ($\text{Js}^{-1}\text{m}^{-2}$), 且 $q_r = e\sigma\{[T(x, y, 0, t)]^4 - T_{\text{gas}}^4\}$ 。

(b) 在光斑以外的区域:

$$K(T)\left[\frac{\partial T(x, y, 0, t)}{\partial z}\right] = q_c + q_r \quad (10)$$

对方程(1)用有限差分方法进行数值解。方法是从微分方程出发, 将区域经过离散处理后, 近似地用差分、差商来代替微分、微商, 将微分方程和边界条件的求解, 归结为求线性代数方程组的解, 得到的是数值解。关于方程的数值解法在本文的附录中给出。根据所建立的数学模型, 用 Pascal 语言编写出计算机程序, 用计算机进行运算处理。

4 结果与讨论

图 2 是本模型建立的试样表面温度分布的三维图像, 这是当激光束以 17 mm/s 的扫描速度, 沿 x 轴方向走过了 13 mm 时的情形。图 3 是在该位置上试样表面沿 y 轴方向的温度分布图。根据这一温度分布, 可以看出所采用的线状激光光斑一次扫描可达到的硬化带宽度 (即 T

$> 1200\text{ K}$)约 8 mm ,在这个宽度的范围内温度分布大体上是均匀的,除了光斑两侧由于热传导使温度有所下降。从图 3 还可以看出,在所采用的功率(1.5 kW),光斑尺寸($8\times 2\text{ mm}^2$)以及扫描速度(17 mm/s)条件下,试样表面光斑中心位置的最高温度约近 1600 K ,这一数据落在该材料相变硬化的工艺窗口之内,因此,这一工艺参数是合理的。

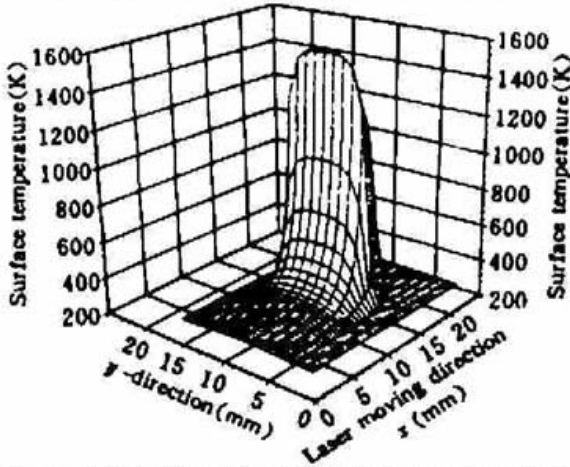


Fig. 2 Three-dimensional temperature distribution on the surface of the sample

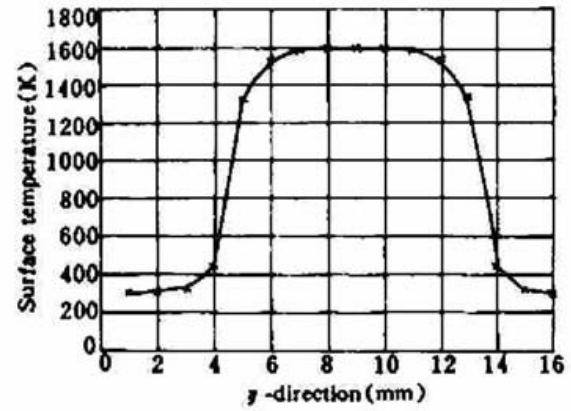


Fig. 3 Surface temperature distribution at the beam spot central position ($r = 13\text{ mm}$) of the sample

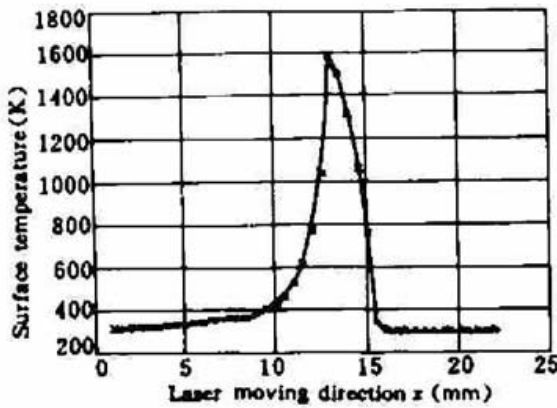


Fig. 4 Surface temperature distribution at the beam spot central position ($y = 9\text{ mm}$) of the sample

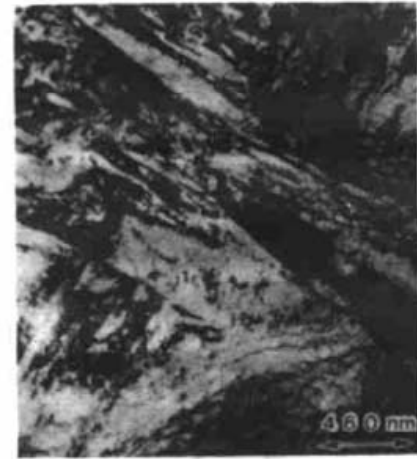


Fig. 5 Transmission electron micrograph showing α' -Martensite in the laser processed hardened zone

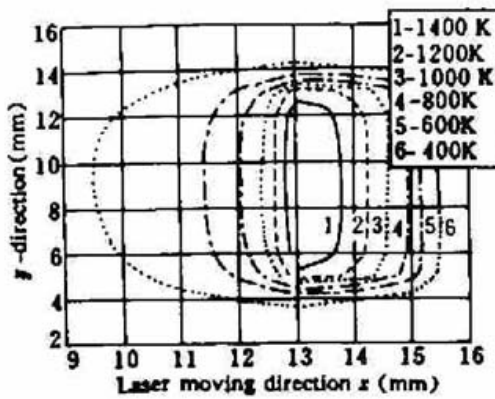


Fig. 6 Surface temperature contour at the position of $x = 13\text{ mm}$ of the sample

图 4 为试样表面沿 x 方向的温度分布。根据这一图形,可以估计出在所选用的实验条件下,试样表面温升的速率($\sim 6.5\times 10^3\text{ K/s}$)以及光斑扫过之后试样表面的温降速率($\sim 1.3\times 10^4\text{ K/s}$)。这种快速加热与快速冷却造就了材料内部显微组织的不稳定相的产生,从而达到比常规热处理工艺为优越的表面相变硬化效果。图 5 为激光处理后硬化层中显微组织的 TEM 照片,显示出 α' -马氏体针状组织的形成。关于所用的材料的激光相变硬化显微组织与性能情况可参看文献[11]。

图 6 为激光扫描时试样表面的等温分布图。值得注意的是,在激光光斑的前沿,试样表面有一个预热区;而在激光光斑的后沿,由于热传导,温度分布形成一个“尾巴”。由于激光扫描速

度比较快, 这样的等温分布图像是很难通过实验方法获得的。

图 7 是试样经激光扫描后表面硬化层的厚度, 可以看出, 不同的扫描速度, 所得的硬化层厚度不同, 扫描速度越高, 硬化层越薄。同时, 当激光从 x 轴方向原点 ($x = 0$) 开始扫描时, 有一个过渡区。在过渡区, 硬化层较薄, 随着扫描的往前推进, 硬化层逐渐加厚, 经过一段距离之后才达到稳定的硬化层厚度。当扫描速度为 17 mm/s 时, 稳定的硬化层厚度约为 0.37 mm , 这与实验所得的微硬度测试结果 (见图 8) 基本一致。这说明, 运用本模型预测激光处理效果是很有用的。

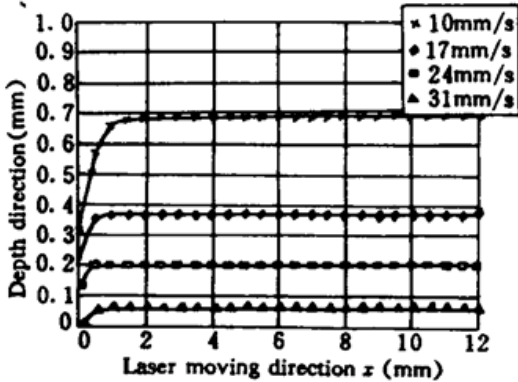


Fig. 7 Phase transformation boundaries at various velocities

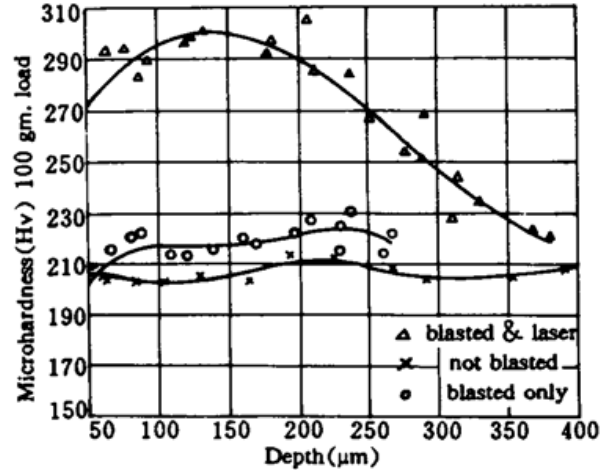


Fig. 8 Microhardness profile of laser processed Zr-2.5Nb alloy

5 结 论

5.1 本模型对金属材料激光相变硬化瞬态热传递过程进行了三维模拟。模型考虑了试样的有限尺度, 试样材料热物理参数的温度依赖关系, 激光工艺参数以及对流、辐射造成的表面热损失。基于这一模型编写出有关的计算机程序。

5.2 运用本模型可以得出试样表面和内部任意部位的温度分布图像, 可以预测激光处理引起的相变硬化层深。模型所得的硬化层深与实验结果一致。

5.3 对一定的激光功率, 扫描速度是一个很重要的工艺参数。扫描速度提高, 相变硬化层深减小。采用本模型及其计算机程序可以优化扫描速度及其它激光处理工艺参数的选定。

参 考 文 献

- 1 K. Kou, D. K. Sun, Y. P. Lee. A fundamental study of laser transformation hardening. *Metall. Trans.*, 1983, 14A: 643~653
- 2 R. Festa, O. Manca, V. Naso. Simplified thermal models in laser and electron beam surface hardening. *J. Heat Mass Transfer*, 1990, 33(11): 2511~2518
- 3 P. Ravi Vishnu, W. B. Li, K. E. Easterling. Heat flow model for pulsed welding. *Mater. Sci. Technol.*, 1991, 7(7): 649~659
- 4 J. C. Ion, H. R. Shercliff, M. F. Ashby. Diagrams for laser materials processing. *Acta Metall. Mater.*, 1992, 40(7): 1539~1551
- 5 H. R. Shercliff, M. F. Ashby. The prediction of case depth in laser transformation hardening. *Metall. Trans.*, 1991, 22A: 2459~2466
- 6 C. Mair, P. Schaaf, U. Gonser. Calculation of the temperature profile for laser treatment of metallic samples. *Mater. Sci. Eng.*, 1992, A150: 271~280

- 7 A. Kar, J. Mazumder. Three-dimensional transient analysis for laser chemical vapour deposition on uniformly moving finite slabs. *J. Appl. Phys.*, 1989, **65**(8): 2923~2934
- 8 W. Cerri, L. Garifo, G. P. Mor. The important role of modelling in laser hardening process design. in ed. D. Schuocker *et al.*. High power lasers, Belingham; WA, Society of Photo-optical instrumentation engineers, 1987. 363~369
- 9 H. S. Carslaw, J. C. Jaeger. Conduction of heat in Solids, 2nd edn. London; Oxford University Press, 1978
- 10 J. P. Holman. Heat Transfer. 7th edn, New York; McGraw-Hill, 1990
- 11 K. F. Amouzouvi, L. Mannik, Tian-Chi Ma *et al.*. Microstructural changes in laser hardened Zr-2.5Nb alloy. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1995, **32**(2): 289~294
- 12 陆金甫 关 治. 偏微分方程数值解法. 北京: 清华大学出版社, 1987
- 13 王能超. 数值算法设计. 武汉: 华中理工大学出版社, 1989

A Three-dimensional Numerical Model for Laser Transformation Hardening of Metals

Ma Tianchi Chen Gai*

(South China Normal University, Quantum Electronics Institute;

* Department of Mathematics, Guangzhou 510631)

Abstract A three-dimensional numerical model for laser surface transformation hardening of metals using the finite differential technique is given in this paper. The model takes into account the finite dimensions of the workpiece, the temperature dependence of thermal-physical properties of the material, the laser processing parameters, and the surface heat losses due to convection and radiation. According to the model a three-dimensional temperature distribution on the surface and inside the workpiece can be obtained. The model can also be used to predict the phase transformation depth resulting from the laser surface treatment. Good agreement is demonstrated with experimental results for laser hardening of a zirconium alloy.

Key words laser transformation hardening, three-dimensional modelling, metals

附录 能量守恒方程的差分解法

由于工件的几何形状简单及区域内部单一,本模型采用差分方法求解^[12,13]

1 工件的能量守恒方程

$$\rho(T)C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} + U\rho(T)C_p(T) \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right] + H$$

取 $\rho(T) = 6500$, $C_p(T) = 350$, $U = 0.017$, $K(T) = 14.10$, $H = 0$ 。简化方程得

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{K}{\rho C_p} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{K}{\rho C_p} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{K}{\rho C_p} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - U \frac{\partial T}{\partial x}$$

初始,边界条件为

$$T(t, 0, y, z) = T(t, L_x, y, z) = T(t, x, 0, z) = T(t, x, L_y, z) = T(0, x, y, z) = T(t, x, y, L_z) = T_0$$

当 $z = 0$ 时,在光斑外的区域 $T(t, x, y, 0) = T_0$

当 $z = 0$ 时, 在光斑内的区域

$$\frac{\partial T(t, x, y, 0)}{\partial z} = \frac{\alpha \varepsilon P}{KA}$$

$T_0 = 298$, $\alpha = 0.29$, $\varepsilon = 0.92$, $P = 1500$, $A = 0.000016$ 。

2 网格划分

为了尽可能精确地记录下工件上每一点在加工过程中达到的最高温度, 更好地模拟出硬化层的深度, 本解法采用均匀网格; 取时间步长 $\Delta t = 0.005$ s, 取 x 方向的空间步长 $\Delta x = 0.0005$ m, 取 y 方向的空间步长 $\Delta y = 0.001$ m, 取 z 方向的空间步长 $\Delta z = 0.0005$ m。

3 用 Crank-NiColson 格式建立的差分方程

$$\begin{aligned} \left(\frac{T_{i,j,k}^{n+1/3} - T_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) &= \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i-1,j,k}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} \right) + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j-1,k}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j,k-1}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right) - \frac{3U}{2} \left(\frac{T_{i+1,j,k}^n - T_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) \\ \left(\frac{T_{i,j,k}^{n+2/3} - T_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta t} \right) &= \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i-1,j,k}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} \right) + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j-1,k}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j,k-1}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2} \right) - \frac{3U}{2} \left(\frac{T_{i+1,j,k}^{n+1/3} - T_{i-1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} \right) \\ \left(\frac{T_{i,j,k}^{n+1} - T_{i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta t} \right) &= \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i-1,j,k}^{n+2/3} - 2T_{i,j,k}^{n+2/3} + T_{i+1,j,k}^{n+2/3}}{\Delta x^2} \right) + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j-1,k}^{n+2/3} - 2T_{i,j,k}^{n+2/3} + T_{i,j+1,k}^{n+2/3}}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad + \frac{3K}{\rho C_p} \left(\frac{T_{i,j,k-1}^{n+2/3} - 2T_{i,j,k}^{n+2/3} + T_{i,j,k+1}^{n+2/3}}{\Delta z^2} \right) - \frac{3U}{2} \left(\frac{T_{i+1,j,k}^{n+2/3} - T_{i-1,j,k}^{n+2/3}}{\Delta x^2} \right) \end{aligned}$$

4 简化

$$\begin{aligned} -\frac{K}{\rho C_p \Delta x^2} T_{i-1,j,k}^{n+1/3} + \left(\frac{1}{3\Delta t} + \frac{2K}{\rho C_p \Delta x^2} \right) T_{i,j,k}^{n+1/3} - \frac{K}{\rho C_p \Delta x^2} T_{i+1,j,k}^{n+1/3} &= \frac{K}{\rho C_p \Delta y^2} (T_{i,j-1,k}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j+1,k}^n) \\ &\quad + \frac{K}{\rho C_p \Delta z^2} (T_{i,j,k-1}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j,k+1}^n) - \frac{U}{2\Delta x} (T_{i+1,j,k}^n - T_{i-1,j,k}^n) + \frac{1}{3\Delta t} T_{i,j,k}^n \\ -\frac{K}{\rho C_p \Delta y^2} T_{i,j-1,k}^{n+2/3} + \left(\frac{1}{3\Delta t} + \frac{2K}{\rho C_p \Delta y^2} \right) T_{i,j,k}^{n+2/3} - \frac{K}{\rho C_p \Delta y^2} T_{i,j+1,k}^{n+2/3} &= \frac{K}{\rho C_p \Delta x^2} (T_{i-1,j,k}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i+1,j,k}^{n+1/3}) \\ &\quad + \frac{K}{\rho C_p \Delta z^2} (T_{i,j,k-1}^{n+1/3} - 2T_{i,j,k}^{n+1/3} + T_{i,j,k+1}^{n+1/3}) - \frac{U}{2\Delta x} (T_{i+1,j,k}^{n+1/3} - T_{i-1,j,k}^{n+1/3}) + \frac{1}{3\Delta t} T_{i,j,k}^{n+1/3} \\ -\frac{K}{\rho C_p \Delta z^2} T_{i,j,k-1}^{n+1} + \left(\frac{1}{3\Delta t} + \frac{2K}{\rho C_p \Delta z^2} \right) T_{i,j,k}^{n+1} - \frac{K}{\rho C_p \Delta z^2} T_{i,j,k+1}^{n+1} &= \frac{K}{\rho C_p \Delta x^2} (T_{i-1,j,k}^{n+2/3} - 2T_{i,j,k}^{n+2/3} + T_{i+1,j,k}^{n+2/3}) \\ &\quad + \frac{K}{\rho C_p \Delta y^2} (T_{i,j-1,k}^{n+2/3} - 2T_{i,j,k}^{n+2/3} + T_{i,j+1,k}^{n+2/3}) - \frac{U}{2\Delta x} (T_{i+1,j,k}^{n+2/3} - T_{i-1,j,k}^{n+2/3}) + \frac{1}{3\Delta t} T_{i,j,k}^{n+2/3} \end{aligned}$$

$$n = 1, 2, \dots, i = 1, 2, \dots, \left[\frac{L_x - 1}{\Delta x} \right], j = 1, 2, \dots, \left[\frac{L_y - 1}{\Delta y} \right], k = 1, 2, \dots, \left[\frac{L_z - 1}{\Delta z} \right]$$

以上是三个系数矩阵为三对角矩阵的线性代数方程组, 在每一时间步长需要顺序求解这三个方程组, 求方程组的算法采用追赶法, 加上用残量校正技术进行校正。

文章中的图形数据是在走过了 25 个时间步长时截取下来的。