

高等学校理工科材料类规划教材

Application of Computer in
Materials Science and Engineering

计算机在材料科学与工程中的应用

张立文 主编



大连理工大学出版社
Dalian University of Technology Press

高等学校理工科材料类规划教材

Application of Computer in
Materials Science and Engineering

计算机在材料科学与工程中的应用

张立文 主编



大连理工大学出版社
Dalian University of Technology Press

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料科学与工程中的应用 / 张立文主编

· 一 大连 : 大连理工大学出版社, 2016.3

ISBN 978-7-5685-0308-2

I. ①计… II. ①张… III. ①计算机应用—材料科学—高等学校—教材 IV. ①TB3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 028836 号

大连理工大学出版社出版

地址:大连市软件园路 80 号 邮政编码:116023

发行:0411-84708842 传真:0411-84701466 邮购:0411-84708943

E-mail:dutp@dutp.cn URL:http://www.dutp.cn

大连力佳印务有限公司

大连理工大学出版社发行

幅面尺寸:185mm×260mm 印张:17.25 字数:397千字

2016年3月第1版

2016年3月第1次印刷

责任编辑:于建辉

责任校对:许蕾

封面设计:冀贵收

ISBN 978-7-5685-0308-2

定价:39.80元

前 言

计算机技术经历了近 70 年的发展,计算能力飞速提高,已应用到自然科学的各个领域,在材料科学与工程领域也得到了广泛应用。例如,材料加工制备过程的计算机控制,材料设计、加工及使用过程的计算机数值模拟与工艺优化,材料数据库系统及材料网络销售系统等。其中,计算机数值模拟在材料科学与工程领域应用近 20 年取得了很大的进展,逐步形成了独立于实验科学和理论科学的一门材料科学分支——计算材料学。

“计算机在材料科学与工程中的应用”是金属材料工程专业的必修课。课程的任务是:使学生在先修的相关基础课程之上,了解计算机在材料科学与工程方面的应用及未来的发展方向;学习传热学、力学的基本原理,具有把材料科学与工程中的问题化为传热学和力学问题的分析及建模能力;掌握用有限差分法计算温度场的基本原理和程序设计的基本方法,具有一定的计算机编程能力;了解有限元数值模拟的基本原理和方法;了解材料科学与工程领域常用的有限元数值模拟软件的应用;掌握计算机数值模拟计算的基本原理和数值模拟计算软件设计及应用的基本方法。

本书主要介绍计算机数值模拟技术在材料科学与工程中的应用,同时也涉及计算机数据采集及数据库技术在材料工程中的应用。材料科学与工程专业主要包括铸造、锻压、焊接、热处理等方向。这些专业方向的共性问题为传热、力学和微观组织转变。因此本书第 1 章首先介绍计算机在材料科学与工程中应用的概况,第 2 章介绍传热学的基本原理和传热学模型建立,第 3 章重点阐述温度场计算的有限差分法,第 4 章介绍温度场计算的有限元法,第 5 章介绍热处理过程温度场及组织场的数值模拟,第 6 章介绍材料固态加工过程的力学原理及有限元法,第 7 章介绍计算机数据采集及数据库技术在材料科学与工程中的应用,第 8 章介绍计算机数值模拟技术在材料加工领域的应用进展。

在编写本书的过程中,作者参阅并引用了国内外相关教材、科技著作及论文,在此特向这些文献的作者表示衷心感谢!由于参考文献未一一列出,仅列举了部分书目和论文,敬请海涵。

感谢大连理工大学教务处的重点教改立项资助。感谢大连理工大学材料科学与工程学院的大力支持,感谢金属材料工程专业负责人赵杰教授的鼓励和支持。感谢作者在近 20 年指导过的王荣山、魏利霞、王大鹏、裴继斌、王明伟、吕成、邓小虎、岳重祥等

50 余名博士和硕士研究生,是他们在读期间的研究工作成果,丰富了本书的内容。

由于编者水平有限,加上时间紧迫,书中难免有疏漏和错误之处,敬请广大读者批评指正。

您有任何意见或建议,请通过以下方式与大连理工大学出版社联系:

邮箱 jcjf@dutp.cn

电话 0411-84708947

张立文

2016年2月

目 录

- 第1章 绪 论 /1
 - 1.1 电子计算机的发展概述 /1
 - 1.2 计算机在材料科学与工程中的应用简介 /2
 - 参考文献 /4
- 第2章 传热学的基本原理及传热学模型建立 /6
 - 2.1 传热学的基本原理 /6
 - 2.1.1 温度场 /6
 - 2.1.2 热量传递的三种基本方式 /6
 - 2.1.3 热量传递的基本定律 /7
 - 2.2 热传导方程 /8
 - 2.2.1 直角坐标系下的热传导方程推导 /8
 - 2.2.2 各种坐标系下的热传导方程 /9
 - 2.3 热传导问题的边界条件及初始条件 /9
 - 2.3.1 边界条件 /10
 - 2.3.2 初始条件 /11
 - 2.4 温度场计算的传热学模型建立 /11
 - 2.4.1 无限长方柱体淬火冷却过程温度场的计算模型建立 /11
 - 2.4.2 圆柱体工件淬火冷却过程温度场的计算模型建立 /12
 - 2.4.3 三维有限大平板激光相变硬化过程温度场的计算模型建立 /13
 - 2.4.4 三维有限大长方体淬火冷却过程温度场的计算模型建立 /15
- 参考文献 /16
- 第3章 温度场计算的有限差分法 /17
 - 3.1 有限差分法的基本原理 /17
 - 3.2 有限差分方程的建立 /17
 - 3.2.1 由微分方程的直接代换法建立相应的有限差分方程 /17
 - 3.2.2 由能量平衡法建立相应的有限差分方程 /21
 - 3.3 边界节点有限差分方程的建立 /23
 - 3.3.1 第一类边界 /24
 - 3.3.2 第二类边界 /24
 - 3.3.3 第三类边界 /25
 - 3.3.4 三维热传导问题边界节点有限差分方程的建立 /25
 - 3.4 有限差分方程的计算机解法 /26
 - 3.4.1 简单迭代法 /27
 - 3.4.2 高斯-赛德迭代法 /27
 - 3.4.3 超松弛迭代法 /28
 - 3.5 有限差分方程的稳定性、精确度与误差 /28
 - 3.6 一维非稳态温度场的有限差分法 /31
 - 3.6.1 无限大平板淬火冷却过程非稳态温度场的有限差分法计算 /31
 - 3.6.2 无限长圆柱体淬火冷却过程非稳态温度场的有限差分法计算 /34
 - 3.6.3 球体淬火冷却过程非稳态温度场的有限差分法计算 /40

- 3.7 二维非稳态温度场的有限差分法 /43
- 3.7.1 长方柱体淬火冷却过程二维非稳态温度场的有限差分法计算 /44
- 3.7.2 激光相变硬化过程二维非稳态温度场的有限差分法计算 /49
- 3.7.3 圆柱体淬火冷却过程非稳态温度场的有限差分法计算 /56
- 3.8 三维非稳态温度场的有限差分法 /71
- 3.8.1 三维有限大长方体淬火冷却过程非稳态温度场的有限差分法计算 /71
- 3.8.2 三维有限大长方体激光相变硬化过程非稳态温度场的有限差分法计算 /84
- 3.9 稳态温度场的有限差分法 /97
- 3.9.1 无限大平板厚向一维稳态传热 /97
- 3.9.2 无限长圆筒体径向一维稳态传热 /102
- 3.9.3 圆球壳体径向一维稳态传热 /105
- 参考文献 /108
- 第4章 温度场计算的有限元法 /109**
- 4.1 有限元法的基本思想 /109
- 4.2 变分原理 /109
- 4.3 温度场的变分问题 /110
- 4.3.1 第一类边界条件的二维稳态温度场的变分问题 /110
- 4.3.2 第三类边界条件的二维稳态温度场的变分问题 /110
- 4.3.3 具有内热源和第三类边界条件的二维稳态温度场的变分问题 /110
- 4.3.4 具有内热源和第三类边界条件的轴对称稳态温度场的变分问题 /111
- 4.3.5 二维非稳态温度场的变分问题 /111
- 4.4 求解区域温度场的离散 /111
- 4.5 有限元法的单元分析 /112
- 4.5.1 单元的划分 /112
- 4.5.2 单元温度场的离散 /113
- 4.5.3 单元的变分计算 /114
- 4.6 有限元法的总体合成 /117
- 4.7 二维非稳态温度场的有限元法 /117
- 4.7.1 二维非稳态温度场的单元变分计算 /117
- 4.7.2 总体合成 /119
- 4.7.3 时间域的离散 /119
- 4.8 轴对称温度场的有限元法 /120
- 4.8.1 轴对称稳态温度场的有限元法 /120
- 4.8.2 轴对称非稳态温度场的有限元法 /123
- 4.9 非线性热传导的有限元法 /126
- 参考文献 /129
- 第5章 热处理过程温度场及组织场的数值模拟 /130**
- 5.1 大型锻件淬火热处理过程的数值模拟 /130
- 5.1.1 淬火热处理过程温度场计算模型的建立 /131
- 5.1.2 淬火热处理过程组织场计算模型的建立 /132
- 5.1.3 温度场数值模拟计算结果 /139
- 5.1.4 组织场数值模拟计算结果 /141

- 5.1.5 计算结果与实验结果的比较 /143
- 5.2 激光束材料表面相变硬化处理过程的数值模拟 /145
- 5.2.1 激光热处理过程的传热学模型 /146
- 5.2.2 激光热处理过程的三维差分方程 /148
- 5.2.3 计算机程序设计 /150
- 5.2.4 激光热处理过程数值分析和工艺优化系统 /150
- 参考文献 /155
- 第6章 材料固态加工过程的力学原理及有限元法 /157**
- 6.1 力学原理 /157
- 6.1.1 材料的弹塑性 /157
- 6.1.2 弹性力学的基本理论 /158
- 6.1.3 弹塑性力学的基本理论 /164
- 6.1.4 热弹塑性力学的基本理论 /166
- 6.2 有限元法 /167
- 6.2.1 弹性力学的有限元法 /167
- 6.2.2 弹塑性力学的有限元法 /173
- 6.2.3 热弹塑性力学的有限元法 /175
- 参考文献 /175
- 第7章 计算机数据采集及数据库技术在材料科学与工程中的应用 /177**
- 7.1 计算机温度场实时数据采集系统 /177
- 7.1.1 温度场实时数据采集系统的整体设计 /177
- 7.1.2 温度场实时数据采集系统的硬件系统设计 /178
- 7.1.3 温度场实时数据采集系统的软件系统设计 /179
- 7.1.4 数据采集的结果与分析 /183
- 7.1.5 温度场实时数据采集系统的性能 /185
- 7.2 计算机温度场实时数据采集系统的应用 /185
- 7.2.1 惯性摩擦焊接过程温度的计算机实时测量 /185
- 7.2.2 淬火热处理过程温度的计算机实时测量 /188
- 7.2.3 板材激光弯曲成型过程温度及位移的计算机实时测量 /192
- 7.3 数据库技术在材料科学与工程中的应用 /193
- 参考文献 /206
- 第8章 计算机数值模拟技术在材料加工领域的应用进展 /208**
- 8.1 船用钢板激光弯曲成型过程的数值模拟 /208
- 8.1.1 金属板材激光弯曲成型研究进展 /208
- 8.1.2 金属板材激光弯曲成型过程热-力耦合模型的建立 /209
- 8.1.3 数值模拟结果与分析 /212
- 8.1.4 数值模拟结果的实验验证 /219
- 8.1.5 金属板材形状对激光弯曲成型影响的数值模拟研究 /221
- 8.1.6 激光工艺参数对激光弯曲成型影响的数值模拟 /222
- 8.2 特殊钢棒线材热连轧过程的数值模拟 /224
- 8.2.1 特殊钢棒线材热连轧过程热-力耦合模型的建立 /224
- 8.2.2 特殊钢棒线材热连轧过程温度场的数值模拟结果 /226

8.3 元胞自动机法材料微观组织的数值模拟 /232

8.3.1 元胞自动机的产生和发展 /232

8.3.2 元胞自动机的基本思想及原理 /233

8.3.3 元胞自动机的组成 /233

8.3.4 元胞自动机的基本特征 /235

8.3.5 元胞自动机的分类 /236

8.3.6 生命游戏 /237

8.3.7 方形铸件凝固过程的数值模拟 /240

8.3.8 动态再结晶过程的数值模拟 /243

参考文献 /264

绪 论

1.1 电子计算机的发展概述

1946年美国研制出了第一台电子计算机 ENIAC,标志着人类进入了电子计算机时代。电子计算机技术发展的速度惊人,仅半个多世纪的时间,电子计算机就已经历了四代的更新和升级,目前正在进行第五代电子计算机的研制。

表 1-1 列出了各代电子计算机性能指标及计算规模。表 1-2 列出了 PC 电子计算机近二十年的发展情况。可见随着电子计算机的发展,其性能迅速提高,计算规模不断增大。这就为电子计算机在材料科学与工程领域的应用奠定了硬件基础。

表 1-1 各代计算机性能指标及计算规模

代	时间	代表机型	运算速度 / (次·秒 ⁻¹)	内存 / B	计算规模
第一代	1946 ~ 1958	IBM701 IBM709	5 万 ~ 6 万	10 ³	一般数据处理
第二代	1958 ~ 1964	IBM7090 Univac1107	几十万	10 ⁵	大量数据处理
第三代	1964 ~ 1970	IBM360	几百万	10 ⁶	中小规模有限元数值计算
第四代	1970 至今	IBM370 Cray-1	数十亿	10 ⁹	大规模有限元数值计算
第五代	1980 ~ ?	—	数万亿	10 ¹⁹	超大规模有限元数值计算

表 1-2 PC 计算机近二十年的发展情况

机型	年代	价格 / 元	主频 / MHz	内存 / B	硬盘	操作系统	可用内存 / B	运算速度 / (次·秒 ⁻¹)
286-486	1989 ~ 1995	1 万 ~ 2 万	33 ~ 66	1 M ~ 8 M	40 M ~ 300 M	DOS- WIN3. x 16 位	640 K	1 万 ~ 10 万
PI	1996	1 万以下	233	32 M	2 G	WIN5. 0 32 位	4 G	2 000 万
P II	1998	1 万以下	300	128 M	9 G	WIN98 32 位	4 G	5 000 万
P III	2000	1 万以下	800	1 G	30 G	WIN2000 32 位	4 G	1 亿

(续表)

机型	年代	价格 / 元	主频 / MHz	内存 / B	硬盘	操作系统	可用内存 / B	运算速度 / (次·秒 ⁻¹)
PIV	2001 ~ 2010	1 万以下	3 000	4 G	160 G	WIN2000 32 位	4 G	10 亿
Intel-i7-3970	2010 ~ 2015	1 万 ~ 2 万	3 500 ~ 4 000	16 G ~ 64 G	4 T	WinXP, Win8 64 位 (多核多线程)	4 T	60 亿 (多核多线程 并行计算)

1.2 计算机在材料科学与工程中的应用简介

电子计算机的历史虽然只有 70 余年,但它的应用已广泛渗透到科学与技术领域,有力地促进了这些科学与技术的发展。计算机的应用渗透到力学领域,出现了计算力学;计算机的应用渗透到物理学领域,出现了计算物理学;计算机的应用渗透到数学和化学领域,计算数学、计算化学也相继出现。计算机的应用也渗透到材料科学与工程各个领域,逐步形成了一门独立于实验科学和理论科学材料科学分支——“计算材料学”。材料科学与工程,作为一门新兴的综合性学科,今天已发展到较高水平,但它还远不是一门成熟的学科,还没有建立可以根据材料的成分准确预测材料的结构和性能的理论,仍处在不断的发展之中。它发展到现阶段,主要还是应用实验的方法来研究材料的成分、结构、工艺与它们的性能之间的相互关系。无论是传统材料的改造、新材料的研发,还是材料的加工成型及热处理工艺的制定,主要是凭经验和大量的实验来进行,即所谓的“炒菜法”。这种方法在很大程度上具有盲目性,耗费了大量的人力、物力和时间。材料的加工成型及热处理过程,如铸造、锻压、焊接、热处理等过程涉及传热、弹塑性变形、凝固、相变、再结晶等过程。自从计算机出现后,人们就试图利用计算机对材料加工成型及热处理过程的温度场、应力场、应变场及微观组织场进行定量的数值模拟计算。经历了几十年的发展,从最初的一维和二维问题的简单有限差分 and 有限元数值模拟计算发展到现在的复杂三维多场耦合问题的精确有限元数值模拟计算。由于早期的计算机计算能力较低,只能把材料加工成型及热处理过程的三维问题简化为一维或二维问题来进行数值模拟计算。计算结果不够精确,对实际材料加工成型及热处理过程的工艺优化指导意义不大。现在由于计算机计算能力的飞速发展,尤其是并行计算技术的发展,可以对材料加工成型及热处理过程的大型复杂三维多场耦合问题进行精确的有限元数值模拟计算。计算结果足够精确,对实际材料加工成型及热处理过程的工艺优化有重要的指导意义。在铸造、锻压、焊接、热处理等领域,科技工作者们经过几十年的努力,在这些领域的数值模拟计算和工艺优化方面取得了研究成果,有很多成功的应用范例,出版了一些专著,并开发出了相应的数值模拟软件。如铸造过程数值模拟软件 ProCast、MAGMA 等,塑性成型过程数值模拟软件 DEFORM、Qform、Dynaform 等,焊接过程数值模拟软件 SYSWELD 等,热处理过程数值模拟软件 DEFORM-HT、COSMAP 等。另外一些商业化有限元数值模拟软件也可用于材料加工成型及热处理过程的数值模拟,如 MARC、ANSYS、ABAQUS 等,在材料加工成型及热处理领域,可在实际生产之前,利用计算机对各种可能的材料加工成型及热处理工艺过程进行数值模拟计算,即实现虚拟材料加工成型及热处理。在此基础上优化出最

佳的材料加工成型及热处理工艺参数,指导实际生产,节省大量的人力、物力和研发时间。

材料科学与工程所研究的物质系统,即“材料系统”是很复杂的,即便是简单的合金钢也是一个多元多相系统,比纯金属及简单溶体要复杂得多。这样一些复杂的问题,即使经过许多简化处理,也相当复杂,需要很大的计算量,如果没有电子计算机,要解决这样一些问题是不可能的。在材料科学与工程工作者的艰苦努力下,应用电子计算机,在一些方面已取得了一定的进展。在半导体材料领域,材料科学工作者采用固体及半导体的能带理论,应用大型电子计算机准确地计算出了一定成分和结构的半导体材料的能带结构,进而预测出了半导体材料的性能,指导了半导体材料的研制和开发,并取得了辉煌的成就,有力地促进了现代电子及电子计算机产业的发展。在镍基高温合金的研制方面,材料科学工作者应用电子计算机模拟了数十万种镍基高温合金的成分和结构,预测其性能,从中筛选出20种左右的合金,再通过实验选出最佳合金成分。这大大地缩短了材料的研制周期,节省了研制的费用,提高了研制的效率。在复合材料领域,材料科学工作者应用电子计算机设计并成功地制造出了许多具有预期性能的复合材料,这在很大程度上实现了“材料设计”的理想。在材料的介观尺度研究方面,材料科学工作者采用元胞自动机法、相场法等,应用电子计算机,可以对金属材料的凝固、晶体生长、再结晶等过程进行数值模拟研究。在材料的微观尺度研究方面,材料科学工作者采用分子动力学方法,应用超级电子计算机,已能在原子及分子的尺度对材料的微观动力学过程进行模拟,这将使人们能够在原子及分子的水平上对材料进行设计。在材料微观物理化学过程的计算机数值模拟领域,也取得了较大的进展,开发出了金属材料相图计算及材料性能模拟软件 Thermo-Cal、JMatpro,分子动力学模拟软件 Materials Studio,以及基于赝势平面波基组的密度泛函软件 VASP 等。

计算机在材料科学与工程领域的应用主要有以下几个方面:

(1) 计算机控制

- ① 金属冶炼过程的计算机控制;
- ② 材料加工过程的计算机控制;
- ③ 金属材料热处理过程的计算机控制。

(2) 计算机数值模拟

- ① 铸造过程的计算机数值模拟;
- ② 锻造过程的计算机数值模拟;
- ③ 焊接过程的计算机数值模拟;
- ④ 热处理过程的计算机数值模拟;
- ⑤ 轧制过程的计算机数值模拟;
- ⑥ 冷压力加工过程的计算机数值模拟;
- ⑦ 复合材料的设计与性能计算及结构优化;
- ⑧ 材料服役过程的计算机数值模拟;
- ⑨ 材料微观物理化学过程的计算机数值模拟。

(3) 材料数据库及销售网络系统

- ① 成分、结构、性能、用途;
- ② 规格、价格、生产厂家。

近年来在材料科学与工程领域逐步形成了第三研究体系,即除了理论研究体系和实验研究体系以外的计算研究体系——计算材料学(Computational Material Science and Engineering)。计算材料学分为两个领域:计算材料科学(Computational Material Science)和计算材料工程(Computational Material Engineering)。计算材料科学主要是采用理论物理和理论化学的理论、概念和方法(第一原理),通过计算机数值模拟计算,探索演绎法预测材料的性能和进行材料结构及成分设计的可能途径。计算材料工程主要是根据传热学、力学、相变、再结晶等原理,采用有限元法、有限差分法或边界元法等数值计算方法对材料的加工、成型、热处理、设计、使用等过程进行数值模拟计算,进而达到优化材料的加工、成型、热处理工艺,优化材料设计方案,预测材料使用寿命的目的。一门新的材料学科——“计算材料学”正在兴起。材料科学与工程学家们梦寐以求的“材料结构和成分设计”和“材料的加工及热处理工艺的优化设计”将逐步得到实现。

计算材料学的研究领域非常广阔,作为本科生教材,本书主要介绍计算机数值模拟技术在材料科学与工程中的应用,同时也涉及计算机数据采集及数据库技术在材料工程中的应用。材料科学与工程专业主要包括铸造、锻压、焊接、热处理等专业方向。其中的共性问题是传热、力学和微观组织转变。因此本书首先介绍计算机在材料科学与工程中应用的概况;然后介绍传热学的基本理论和温度场计算模型的建立,重点阐述温度场计算的有限差分法及相应的计算机程序设计基本方法;再介绍温度场计算的有限元法理论、热处理过程温度场及组织场数值模拟、材料固态加工过程的力学原理及有限元法,并简单介绍计算机数据采集及数据库技术在材料工程中的应用;最后介绍计算机数值模拟技术在材料加工领域的应用进展和未来的发展方向。

参考文献

- [1] 邱大年. 计算机在材料科学中的应用[M]. 北京:北京工业大学出版社,1990.
- [2] 许鑫华. 计算机在材料科学中的应用[M]. 北京:机械工业出版社,2003.
- [3] 许鑫华,叶卫平. 计算机在材料科学中的应用[M]. 北京:机械工业出版社,2006.
- [4] 曾令可,叶卫平. 计算机在材料科学与工程中的应用[M]. 武汉:武汉理工大学出版社,2014.
- [5] 侯怀宇,张新平. 材料科学与工程中的计算机应用[M]. 北京:国防工业出版社,2015.
- [6] 张朝辉,吴波. 计算机在材料科学中的应用[M]. 长沙:中南大学出版社,2008.
- [7] 杨明波,胡红军. 计算机在材料科学与工程中的应用[M]. 北京:化学工业出版社,2008.
- [8] 汤爱涛,胡红军,杨明波. 计算机在材料工程中的应用[M]. 重庆:重庆大学出版社,2008.
- [9] 王军. 计算机在材料热加工工程中的应用[M]. 北京:化学工业出版社,2012.
- [10] 梁志芳,王迎娜. 计算机在材料加工中的应用[M]. 北京:煤炭工业出版社,2012.
- [11] Rabbe D. 计算材料学[M]. 项金钟,吴兴惠,译. 北京:化学工业出版社,2002.

- [12] 张跃,谷景华,尚家香,等. 计算材料学基础[M]. 北京:北京航空航天大学出版社,2007.
- [13] 坚增运,刘翠霞,吕志刚. 计算材料学[M]. 北京:化学工业出版社,2012.
- [14] 江建军,缪灵,梁培. 计算材料学——设计实践方法[M]. 北京:高等教育出版社,2010.
- [15] 李莉,王香. 计算材料学[M]. 2版. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2008.
- [16] 陈舜麟. 计算材料科学[M]. 北京:化学工业出版社,2005.
- [17] 大中逸雄. 计算机传热凝固解析入门[M]. 许云祥,译. 北京:机械工业出版社,1988.
- [18] 陈海清. 铸件凝固过程数值模拟[M]. 重庆:重庆大学出版社,1991.
- [19] 程军. 计算机在铸造中的应用[M]. 北京:机械工业出版社,1993.
- [20] 熊守美. 铸造过程模拟仿真技术[M]. 北京:机械工业出版社,2004.
- [21] 陈如欣,胡忠民. 塑性有限元法及其在金属成型中的应用[M]. 重庆:重庆大学出版社,1989.
- [22] 乔端,钱仁根. 非线性有限元法及其在塑性加工中的应用[M]. 北京:冶金工业出版社,1990.
- [23] 吕丽萍. 有限元法及其在锻压过程中的应用[M]. 西安:西北工业大学出版社,1990.
- [24] 汪凌云. 计算金属成型力学及应用[M]. 重庆:重庆大学出版社,1991.
- [25] 刘相华. 刚塑性有限元及其在轧制中地应用[M]. 北京:冶金工业出版社,1994.
- [26] 谢水生,王祖唐. 金属塑性成型工步的有限元数值模拟[M]. 北京:冶金工业出版社,1997.
- [27] 钟志华,李光耀. 薄板冲压成型过程的计算机仿真与应用[M]. 北京:北京理工大学出版社,1998.
- [28] 李尚健. 金属塑性成型过程模拟[M]. 北京:机械工业出版社,1999.
- [29] 彭颖红. 金属塑性成型仿真技术[M]. 上海:上海交通大学出版社,1999.
- [30] 张凯峰,魏艳红. 材料热加工过程的数值模拟[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2000.
- [31] 刘建生,陈慧琴. 金属塑性成型有限元模拟技术与应用[M]. 北京:冶金工业出版社,2003.
- [32] 董湘怀. 材料加工理论与数值模拟[M]. 北京:高等教育出版社,2005.
- [33] 谢水生,李雷. 金属塑性成型的有限元模拟技术及应用[M]. 北京:科学出版社,2008.
- [34] 陈楚. 数值分析在焊接中的应用[M]. 上海:上海交通大学出版社,1985.
- [35] 武传松. 焊接热过程数值分析[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,1990.
- [36] 刘庄,吴肇基,吴景之,等. 热处理过程的数值模拟[M]. 北京:科学出版社,1996.
- [37] 徐瑞. 材料科学中数值模拟与计算[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2005.
- [38] 李依依,李殿中,朱苗勇,等. 金属材料制备工艺的计算机模拟[M]. 北京:科学出版社,2006.
- [39] 刘相华. 刚塑性有限元——理论、方法及应用[M]. 北京:科学出版社,2013.

传热学的基本原理及 传热学模型建立

2.1 传热学的基本原理

传热学是一门研究热量传递规律的科学。在很多材料科学与工程领域,如铸造、锻压、焊接、热处理等都涉及传热问题。要对材料加工成型及热处理等过程进行数值模拟研究,首先应对这些过程的传热问题进行分析,建立这些过程的传热学模型,然后才能采用各种数值模拟方法,应用电子计算机对这些传热过程的温度场进行数值模拟计算。在此基础上,可进一步计算微观组织场和应力场等。本章主要介绍传热学的基本原理和材料科学与工程领域一些传热过程的传热学模型建立。

2.1.1 温度场

温度是描述物体冷热程度的物理量,同一时刻 t 物体内部温度 T 的分布叫作温度场。在 x 、 y 、 z 直角坐标系中,当温度场随时间改变时,叫作非稳态温度场,其数学表达式为 $T(x, y, z, t)$,它是空间位置 and 时间的函数。当温度场不随时间改变时,叫作稳态温度场,其数学表达式可简化为 $T(x, y, z)$ 。传热学是研究热量传递规律的,凡是有温度差的地方,都应有热量自发地从高温物体传向低温物体,或由物体的高温部分传向低温部分。就物体温度与时间的依赖关系而言,热量传递过程可分为稳态热传递过程与非稳态热传递过程两大类。凡是物体中各点温度不随时间而改变的热传递过程,均称为稳态热传递过程,反之则称为非稳态热传递过程。

2.1.2 热量传递的三种基本方式

热量传递有三种基本方式,即导热、对流换热和辐射换热。在这三种基本方式中,热量传递的物理本质是不同的。

导热常称为热传导,是指直接接触的物体各部分间热量传递现象。导热现象主要发生在固体中,在液体和气体中也能发生,但一般较弱。

对流换热是指流体内部各部分发生相对位移而引起的热量转移现象。但是,在工程中经常遇到的不是在流体内部进行纯粹热对流,而是流体掠过物体壁面时,由于温度差而引起的

热量交换,这种壁面与流体间的热交换现象,称为对流换热,简称对流。

由物体表面直接向外界发射可见和不可见射线,在空间传递能量的现象称为热辐射。热辐射与导热和对流不同,在传递能量时,不需要相互接触,所以它是一种非接触传递能量的方式;热辐射的另一特点,是在能量传递过程中伴随有能量形式的变化,即热能与辐射能之间的转化。在工程实践中通常遇到的是物体之间相互辐射,最终必然会引起热量从温度较高的物体向温度较低的物体转移。这种两个不相互接触的物体表面间,或物体表面与周围气体间通过相互辐射进行热量交换的现象,称为辐射换热。

热量传递往往不是以导热、对流换热及辐射换热这三个基本方式的任一单独形式出现,而是以这三种基本方式的复杂组合出现。

2.1.3 热量传递的基本定律

1. 导热

导热的基本定律为傅立叶(Fourier)定律。单位时间内通过单位截面积所传递的热量,正比于该截面法线方向上的温度变化率,即

$$Q_x = -\lambda A \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2-1)$$

或

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2-2)$$

式中 Q_x —— x 方向上的热流率,即单位时间的热流量, W;

q_x —— x 方向上单位截面积的热流率,称热流密度, W/m^2 ;

A ——垂直于热流方向的截面积, m^2 ;

λ ——材料的热导率, $W/(m \cdot ^\circ C)$;

$\frac{\partial T}{\partial x}$ —— x 方向上的温度梯度, $^\circ C/m$;

负号表示传热的方向永远和温度梯度的方向相反。

2. 对流换热

对流换热的基本计算公式是牛顿冷却公式:

$$Q_k = F h_k \Delta T \quad (2-3)$$

$$q_k = h_k \Delta T \quad (2-4)$$

式中 Q_k —— k 方向上的热流率,即单位时间的热流量, W;

q_k —— k 方向上单位表面积的热流率,称热流密度, W/m^2 ;

F ——垂直于热流方向的表面积, m^2 ;

ΔT ——流体温度和物体表面温度之间的温差, $\Delta T = |T_f - T_w|$, T_f 和 T_w 分别是流体温度和物体表面温度。

h_k ——对流换热系数,简称换热系数, $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$ 。

3. 辐射换热

辐射换热的一个最重要的基本定律是斯蒂芬 - 玻尔兹曼(Stefan-Boltzmann)定律:

$$q_r = \epsilon(T^4 - T_a^4) \quad (2-5)$$

式中 T ——物体表面温度, K;

T_a ——环境温度, K;

q_r ——辐射换热的热流密度, W/m^2 ;

ϵ ——工件表面辐射率;

σ ——斯蒂芬-玻尔兹曼常数, $5.768 \times 10^{-8} W/(m^2 \cdot K^4)$ 。

2.2 热传导方程

热传导方程是描述温度场随时间和空间变化的微分方程, 可根据傅立叶定律和能量守恒定律采用微元体分析的方法进行推导。

2.2.1 直角坐标系下的热传导方程推导

在直角坐标系下, 如图 2-1 和图 2-2 所示, 采用微元分析方法对物体内部一个微元体的热量变化以及其与周围六个面的热量交换进行分析。

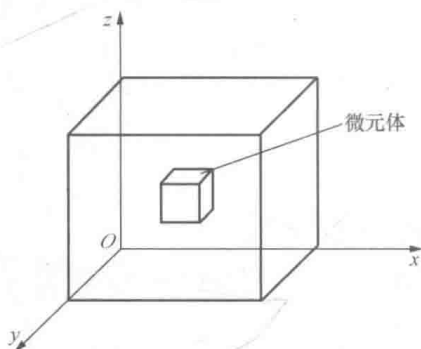


图 2-1 传热物体示意图

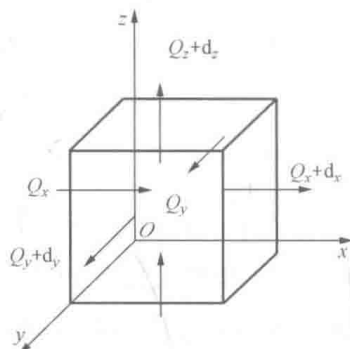


图 2-2 微元体传热示意图

dt 时间内沿 x 方向流入微元体的热量:

$$Q_x = q_x dydzdt \quad (2-6)$$

dt 时间内沿 x 方向流出微元体的热量:

$$Q_x + dx = (q_x + dq_x) dydzdt \quad (2-7)$$

dt 时间内沿 x 方向微元体的蓄热量:

$$dQ_x = Q_x - Q_x + dx = -dq_x dydzdt = -\frac{\partial q_x}{\partial x} dx dydzdt \quad (2-8)$$

同理可得

$$dQ_y = -\frac{\partial q_y}{\partial y} dx dydzdt \quad (2-9)$$

$$dQ_z = -\frac{\partial q_z}{\partial z} dx dydzdt \quad (2-10)$$

微元体中总的蓄热量为

$$dQ = dQ_x + dQ_y + dQ_z = -\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}\right) dx dydzdt \quad (2-11)$$

根据傅立叶定律: