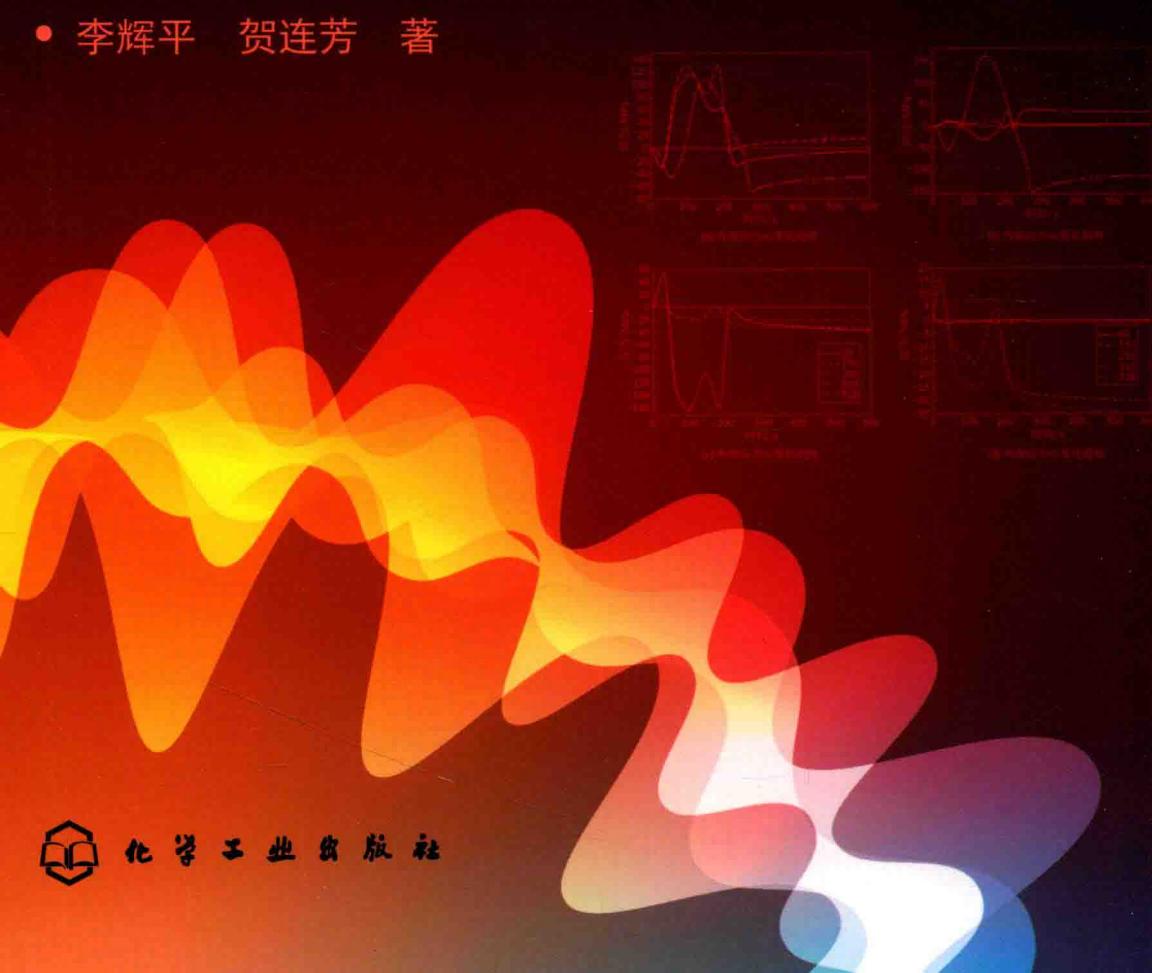


# 热处理工艺



## 数值模拟技术

• 李辉平 贺连芳 著



化学工业出版社

# 热处理工艺

## 数值模拟技术

• 李辉平 贺连芳 著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书系统地阐述热处理过程中温度场、组织转变、力学性能、应力/应变场、渗碳过程的浓度场、奥氏体晶粒度等物理场量的数值模拟技术，以及热处理过程中的多物理场耦合分析技术。在各章节中，均通过相应的实验数据或者典型问题的解析数据对数值模拟的结果进行了验证。

为了给热加工工艺数值模拟提供可靠的热交换边界参数，保证数值模拟结果的准确性和可靠性，界面传热特性数据库逐渐受到科研和技术人员的重视。针对热处理过程中的界面换热问题，本书系统地介绍了基于最优化和数值模拟技术的反向热传导技术，以及各类界面换热系数的求解技术。

本书可作为本科生和研究生的课堂教材，也可以作为企业技术人员的指导读物。

# 本书从属直读

## 图书在版编目 (CIP) 数据

热处理工艺数值模拟技术/李辉平，贺连芳著。  
北京：化学工业出版社，2017.8

ISBN 978-7-122-30131-4

I. ①热… II. ①李… ②贺… III. ①热处理-生产  
工艺-数值模拟 IV. ①TG156

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 161804 号

---

责任编辑：李玉晖

文字编辑：余纪军

责任校对：边 涛

装帧设计：韩 飞

---

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011）

印 装：三河市延风印装有限公司

710mm×1000mm 1/16 印张 12 1/2 字数 237 千字 2017 年 9 月北京第 1 版第 1 次印刷

---

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）售后服务：010-64518899

网 址：<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

---

定 价：48.00 元

版权所有 违者必究

# 前言

FOREWORD

国民经济和现代科学技术的快速发展，对我国机械制造业提出了精密、高效、经济、清洁、产业化等方面的要求，对热加工零件的形状、尺寸精度和力学性能等方面的要求也越来越高。热处理工艺作为主要的热加工工艺，在控制热加工零件的形状、尺寸精度和力学性能等方面发挥着重要作用。对于大型、精密、复杂的热加工零件，仅依靠经验和传统的理论知识完成其热处理工艺设计有较大难度。热处理工艺是改善材料性能的重要手段，但热处理变形和残余应力一直困扰着工程技术人员，是制约机械零件、工装模具制造精度及使用寿命的难题之一。

热处理技术的发展更倾向于利用虚拟的设计-制造-验证一体化环境，将真实的设计、制造、材料、验证、应用乃至维修和全生命周期管理等诸多环节统一起来，从而最大限度地缩短新产品研发周期，降低研发成本，提高产品的市场竞争力。在这个过程中，计算机辅助工程（CAE）技术已成为创新设计、数字化设计和材料制造技术的核心之一。CAE 已被广泛应用至锻造、挤压、热冲压、轧制、热处理等热加工工艺的设计，并取得了较好的效果。美国在 2010 年发布的新版热处理技术路线图中将虚拟热处理作为重点发展方向。中国工程院在 2013 年年底制定的中国热处理技术与表层改性路线图，也将虚拟热处理作为我国热处理领域的十二个重点研究内容之一。目前，高等学校的师生和企业的技术人员越来越重视材料热加工过程中的温度、组织、相变、应力等物理量的数值模拟。

编写一本包含一定的理论知识和工程背景的热处理数值模拟方面的专著，是作者多年的梦想。本书的内容多为作者近年来发表的一些研究结果、学习心得以及指导研究生的成果，并吸收了国内外同行的研究成果。本书包括温度、组织转变、应力/应变、浓度场、晶粒长大、多物理场耦合分析等方面的数值模拟技术，可作为高等学校的教材，也可以作为企业技术人员的指导读物。在本书的撰写过程中，山东大学博士生导师赵国群教授给了我们悉心的指导，山东大学和山东科技大学的其他老师也给了我们不少帮助，在此向他们表示深深的感谢。

由于计算机在热处理领域中的应用非常广泛，且计算机软硬件技术、数值模拟技术的发展日新月异，热处理数值模拟的新技术和新方法不断出现，加之编者学识有限，书中难免有不当之处，敬请读者批评指正。

著者

2017 年 5 月

# 目录

## CONTENTS

### 第1章 概述

1

1.1	引言	1
1.2	虚拟热处理的基本概念	2
1.3	淬火工艺模拟技术的国内外研究现状	3
1.3.1	国外淬火工艺模拟研究现状	3
1.3.2	国内淬火工艺模拟研究现状	3
1.3.3	国内外的热处理软件包	4
1.3.4	热处理过程的优化	6
1.4	淬火过程数值模拟的难点及存在的问题	7

### 第2章 淬火工艺温度场模拟技术

9

2.1	引言	9
2.2	淬火过程导热偏微分方程	10
2.2.1	温度场控制方程	10
2.2.2	初始条件	10
2.2.3	边界条件	11
2.3	瞬态温度场的变分	12
2.3.1	平面瞬态温度场的变分	12
2.3.2	轴对称瞬态温度场的变分	18
2.4	瞬态温度场的求解	19
2.4.1	差分方法	19
2.4.2	系数矩阵的存储方法	20
2.4.3	温度场数值振荡问题	21
2.5	热物性参数的选择	28
2.6	温度场计算流程框图	28

2.7 温度场有限元模拟程序验证 .....	30
2.7.1 变热导率定常内热的一维稳态热传导问题 .....	30
2.7.2 无内热二维瞬态热传导问题 .....	31
本章小结 .....	33

## 第3章 淬火工艺相变过程模拟技术

34

3.1 引言 .....	34
3.2 TTT 曲线 .....	35
3.3 相变过程的数学模型 .....	35
3.3.1 扩散型转变 .....	35
3.3.2 非扩散型转变 .....	36
3.3.3 马氏体相变温度的计算 .....	36
3.3.4 贝氏体相变温度的计算 .....	37
3.3.5 相变潜热的计算与处理 .....	37
3.4 Scheil 叠加法则 .....	37
3.5 杠杆定律 .....	39
3.6 淬火过程的相变塑性 .....	40
3.7 淬火力学性能计算 .....	41
3.8 组织场模拟流程框图 .....	41
3.9 P20 端淬工艺模拟与实验研究 .....	43
3.9.1 端淬工艺模拟 .....	43
3.9.2 端淬实验研究 .....	44
3.9.3 相变潜热对温度场和组织场的影响 .....	52
本章小结 .....	53

## 第4章 淬火过程冷却曲线的采集及介质传热系数的计算

55

4.1 引言 .....	55
4.2 计算模型及计算方法 .....	56
4.2.1 计算模型的建立 .....	56
4.2.2 传热系数优化区间的确定 .....	56
4.2.3 传热系数最佳值的确定 .....	58
4.2.4 黄金分割法迭代次数的分析 .....	60

4.3	传热系数的求解 .....	61
4.4	实验装置 .....	65
4.4.1	实验工装 .....	65
4.4.2	热电偶 .....	66
4.4.3	热电偶调理板 .....	68
4.4.4	数据采集卡 .....	68
4.5	冷却曲线的采集及传热系数计算 .....	71
	本章小结 .....	76

## 第5章 淬火过程应力/应变场的模拟技术

78

5.1	引言 .....	78
5.2	淬火过程力学基本方程 .....	79
5.3	热弹塑性本构关系 .....	80
5.3.1	弹性区的应力应变关系 .....	80
5.3.2	塑性区的应力应变关系 .....	82
5.3.3	过渡区的弹塑性比例系数的计算 .....	84
5.4	应力/应变场有限元基本理论与技术 .....	86
5.4.1	单元和形函数 .....	86
5.4.2	单元应变速率矩阵 .....	87
5.4.3	等效应变速率矩阵 .....	89
5.4.4	边界条件 .....	89
5.5	热弹塑性问题求解 .....	89
5.5.1	变分方程及刚度矩阵 .....	89
5.5.2	增量变刚阵方法 .....	90
5.5.3	迭代收敛准则 .....	92
5.6	预应力淬火过程的应力、应变计算 .....	92
5.7	应力、应变计算流程图 .....	94
5.8	应力/应变计算程序检验 .....	95
	本章小结 .....	98

## 第6章 淬火过程温度、相变和应力的耦合分析

100

6.1	引言 .....	100
-----	----------	-----

6.2	耦合分析程序流程框图	102
6.3	耦合分析有限元模型	103
6.4	温度、相变及应力应变耦合分析	104
6.4.1	温度场的模拟	104
6.4.2	组织场的模拟	106
6.4.3	应力/应变场模拟	108
6.5	弹塑性区域的演变	115
6.6	淬火零件的变形	117
	本章小结	119

## 第7章 渗碳工艺有限元模拟关键技术研究

121

7.1	引言	121
7.2	渗碳工艺有限元模拟	123
7.2.1	基本条件	123
7.2.2	瞬态浓度场的变分	123
7.2.3	有限差分法	130
7.2.4	浓度场的数值振荡问题	131
7.3	有限元模拟程序的实验验证	132
7.3.1	圆柱体的实验与模拟	132
7.3.2	齿轮的实验与模拟	133

## 第8章 基于MC方法的组织模拟关键技术研究

139

8.1	晶粒长大 MC Potts 模型模拟关键技术	139
8.1.1	传统晶粒长大模型关键技术	139
8.1.2	对传统晶粒长大 Exxon MC Potts 模型的改进	141
8.1.3	新模型模拟计算机算法流程	149
8.2	再结晶 MC Potts 新模型模拟关键技术	150
8.2.1	传统再结晶模型关键技术	150
8.2.2	再结晶新模型模拟流程	151
	本章小结	152

9.1 引言 .....	153
9.2 曲面响应模型 .....	153
9.3 回归模型的方差分析 .....	154
9.4 逐步回归分析 .....	156
9.5 气体淬火工艺及工艺参数评估 .....	157
9.5.1 气体淬火技术 .....	157
9.5.2 有限元模型 .....	158
9.5.3 目标函数的建立 .....	158
9.5.4 工艺参数评估 .....	159
9.6 阶段性传热系数模型 .....	161
9.6.1 设计变量的确定 .....	161
9.6.2 Box-Behnken 实验设计 .....	162
9.6.3 响应曲面的拟合 .....	164
9.6.4 优化目标函数的建立 .....	166
9.6.5 工艺参数的优化结果 .....	166
9.7 区域性传热系数模型 .....	170
9.7.1 设计变量的确定 .....	170
9.7.2 中心复合实验设计 .....	171
9.7.3 响应曲面的拟合 .....	173
9.7.4 优化目标函数的建立 .....	175
9.7.5 工艺参数的优化结果 .....	176
本章小结 .....	179

# 概 述

### 1.1 引言

随着现代科学技术的发展，对机械零件的性能和可靠性的要求越来越高。金属零件的内在性能和质量，除材料成分特征外，主要是在热加工过程中形成的。热处理则是热加工过程的最后一道工序，起着举足轻重的作用。重要零件都要经过热处理工序做组织和性能的最后调整。由于在热处理过程中，零件内部温度分布不均匀、组织转变过程的不均匀而产生内应力，如淬火过程中的瞬时应力（又称淬火应力）和最后形成的残余应力。如果处理不当，淬火应力或残余应力过大，不仅影响零件使用寿命、设备安全，甚至在淬火过程中产生裂纹或开裂而使零件报废，这种问题对大型锻件、高合金钢零件等更为突出。

淬火作为改变和提高材料性能的重要手段，在汽车、航空、运输、建筑及其他制造业领域中有着广泛而重要的应用。多年来材料科学与技术的发展为人们积累了大量宝贵的实践经验和深入系统的理论知识。晶体学、金相学和金属学从微观到宏观揭示了淬火的奥秘，电子显微镜、X射线衍射仪等先进的分析测试仪器被用于探索淬火的客观规律，基于现有的知识，如相图、TTT图、CCT图和淬透性曲线，已经可以对淬火工艺进行可靠的设计。利用现有的技术，如测温技术、电控技术和冷却技术，已经实现了对淬火工艺参数的较为精确的控制。

尽管如此，由于淬火过程本身的复杂性，大量的问题仍未得到圆满的解决。淬火过程涉及复杂的物理及化学过程，材料内部的温度、组织及应力不断地发生变化。虽然单就传热、固态相变和弹塑性力学三方面来讲，都有各自成熟的理论，但这三种不可逆过程相互耦合的问题，特别是固态相变的多样性与复杂性及传热和弹塑性变形之间的交互作用尚缺乏定量的统一理论；另外在实时检测各物理量的变化方面，也存在一定的难度。温度场虽然可以动态测量，但热电偶的插入会对工件造成破坏，而且热电偶本身也影响了温度场的分布。组织状态和应力分布难以在热处理过程中在线进行测量。要测量工件内部的情况，需冷却到室温后将工件解剖，不但人力、物力、财力浪费很大，且所得结果仍有较大的局限性。在生产实际中，一般采用试错法或冗余法来解决具体问题。淬火变形和残余

应力问题长期以来一直困扰着设计人员和工艺技术人员，是阻碍机械制造和工模具制造技术进步的难题之一。淬火过程中，瞬时应力和残余应力一直是热处理工作者极为关注的问题之一。

在淬火冷却这个复杂的物理过程中，温度场、组织场和应力场都在连续不断地变化，三者互相联系、互相影响、不可分割。要准确模拟这一过程，必须建立耦合的数学模型，这是热处理领域在世界范围内的研究热点和最新方向。温度场、组织场和应力场的耦合关系相当复杂，牵涉面广，结合温度场传热计算、相变动力学计算、有限元数值方法和热弹塑性力学等学科的研究成果，建立一个合理而完善的数学模型是最为关键的环节。

20世纪70~80年代以来，计算机技术的迅猛发展，使计算机作为一个强有力工具在各工程领域获得了越来越广泛的应用，淬火领域也不例外。由于计算机技术和数值计算方法的发展，使材料热加工过程的计算机模拟技术越来越受到工业界的认可和重视。计算机模拟可以在虚拟的实验室中进行材料热加工过程的各种虚拟实验。与传统实验相比，虚拟/仿真实验具有灵活、快速、低价等优点。对于淬火过程模拟就是利用热学、力学、数学及材料学的知识，通过对温度场、组织场、应力场的耦合求解，给出温度、组织、应力在每一时刻全场分布的定量数据，研究工艺参数对各种场的影响规律，并以此为依据高效地优化工艺参数。

## 1.2 虚拟热处理的基本概念

虚拟热处理最早由IMS(Intelligent Manufacturing System)提出，与之类似的说法还有热处理计算机模拟、热处理数值模拟、智能热处理、数字化热处理等，这些概念都具有相同的实质，也就是基于热处理数值模拟技术实现真实热处理过程的仿真。

事实上，虚拟热处理作为近年来提出的新概念，借鉴了20世纪80~90年代以来发展的虚拟制造技术。虚拟制造技术是在强调柔性和快速的前提下于20世纪80年代提出的概念，并在90年代得到重试和快速发展。它以虚拟现实和仿真技术为基础，对产品的设计、生产过程统一建模，在计算机上实现产品从设计、加工、装配、检验直至整个生命周期的模拟和仿真。1994年7月在美国俄亥俄州举办的虚拟制造用户专题讨论会上，人们根据制造过程的侧重点不同将虚拟制造分为三类，提出来“三个中心”的分类方法，即“以产品为中心的虚拟制造”、“以生产为中心的虚拟制造”和“以控制为中心的虚拟制造”。这三类虚拟制造实际上涵盖了设计、生产、设备三个环节。制造产业的虚拟化广阔前景吸引美国、欧洲及日本等国纷纷开始对其进行研究，在虚拟原型系统开发、虚拟环境构建、虚拟装配等方面取得了一系列的研究成果。虚拟制造在工业上，尤其是在汽车、飞机、军工等领域得到有效应用并取得明显成效。

热处理作为制造产业的一个重要环节，在制造业发挥重要作用的数字化、虚拟化必然要出现在热处理行业，虚拟热处理的概念也应运而生。虚拟热处理是围绕对产品热处理性能和畸变控制的要求，利用计算机模拟技术预测产品的温度、性能和组织等，进而提出优化的工艺参数，指定产品热处理工艺的制定。

## 1.3 淬火工艺模拟技术的国内外研究现状

### 1.3.1 国外淬火工艺模拟研究现状

国外对于淬火过程的数值模拟研究始于 20 世纪 80 年代。日本的 Umemoto 对 Fe-0.2C、Fe-0.43C 合金的铁素体<sup>[1]</sup>、法国的 Fernandes 对 XC80 合金的珠光体<sup>[2]</sup> 进行了类似的研究，验证了该离散原则的可行性。奥地利的 Rammerstorfer<sup>[3]</sup> 对淬火过程进行了热弹塑性分析，并对比了等向强化和随动强化、蠕变、相变塑性等对模拟结果的影响，结果发现相变塑性对应力影响较大，而蠕变影响较小可以忽略；日本的 T. Inoue<sup>[4,5]</sup> 对淬火和回火过程进行了持续、系统的物理模拟研究和数值模拟研究，他们开发出的热处理数值模拟软件“HEARTS”可对中小型零件的水淬、渗碳淬火、感应淬火进行数值模拟，并得到实际测试结果的验证。法国的 Denis<sup>[6,7]</sup> 则在马氏体淬火过程中的热力学分析和内应力计算过程中全面考虑了相变塑性和内应力对马氏体转变动力学的影响，描述了它们对残余应力的影响，并与实际测定的应力状态进行了对比。匈牙利的 Gergely<sup>[8]</sup>、瑞典的 Sjöström<sup>[9]</sup> 和德国的 Schröder<sup>[10]</sup> 也对淬火过程硬化法则、产品尺寸、工艺条件的影响进行了数值分析。另外，国外多位学者研究了感应加热过程中的电-磁-热耦合技术，利用有限元方法对齿轮等零件的感应淬火工艺进行了数值模拟和工艺参数优化<sup>[11,12]</sup>。近年来，国外的研究学者对淬火过程模拟表现出浓厚的兴趣，发表了大量的文献，并召开了多次专门性的国际会议<sup>[13,14]</sup>。

国际组织 IMS 于 2003 年组织欧盟、日本和韩国成立了虚拟热处理方面的研究课题组，开发具有新功能、高精度的数值模拟软件。美国在 2007 年、2010 年发布的新版热处理技术路线图中都将虚拟热处理作为重点发展方向。

### 1.3.2 国内淬火工艺模拟研究现状

20 世纪 80 年代初，国内开始做淬火过程的数值模拟研究工作。最初是原化工部机械研究院的姚善长<sup>[15]</sup>、陕西机械学院袁发荣<sup>[16,17]</sup> 等人对轴对称零件的淬火过程进行了计算机模拟，上海重型机器厂的吴景之<sup>[18,19]</sup> 对大锻件加热和冷却时的温度场进行了模拟，中国航空信息中心的石林<sup>[20]</sup> 用计算机模拟的方法研究了涡轮盘淬火时的冷却速率、淬火介质流动以及残余应力的变化。八五期间，清华大学与上海重型机械厂合作对大锻件的淬火进行了较为系统的研究<sup>[21,22]</sup>，实测了若干钢种的热物性、力学性能、相变动力学和相变塑性参数，还对常用的淬火工艺如水淬、喷水、喷雾等过程的表面传热系数进行了研究，获得了大量的

实测数据与经验公式。在此基础上，利用有限元法独立开发了热处理数值模拟软件包 NSHT (Numerical Simulation of Heat Treatment)，并利用该软件对大锻件的淬火过程进行了数值模拟，获得了较满意的结果。上海交通大学自 90 年代初期开始一直致力于渗碳、渗氮及淬火过程的计算机控制与模拟工作，在通用有限元平台 MSC. MARC 软件的基础上，通过编制用户自定义的子程序实现了冷轧辊<sup>[23,24]</sup>、支承辊<sup>[25,26]</sup>、锚环<sup>[27]</sup>、曲轴<sup>[28]</sup> 在加热淬火过程中的温度、组织和残余应力<sup>[29]</sup> 计算。在对有限元计算方法<sup>[30,31]</sup>、表面传热系数<sup>[32,33]</sup>、相变塑性、相变动力学<sup>[34]</sup>、感应加热数值模拟<sup>[35,36]</sup> 等基础理论的研究方面已做了大量的研究工作。从第一届热处理残余应力大会开始就有我国学者有关数值模拟的论文出现<sup>[37]</sup>。在以后的第二届、第三届淬火及淬火变形控制会议中也有我国的论文<sup>[38,39]</sup>。

在我国，由于受三维建模技术、仿真技术的约束，对虚拟制造相关的研究起步较晚，但近几年发展迅速，一批科研院校和研究所纷纷加入到虚拟制造的研究队伍中来。2000 年第一届热加工过程数学模型与计算机模型国际会议在上海交通大学成功举办，2010 年又在上海佘山成功举办了第四届热加工过程数学模型与计算机模型国际会议，基本展示了当前国际上热处理计算机模拟领域的科研与应用水平，同时也说明我国在这一研究领域中已取得了飞速的发展。2014 年制定的中国热处理技术路线图也将虚拟热处理作为我国热处理方面的 12 个重点研究内容之一。

总体来说，国内关于虚拟制造尤其是热处理方面的研究还处在初级阶段，而且多集中于高等院校和少量的研究院所，企业和公司目前介入较少。

### 1.3.3 国内外的热处理软件包

目前，用于热处理过程的软件包主要有：T. Inoue 及其合作研究者基于冶金学-热学-力学开发了有限元模拟程序 HEARTS (HEAt tReaTment Simulation system) 用于模拟热处理过程<sup>[40,41]</sup>，此软件包可以借助于有限元方法模拟伴有相变的金属热处理过程的金属结构、温度场和应力/应变场，如淬火和回火，T. Inoue 用该软件包模拟了直齿圆柱齿轮的渗碳和油淬工艺、日本军刀的渗碳和淬火工艺，得到了淬火过程的温度变化、相变情况、应力/应变和淬火变形情况等。另一个比较有名的热处理模拟软件包是 TRAST<sup>[42]</sup>，TRAST 软件是基于 ABAQUS 软件包开发的一个用于模拟淬火过程温度、相变和应力应变的用户子程序包。GRANTAS 软件包<sup>[43]</sup> 是由日本 KOMATSU SOFT 公司开发一个用于热处理工艺模拟的专用软件，它包含了专用于该软件的前处理和后处理模块，能够模拟渗碳工艺及淬火过程的温度场、组织场和应力应变场，也能模拟淬火力学性能；Hayato Shichino 等<sup>[44,45]</sup> 用 GRANTAS 软件包模拟了直齿圆柱齿轮的渗碳和淬火工艺，得到的模拟值与实验值吻合较好。DANTE<sup>[46]</sup> (Deformation

Analysis for Thermal Engineering) 是一个用于热处理工艺设计和分析的商业软件包, 它是由 Ferguson 在成形控制技术公司 (Deformation Control Technology Company) 开发的, DANTE 也是以 ABAQUS 为开发平台, 其非线性求解器的求解能力依赖于有限元软件包 ABAQUS, 对于相变过程的关键技术是通过用户子程序的方式加入到软件包中, DANTE 的前处理模型是靠商品化的前处理软件包 Patran 进行处理, 它可以模拟退火、淬火和渗碳过程。DEFORM<sup>[47]</sup> 是一个体积成形模拟软件包, 它是由 SFTC (Scientific Forming Technologies Corporation) 开发, 主要用于模拟各种自由锻造、模锻、挤压和管成形等工艺, 最近, Wu and Tang<sup>[48]</sup> 对其进行二次开发, 使其可以对热处理过程进行模拟, 另一些研究者<sup>[49,50]</sup> 也用有限元技术对 DEFORM 的热处理模块进行了改进。Sanchez-Sarmiento G S 等开发成功的 INDUCTER-B<sup>[51]</sup> 是用于预测感应淬火层硬度的模拟软件。另外, 一种基于工件几何形状和钢铁成分预测工件淬火硬度分布的软件 INC-PHATRAN<sup>[52]</sup>, 也已开发成功, 并可以模拟多种淬火工艺。清华大学独立开发的有限元软件 NSHT 可以对大锻件的热处理过程进行预测, 也属于专用的有限元软件。上海交通大学自 20 世纪 90 年代初期开始一直致力于渗碳、渗氮及淬火过程的计算机控制与模拟工作, 课题组开发的渗碳控制软件 SJTU-CARB-CAD<sup>[53]</sup> 已成功地应用于渗碳热处理炉的在线控制与在线决策, 并在盐城丰东公司投入批量生产; 另外, 在通用有限元平台 MSC. MARC 软件的基础上, 以 MARC 软件包为开发平台, 通过用户子程序向软件包中添加相变量计算子程序, 利用 MARC 软件包的温度场和应力应变场计算程序模拟淬火过程零件的温度、相变及应力应变情况, 实现了冷轧辊、支承辊、锚环、曲轴在加热淬火过程中的温度、组织和残余应力计算。TIAMAT<sup>[54]</sup> 是用于模拟材料加工过程的有限元软件, 它在三维有限元自适应划分、热力学耦合分析、弹塑性分析和相变塑性分析等方面都具有较大的优势。

目前多数的淬火模拟研究结果都是在通用的有限元软件 (如 MSC. MARC、DEFORM、ABAQUS、ANSYS 等) 上通过添加用户自定义程序来实现的, 这些通用的软件包具有友好的界面, 强大的前处理和后处理能力, 它开放的接口可以方便地植入子程序进行二次开发, 加入子程序后不仅可以实现复杂热处理过程温度场、组织场和应力场的预测, 还可以计算淬火介质的流动情况, 方便地实现多场的耦合。但是, 由于这些软件在开发初期并不是针对热处理这种高温下的复杂情况, 没有考虑各种热物性参数的变化, 利用其二次开发平台也无法添加到程序中, 而国内外学者研究表明, 热物性参数对应力、组织、温度的影响极大。例如, 对于相变潜热无法作为内热源代入到温度场程序中反复迭代至收敛状态, 而只能将上一时间步产生的潜热作为当前时间步的热源进行处理, 这样, 对时间步长的要求较为严格, 如果选择的时间步长不合理, 将会影响到温度场、组织场和应力应变场的计算精度。

### 1.3.4 热处理过程的优化

目前，在热处理工艺参数的优化方面，主要有以下几位学者进行了系统的研究工作。Röhl 和 Srivatsa<sup>[55]</sup> 用改进的遗传算法优化了涡轮盘的冷却速率，并用有限差分方法得到了相应的灵敏度信息，在他们的研究中，由于考虑到计算时间的问题，他们没有考虑相变及其对应力应变的影响。Batista 和 Kosel<sup>[56]</sup> 开发了淬火残余应力灵敏度分析系统，利用该系统得到了淬火过程来源于材料评估误差的残余应力相对误差的灵敏度。Karthikeyan 等<sup>[57]</sup> 设计了一个数学模型，用该模型优化铝硅碳化物颗粒混合物的热处理条件，以便使混合物得到最大的屈服强度和延展性，在他们的研究中，使用曲面反应法来拟合他们所提出的数学模型，拟合的过程变量主要包括 SiC 的体积分数、时效温度、时效时间和溶解时间。Saigal 和 Leisk<sup>[58]</sup> 利用 Taguchi 分析方法优化了氧化铝/铝基金属混合物的拉伸性能，在优化过程中所考虑的过程变量主要有增强颗粒的体积分数、溶解时间、时效温度、时效时间，Taguchi 分析方法所得结果显示：一般地，屈服强度每增加 4%，最终的拉伸强度就增加 7%。

曲面响应法是由 Box 和 Wilson<sup>[59]</sup> 在 20 世纪 50 年代首次提出，现在这种方法已被广泛应用于化学<sup>[60]</sup>、农业<sup>[61]</sup>、建筑业<sup>[62]</sup>、制造业<sup>[63,64]</sup> 等领域。美国的 R. V. Grandhi 和 Z. Li<sup>[65]</sup> 于 2001 年首次利用 DEFORM<sup>HT</sup> 软件包对轴对称类锻件和平面应变锻件的气体淬火过程进行了模拟，并在此基础上对 DEFORM<sup>HT</sup> 软件进行二次开发，利用曲面响应法以残余应力、硬度、淬火变形等方面为目标，对气体淬火过程的传热系数进行了优化，在他们的研究中，所考虑的过程变量主要包括各个表面上的传热系数、各个表面使用某种传热系数进行淬火的时间等，通过对优化模型进行拟合，得到使零件表面的硬度、残余应力和变形等均匀的淬火工艺参数。

目前，国内热处理工艺参数的优化一般都是对多组工艺参数进行反复模拟反复实验，然后对模拟结果或实验结果进行处理，再选择出较合理的工艺参数。顾剑锋等<sup>[66]</sup> 对 MSC. MARC 软件包进行二次开发，利用有限元方法模拟了 9Cr2Mo 冷轧辊加热过程中的瞬态温度场和奥氏体化进程，建立了加热奥氏体化过程的数学模型，并通过采样轧辊内部一些特定位置的加热曲线验证了模拟结果的准确性，他们根据模拟结果提出了优化的冷轧辊加热工艺，明显地缩短了冷轧辊的加热时间。管一弘等<sup>[67]</sup> 从相变理论和热弹塑性理论出发，结合激光淬火实验资料，建立了考虑相变过程、温度场和热物性系数的非线性耦合热传导方程，也建立了相变组织与材料性能的数值计算模型，然后用有限元方法对激光淬火温度场、组织场和材料性能进行模拟，根据模拟的结果，获取了较合理的激光淬火工艺参数。张丽萍<sup>[68]</sup> 以淬火温度、淬火保温时间、回火温度、回火保温时间为设计因素进行实验，根据多组实验结果并运用线性回归、均匀设计和最优化方

法,获得了发动机材料30CrMoSiA调质处理的最佳工艺条件。栗和平等<sup>[69]</sup>以淬火温度、淬火时间和淬火介质为设计因素,以多组实验结果为依据并用正交设计方法对0Gr19Ni9中厚板热处理工艺进行优化,得到了较好的中厚板热处理工艺参数。叶健松、李勇军等<sup>[70]</sup>为了实现大型支承辊热处理过程的虚拟生产,运用非线性有限元法对大型支承辊在不同介质中淬火的温度场、组织场和应力/应变进行了计算机模拟。对以UNCON(15%)或水为淬火介质的淬火工艺进行反复计算、优化,得出大型支承辊的热处理合适工艺条件为:从加热炉中出炉后,空冷5~10min,然后淬水15min,再转入300℃的炉中保温30h。

## 1.4 淬火过程数值模拟的难点及存在的问题

材料的热处理过程是一个温度、组织、应力/应变相互影响的高度非线性问题,在理论上对温度场、组织场、应力场耦合求解几乎是不可能的。用物理模拟方法进行研究也存在许多局限性,因为很难找到各种物理量都能满足相似原理的物理模型;对小试样在一定条件下测得的温度场、组织场、应力场很难直接用到真正尺寸的实物上;由于热处理过程涉及高温,对实物的温度、组织、应力进行在线测量难度很大。

近几年,随着计算机技术、有限元技术、人工智能技术的发展,可根据零件热处理过程建立适当的物理模型,并以物理模型为基础,建立数学模型,通过计算机求解各场量,利用计算机图形学理论动态显示零件热处理过程中的温度、组织、应力应变等随时间变化的情况,得到热处理完毕后的残余应力及零件的变形情况。根据数值模拟结果,可以找出适合工艺要求的工艺参数,并为实际生产过程提供参考或指导实际生产。淬火过程计算机模拟技术近年来虽然取得了一些进展,并显示出巨大的优越性,但它仍处于发展阶段,许多重要问题有待于进一步研究,它的潜力也没有真正发挥出来。

从总体来看,淬火过程的数学模型分为两个层次:一个是局部的包括组织、晶粒和分子结构等微观层次的模型;另一个是表面宏观层次的模型。这些模型或是基于位错、热力学等理论,或是基于实验现象<sup>[71]</sup>。但它们都存在着一定的不足,主要表现在以下方面。

1) 模型难以定量描述相变过程。在组织模拟过程中,即使存在相应的相变动力学模型(包括材料形核和长大模型),由于相变本身的复杂性,这些模型还不足以精确地反映相变的进程。

2) 应力对形核率的影响难以表达。在应力作用下,扩散型相变特别是珠光体相变的形核率会大大增加,但到目前为止,应力对相变动力学的作用还难以从微观层次上解决。

3) 微观变形机理难以预测宏观材料行为。目前对变形机理的认识水平,对

于预测像钢铁这种多相材料的宏观变形行为仍存在一定的困难。

4) 材料参数不完整。材料热物性、力学性能等参数的不完整也是制约热处理模拟技术发展的关键问题之一。许多常用的金属材料在各种温度下的物性参数残缺不全, 各种材料在不同介质中物性参数往往不具有普适性规律, 处理方法的选择具有相当的随机性和任意性。研究各种物性参数的测定方法, 建立物性参数与材料成分与温度间关系的回归公式已成为计算机模拟技术发展中的当务之急。

5) 相变塑性理论还未成熟。相变塑性是材料在相变时发生于低应力水平下的塑性变形。虽然目前已有几种理论模型, 但由于相变塑性实际是几种物理机制同时作用的结果, 一种模型难以反映实验结果。

6) 表面传热系数的测算还很不精确。传热系数是温度场计算中最为重要的非线性边界条件。虽然用集中热容法或反向热传导法可以粗略估计工件表面传热系数的大小, 但到目前为止, 传热系数的测算也仅局限于二维简单表面, 而且存在较大误差, 对于复杂的三维表面传热系数测算, 目前无论从计算方法还是实验手段上都存在较大困难。

7) 多数淬火过程模拟均是在已有的有限元软件基础上进行二次开发来完成, 由于这些软件在开发初期没有考虑材料热物性参数的变化, 虽然有的材料参数可以通过用户子程序加入, 但对于淬火中的多数热物性参数没有办法加入, 因而在模拟时只能以常数来替代, 造成了比较大的模拟误差。

8) 淬火过程是一种温度、相变、应力/应变相互作用的高度非线性热弹塑性问题, 模拟时迭代计算较多, 计算时间较长, 在有限元计算方法上寻找既能保证温度场、组织场和应力/应变场的计算精度, 又能减少求解时间的方法, 以便提高研究和计算效率。

淬火过程如此之复杂以至于到目前为止还没有一种数学模型不存在这样或那样的局限性。但数学模型作为一种知识表达方式, 对热处理技术由经验定性型向科学定量型的转变做出了巨大的贡献。随着数学模型的日趋复杂, 可以更好地反映工艺过程中各种现象的交互作用和诸多因素的影响。而且随着传热学、数值计算学、相变动力学、力学等相关理论的发展, 以上的问题和难点终究会逐步得以解决。