

TP389.2 TG

电子计算机 在热处理中应用 论文集

中国造船工程学会工艺与材料学术委员会

《热加工工艺》编辑部

上海交通大学科技交流室

一九八七年十二月

9: TG

1

内 容 简 介

本书收集气体渗碳、气体渗氮、最优化加热、感应淬火等热处理工艺过程微机控制以及扩散、传热的电子计算机计算等方面的论著十余篇，包括作者们近几年有关微机在热处理中应用科研成果的总结性论文及译文。反映了八十年代计算机科学在热处理中应用的最新成就。除了介绍应用实例之外，还比较完整地叙述了在热处理技术中应用电子计算机的关键——建立各种热处理工艺数学模型所需具备的理论基础。

徐建明、罗宗信
本书编辑：蔡锡泉、杨福兴

前言

电子计算机已渗透到国民经济各个领域之中,在工业生产过程控制方面发挥着日益重要的作用。热处理是一项传统技术,应用计算机控制不仅能使原有的热处理工艺过程自动化、规范化,更重要的是在电子计算机的帮助下能使工程技术人员制造出前所未有的甚至是过去无法想象的热处理新技术和新方法,例如最佳加热规范的优化与自动控制,淬火过程的组织、性能与内应力的模拟,感应加热淬火的优化控制,化学热处理过程中的渗层浓度场的预测与动态控制,多因素碳势精确控制等等都只有应用电子计算机才能实现。从国内外发展的趋势可以看出:电子计算机已经使热处理的面貌发生深刻的变化,成为当前热处理领域中最重要的发展方向,为了适应这种形势发展的需要,中国造船学会工艺与材料学术委员会、上海交通大学科技交流室、热加工工艺编辑部组织编辑出版了这本论文集,并将作为中船总公司电子计算机在热处理中应用讲习班教学用书。

电子计算机的硬件与软件是相辅相成的。在热处理工艺微型计算机控制技术中,软件的开发有赖于热处理工程技术人员提供工艺的构思和计算方法。众所周知,在热处理过程中工件内部温度场、浓度场、应力场的变化都可以用偏微分方程描述,正是偏微分方程数值解及其电子计算机计算的研究成果促使热处理工艺摆脱对工艺结果的定性估计和凭经验制订工艺规范的落后状态,向着定量化精确控制的方向飞跃。因此在本文集的内容选编上,除了收集一些应用微型计算机控制热处理过程的实例之外,还力图比较系统地介绍偏微分方程的数值解法,帮助读者初步掌握从事开发热处理数学模型,编制热处理过程控制软件和热处理工艺电子计算机辅助设计等工作所必需的数学基础,这些内容对于从事铸锻焊等热加工工艺计算机应用的人们也有参考价值。

中国造船学会工艺与材料学术委员会主任

董世家

1987年10月

目 录

气体渗碳数学模型与微机控制	(1)
用微型计算机实现多因素碳势控制与碳浓度分布的控制	(8)
传热的有限差分方程计算概论	(16)
微型计算机氮势动态控制	(25)
SJTU-560Ⅳ型微型计算机控制系统	(32)
渗碳的扩散模型	(36)
热扩散方程的九种三维数值计算方法的比较	(48)
根据叠加原理导出的三维数值方法	(61)
金属水冷过程中热传递系数的测定	(76)
气相平衡的计算——应用牛顿—拉夫森方法的一种通用算法	(85)
碳—氢—氧体系平衡成分计算方法及其在高温气冷反应器气氛中的应用	(94)
关于“碳—氢—氧体系中平衡成分的计算方法及其在高温气冷反应器环境中的应用” 的讨论	(99)
同时加热和连续加热感应淬火的理论和实验研究	(106)
感应淬火的模型	(131)
钢淬火过程中相变和温度变化的数学模型	(139)

气体渗碳数学模型与微机控制

司鹏程 潘健生 钱初钧 胡明娟 张 研等

(上海交通大学)

一、前言

钢件气体渗碳是工业上应用最广泛的表面硬化技术,已有六十多年的历史。但长期以来关于渗碳的理论研究较为迟后,至今渗碳工艺控制精度不高,渗碳层质量不够稳定,不能满足近代工业对渗碳零部件提出的更高性能要求与寿命指标。因此,关于渗碳的理论研究与工业控制技术在八十年代仍受到世界各国研究者的重视。

从七十年代起,人们就试图以微电脑应用于气体渗碳的工业控制。许多研究者^[1-4]对渗碳过程进行了热力学和动力学方面的分析。Collin 等^[5]和 Goldstein 等^[6]提出了渗碳过程扩散模型,进行了计算机模拟。Pavlossoglau^[7]详尽研究了扩散方程的理论解和数值解方法与计算机模拟技术。近几年来,国内外研究者^[8-12]开发了气体渗碳炉气碳势微机控制技术,已获显著成效并在进一步发展。

应当指出,如果缺乏正确的气体渗碳数学模型,微电脑的应用仍然只能停留在较低的水平上。因为微电脑在热处理中的应用效果主要取决于软件,只有建立在数学模型基础上的应用软件才能使热处理工艺及其控制技术产生质的飞跃,真正发挥微电脑的潜力。

本文认为,数学模型并不是指炉气碳势与气相组成等个别简单的关系公式,而是指物质传递与扩散过程等的完整的数学描述,它与微电脑控制技术相结合,可使气体渗碳等技术摆脱凭藉定性概念制订工艺规程的落后状态,从而进入在科学计算基础上实现优化生产的崭新阶段。因此,可以认为提出合适的数学模型是热处理工艺微电脑控制的重要技术关键所在。

二、渗碳数学模型的建立

由于各类渗碳零件的服役条件不同,对性能的要求各异,从而要求精确控制渗碳过程,使钢件渗层达到预期的碳浓度分布和层深的要求,以大幅度地提高使用寿命。

建立气体渗碳数学模型时,需从渗碳过程的物理本质出发。钢件渗碳过程中离表面不同深度处的瞬时含碳量称为碳的浓度场。当任意点浓度不随时间而变时为恒定浓度场,在单位时间内进入与离开该点的碳量相等。碳浓度随距离和时间而变时,浓度是空间和时间的函数,这正是钢件在渗碳过程中的扩散过程,可用 Fick 第二定律加以描述:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (1)$$

当 D 与碳浓度无关时, 简为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2)$$

求解这类非稳态扩散方程需要一个初始条件和两个边界条件, 确切地定出这些条件是至关重要的。

初始条件指开始时的浓度场, 指明钢件表层起始时刻的碳浓度分布。以往有些关于渗碳的扩散计算中, 常假定初始条件为:

$$C|_{t=t_0} = C_0 \quad 0 < x < \infty$$

式中 C_0 为钢的原始含碳量。实际上渗碳过程分为强渗与扩散过程, 有时采用分段渗碳, 在采用计算机计算时, 某一时刻的终了阶段就是下一时刻的初始阶段。因此渗层碳浓度分布的初始条件应列为:

$$C|_{t=t_0} = f(x) \quad 0 < x < \infty \quad (3)$$

$f(x)$ 为一函数, 取决于前面阶段的状态。

边界条件指渗碳层内外两个界面处的状态。外边界条件反映钢件表面与周围炉气作用情况。有的著者^[6]求解渗碳扩散方程时, 假定钢件表面瞬时达到奥氏体的饱和碳浓度, 边界条件列为:

$$C|_{x=0} = C_s|_{t>0} \quad (4)$$

在特定条件下表面碳势等于炉气碳势:

$$C|_{x=0} = C_g \quad (5)$$

上述假定表面碳浓度等于恒定值称为第一类边界条件, 只适用于特例, 将其应用于普遍场合, 将导致较大误差。实际渗碳过程钢件表面与炉气不易达到完全平衡状态, 炉气与表面间不断进行物质传递的过程, 因而认为 $C_s = C_g$ 时, 即表示炉气与钢件在瞬间即可达到平衡, 这是不可能的。

本文认为应依据第三类边界条件, 即指钢件表面与周围气相发生物质传递过程, 此时炉气碳势高于表面碳势。由于气/固界面的存在, 表面碳势随时间延长逐渐接近而很难达到与炉气碳势相等的程度。气相碳势与表面碳势之差是碳从气相向固相表面传递的驱动力。因此碳从气相流入固相的通量(J_1)正比于炉气碳势(C_g)与表面碳势(C_s)之差:

$$J_1 = \beta(C_g - C_s) \quad (6)$$

式中 β 为碳从气相到固相的物质传递系数, 量纲为 cm/s

碳由表面向内部的扩散通量(J_2)符合 Fick 第一定律:

$$J_2 = -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (7)$$

D 为碳在钢中奥氏体内的扩散系数, J_1, J_2 的量纲均为 $\text{g/cm} \cdot \text{s}$

以上两个通量之差将使表面碳势发生变化:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_{x=0} = \frac{J_1 - J_2}{S_0} \quad (8)$$

S_0 为假设的气相与钢件间的界面厚度。

由(6)~(8)式可得外边界条件为:

$$\beta(C_g - C_s) + D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = S_0 \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_{x=0} \quad (9)$$

内边界条件是指渗层内部必有一个边界点 m ，当 $x=m$ 时有：

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=m} = 0 \quad (10)$$

$x=m$ 处即为物质传送等于零的界面。

根据以上分析，可列出渗碳层浓度分布的数学模型为以下联立方程组：

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \end{cases} \quad (11-1)$$

$$\beta(C_g - C_s) + D \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (11-2)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=m} = 0 \quad (11-3)$$

$$C|_{t=t_0} = f(x) \quad (11-4)$$

这一数学模型要求解出 $C(x, t)$ ，即求解一维半无限长非稳态扩散方程的问题。当 β ， C_g ， D ， $f(x)$ 为常数时，理论解较为方便。但实际渗碳过程中，这些值随时间而变，理论解几乎不可能。微机本身不能解决方程的求解，必须解决具体的运算方法后，才能运用微机进行计算。解上述方程组有效而实用的方法是运用有限差分法进行数值计算。

三、渗碳数学模型的数值解法

有限差分法的基本原理是用几个相邻点的函数值来表示函数 $f(x)$ 在某点上的导数，即用各种差分来近似代替扩散方程中的各阶导数。

用 Crank-Nicolson 有限差分模拟求解扩散方程组(11)式是随着高速数字计算机的应用而发展起来的实用方法，也称为网格法。

求解方程组(11)，即求出碳浓度随时间(t)和距离(x)的分布规律，即 $C(x, t)$ 。现将 $t-x$ 平面划成如图 1(a) 的网格，经 Δt 时间后的碳浓度分布如图 1(b) 所示。图中 Δx ， Δt

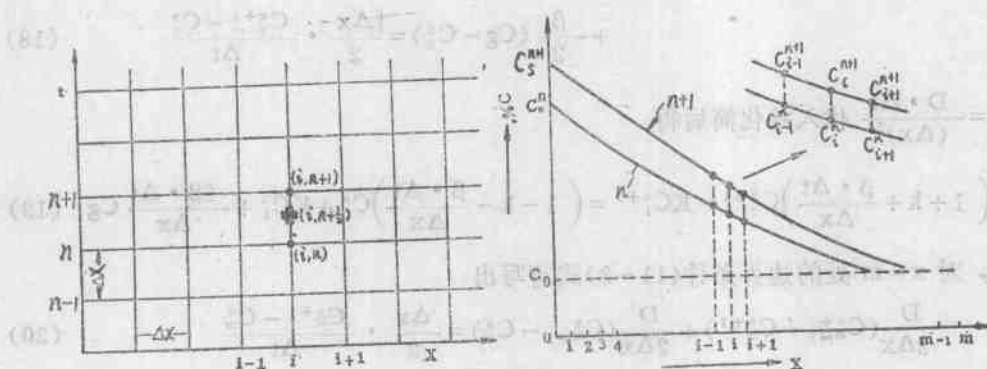


图 1 Crank-Nicolson 方程模拟的几何解释

分别为空间和时间步长。一组平行线的交点为结点或格点。为简便起见，将结点 (x_i, t_n) 记为 (i, n) ， $C(x, t)$ 在结点 (i, n) 上的函数值 $C(x_i, t_n)$ 记为 C_i^n 。将扩散方程 $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$

应用到结点 i 上时, 写成

$$(11) \quad \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{D}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^{n+1} + \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^n \right] \quad (12)$$

上式的物理意义可解释为: 结点 i 在时刻 n 到时刻 $n+1$ 的时间间隔内, 碳浓度的变化一半是由于结点 i 在时刻 n 由其邻近结点的影响, 另一半是由于结点 i 在时刻 $n+1$ 由其相邻结点的影响。 $\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_i^{n+\frac{1}{2}}$ 可用 $n+\frac{1}{2}$ 时刻的一阶中心差分来近似, 得

$$(12-11) \quad \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_i^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \quad (13)$$

$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^{n+1}$ 和 $\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^n$ 可用二阶中心差分来近似, 分别得

$$(14) \quad \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^{n+1} \approx \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

$$(15) \quad \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_i^n \approx \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

将(13)、(14)、(15)式代入(12)式, 得

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left[\frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right] \quad (16)$$

设 $K = \frac{D \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2}$, 此处对 Δx , Δt 的大小无严格的限制, 代入上式后得

$$-KC_{i-1}^{n+1} + 2(1+K)C_i^{n+1} - KC_{i+1}^{n+1} = KC_{i-1}^n + 2(1-K)C_i^n + KC_{i+1}^n \quad (17)$$

i 值取为 $1, 2, \dots, m-1$, 而 $i=0$ 和 $i=m$ 两个边界点除外。

在 $i=0$ 即 $x=0$ 的边界处, 应用质量守恒定律处理边界条件(11-2)式, 可写出

$$\begin{aligned} \frac{D}{2\Delta x} (C_1^{n+1} - C_0^{n+1}) + \frac{D}{2\Delta x} (C_1^n - C_0^n) + \frac{\beta}{2} (C_g - C_0^{n+1}) \\ + \frac{\beta}{2} (C_g - C_0^n) = \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{C_0^{n+1} - C_0^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (18)$$

将 $K = \frac{D \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2}$ 代入并化简后得

$$\left(1 + k + \frac{\beta \cdot \Delta t}{\Delta x} \right) C_0^{n+1} - KC_1^{n+1} = \left(1 - k - \frac{\beta \cdot \Delta t}{\Delta x} \right) C_0^n + KC_1^n + \frac{2\beta \cdot \Delta t}{\Delta x} C_g \quad (19)$$

同理, 对 $x=m$ 处的边界条件(11-3)式可写出

$$-\frac{D}{2\Delta x} (C_{m+1}^{n+1} - C_m^{n+1}) + \frac{D}{2\Delta x} (C_{m+1}^n - C_m^n) = \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{C_m^{n+1} - C_m^n}{\Delta t} \quad (20)$$

化简后得

$$-KC_{m-1}^{n+1} + (1+K)C_m^{n+1} = KC_{m-1}^n + (1-K)C_m^n \quad (21)$$

于是, 可将联立方程组(11)式归结为如下有限差分方程组:

$$\left(1+k+\frac{\beta\Delta t}{\Delta x}\right)C_0^{n+1}-KC_1^{n+1}=\left(1-k-\frac{\beta\Delta t}{\Delta x}\right)C_0^n+KC_1^n+\frac{2\beta\Delta t}{\Delta x}C_g \quad (i=0) \quad (22-1)$$

$$-KC_{i-1}^{n+1}+2(1+k)C_i^{n+1}-KC_{i+1}^{n+1}=KC_{i-1}^n+2(1-k)C_i^n+KC_{i+1}^n \quad (i=1, 2, \dots, m-1) \quad (22-2)$$

$$-KC_{m-1}^{n+1}+(1+k)C_m^{n+1}=KC_{m-1}^n+(1-k)C_m^n \quad (i=m) \quad (22-3)$$

$$[C_i]^0=f(x_i) \quad (i=0, 1, 2, \dots, m) \quad (22-4)$$

(22)式是共有(m+1)个方程组成的大型方程组,是电子计算机可以进行运算的用有限差分法表达的气体渗碳数学模型。式中 $[C_i]^0$ 表示初始碳浓度分布($C_0, C_1, \dots, C_m$)⁰, C_i^n 表示某一时刻($t=n \cdot \Delta t$)的碳浓度分布,这些都是已知的。通过解m+1个方程可求出经过 Δt 后下一个时刻($t+\Delta t$)或任意时刻($t=n \cdot \Delta t$)的碳浓度分布。

四、三对角矩阵求解大型差分方程组

为了利用计算机方便地求解(22)式的有限差分方程组,尚需寻求具体可行的计算途径。若将(22)式写成矩阵形式,得如下表达式:

$$= \begin{pmatrix} 1+K+\frac{\beta\Delta t}{\Delta x} & -K & & & \\ -K & 2(1+K) & -K & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ -K & 2(1+K) & -K & & \\ & -K & 1+K & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{m-1} \\ C_m \end{pmatrix}^{n+1} + \begin{pmatrix} 1-k-\frac{\beta\Delta t}{\Delta x} & +K & & & \\ +K & 2(1-k) & +K & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ +K & 2(1-k) & +K & & \\ & +K & 1+K & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{m-1} \\ C_m \end{pmatrix}^n + \begin{pmatrix} \frac{2\beta\Delta t}{\Delta x} C_g \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

上式中左边矩阵的特点是,矩阵仅在主对角线及其相邻的两条对角线上有非零的元素,其他元素都等于零,这种矩阵常称为三对角矩阵,矩阵的行数和列数相等,均等于m+1。可用“追赶法”由电子计算机快速求解。即已知某一时刻(n)的碳浓度分布($C_0, C_1, \dots, C_m$)ⁿ,可求得经过 Δt 时间后的(n+1)时刻的碳浓度分布($C_0, C_1, \dots, C_m$)ⁿ⁺¹。

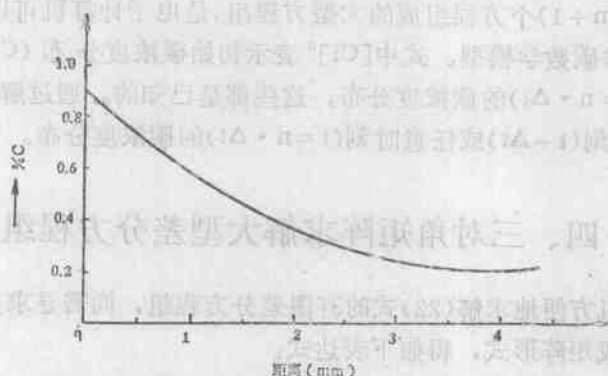
五、数学模型在气体渗碳中的应用

以上分析得出的数学模型,反映了气体渗碳过程中物质传递过程与扩散过程的完整数学描述,应用计算机高级语言编制成应用软件,可进行以下三方面的工作:

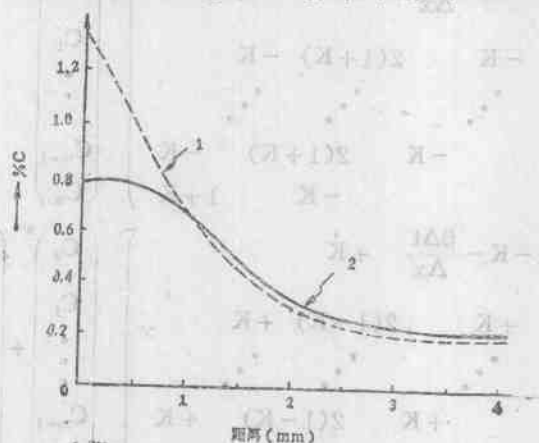
1. 渗碳工艺的计算机模拟计算;
2. 渗碳最优化工艺计算机辅助设计(CAD);

3. 渗碳过程的计算机实时控制。

例如, 20CrNiMo 钢 930℃ 气体渗碳的计算机模拟计算可得, 若渗碳过程中气相碳势始终保持在 0.9%C, 则经过 674 分钟渗碳后, 层深达到要求的 1.9mm, 见图 2(a), 若采用分段渗碳, 用 $C_g = 1.3\%$ 高碳势渗碳 374 分钟, 然后降至 $C_g = 0.75\%$ 继续渗碳 100 分钟, 则可达到同样的层深, 而渗碳总时间缩短了 29%, 而且获得的渗层碳浓度分布比前者好, 见图 2(b)。这一模拟计算为人们提供了节省能耗并提高渗层质量的优化渗碳工艺。



(a) $C_g = 0.90\%C$ 渗碳 674 分钟, 层深 1.9mm



(b) $C_g = 1.30\%C$ 渗碳 374 分钟, 为第一阶段(1),
然后 $C_g = 0.75\%C$ 100 分钟, 为第二阶段(2)

图 2 20CrNiMo 钢 930℃ 气体渗碳电子计算机模拟计算

根据多因素碳势控制的原理, 编制了计算机应用软件, 应用上海交通大学研制的 MCHP-Ⅱ型微机多功能热处理控制系统, 根据对炉气中 CO , CO_2 , CH_4 和炉温分区段控制的实时采样值计算炉气碳势。在应用软件支持下, 对炉气碳势进行 PID 控制并分区段控制炉温, 按上述渗碳层浓度分布数学模拟根据实时采样数据连续计算渗层碳浓度分布、工件表面碳浓度和渗碳层深度, 可在计算机 CRT 屏幕上显示和用行式打印机打印出上述测量和计算的结果。通过对 105 吨卧式气体渗碳炉进行部分改装和研制了渗碳剂调节单元, 利用整套微机控制气体渗碳设备, 采用甲醇-丙酮或甲醇-异丙醇或甲醇-煤油作渗碳剂进行生产

试验都达到了相近而满意的结果。炉气控制稳定性良好,炉温控制波动范围 $\pm 2^{\circ}\text{C}$,渗碳层深度实时计算值(屏幕显示值)与实测值偏差在 $\pm 0.1\text{mm}$ 之内,剥层分析试样的实测值与按数学模型的实时采样计算值分布曲线符合得很好。上述研究结果表明,将完整的微机系统根据数学模型控制大型井式气体渗碳炉的工艺过程已获得成功,可满足工业生产中提高渗碳件质量和节省能源等方面的要求。

参考文献

- [1] T.Ellis, et.al., JISI, 1963, Vol.201, No.7, P.582
- [2] R, Collin, et.al., JISI, 1969, Vol.207, No.8, P.1122
- [3] F.J.Harvey, Metall.Trans.A, 1978, Vol.9A, No.11, P.1507
- [4] D.C.Miller, Industrial Heating, 1982, No.8, P.37
- [5] R.Collin, et.al., JISI, 1972, Vol.210, No.10, P.785.
- [6] J.T.Goldstein, et.al., Metall, Trans.A, Vol, 9A, No.11, P.1515
- [7] J.Pavlossoglau, HTM, 1977, Vol.32.No.4, P.169; No.5, P.215
- [8] H.W.Walton, Heat Treatment of Metals, 1983, No.1, P.23
- [9] A.Knieren, H.Pfau, Heat Treatment of Metals, 1985, No.2, P.29
- [10] 潘健生等, 渗碳齿轮碳势精确控制——微机多因素碳势控制, 技术鉴定会资料, 1985, 12.
- [11] 顾百揆等, 金属热处理, 1985, No.10, P.9
- [12] B.Edenhofer, Heat Treatment of Metals, 1985, No.4, P.87

用微型计算机实现多因素碳势控制与碳浓度分布的控制

潘健生 司鹏程 张 研 钱初钧 杨宇丽

(上海交通大学)

邵学栋 夏隆申 杨召胜 钱燕云

(上海第一石油机械厂)

一、前 言

碳势控制技术已有卅多年历史,直至七十年代末尚存在一些技术关键有待解决。渗碳气体是多组份气体,在过去的技术条件下只能采用单因素控制,这就要求其他气体成份相对稳定^[1]。然而即使选用较好的渗碳剂,炉气成份在一定范围内变动事实上是不可避免的。因此,单因素碳势控制的精度难以提高。另一方面,气体渗碳是一个非平衡非稳态的物质传递过程,工件表面碳势不等于气相碳势,过去的碳势控制技术不能正确反映这种过程。

MCHP-Ⅲ型多功能微型计算机控制系统是为解决上述问题而设计的,已成功地实现了多因素碳势控制和按数学模型进行渗碳层碳浓度分布的控制,并具备许多其他优点,对于提高渗碳零件质量和节能都有重大作用。

二、多因素碳势精确控制

1. 渗碳体系的自由度

在实际生产中 CO 、 CH_4 、 H_2 、 CO_2 、 H_2O 、 O_2 等气体均参与渗碳-脱碳反应。在工程技术上首先要搞清楚究竟要控制几个因素才能达到碳势精确控制的目的。这就提出了体系自由度的概念^[2]。

在等温等压条件下,体系中所有物质的克分子分数(或分压,浓度)一经确定,体系的状态也就被确定,体系中有 L 种物质就有 L 个变量(分压或浓度)。

在气体渗碳体系中共有 P_{CO} 、 P_{CO_2} 、 P_{CH_4} 、 P_{H_2} 、 $P_{\text{H}_2\text{O}}$ 、 P_{O_2} 和 $[\%C]$ 七个变量
体系中每一种元素都有一个物料平衡方程,例如在渗碳体系中

$$n_C = n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CH}_4} + n_{[\text{C}]}$$

$$n_H = 2n_{\text{H}_2} + 2n_{\text{H}_2\text{O}} + 4n_{\text{CH}_4}$$

$$n_O = n_{\text{CO}} + 2n_{\text{CO}_2} + 2n_{\text{O}_2}$$

参加本文工作的还有:马小宝,徐秀娣,黄仲健,秦峰,张定国,包志康,陈敏之,章志英等同志

式中: n_i —— i 物质的克分子数或克原子数

此外, 当体系达到平衡时, 体系的自由能最小。

即: $\Delta F_{\text{体系}} = 0$

所以, 若体系中共有 M 种元素就有 $M+1$ 个约束条件。

体系自由度等于变量总数减去约束条件数:

$\therefore$ 体系自由度: $\phi = L - (M+1)$

在气体渗碳条件下: $\phi = 7 - (3+1) = 3$

计算结果说明: 六种气体分压和固体内碳浓度这七个变量中有三个是自变量, 因此, 其中三种气体的成分一经确定, 体系的状态也就确定, 所以如能同时控制三种气体的成份和温度, 就可以实现精确的碳势控制。

2. 实际生产条件下炉气碳势的计算

虽然有些文献认为, 渗碳反应是一个不平衡的反应, 不能按平衡条件进行碳势计算, 但是从大多数文献列举的大量试验数据和实际经验[1, 4, 5, 6]可以看出, 气体渗碳仍然在一定程度上受邦氏反应的平衡条件所制约。因此我们采用按邦氏反应的平衡条件进行计算并根据炉气成份和温度进行修正的方法计算炉气的碳势。

$$a_c = K_{PB} \frac{P_{CO}^2}{P_{CO_2}} \times \Delta$$

式中 K_{PB} 是邦氏反应 $2CO = CO_2 + C$ 的平衡常数

$$\lg K_{PB} = \frac{8978}{T} - 9.247$$

修正因子 Δ 反映了其他渗碳反应的作用以及实际情况与平衡的偏离, 根据体系自由度的概念, 修正因子 Δ 中应包括第三种气体的成份。运用 MCHP-III 型微型计算机控制系统的多路数据采集的功能, 对实际测定的挂片含量与气体温度等数据进行数理统计, 求出修正因子 Δ 的经验, 从而建立了多因素碳势计算公式^[7]

$$a_c = F(T, P_{CO}, P_{CO_2}, P_{CH_4}) \quad (1)$$

a_c 是碳活度, a_c 与碳浓度的关系如下:

$$a_c = f_c [\%c]$$

活度系数 f_c 本身也是 $[\%c]$ 的函数。对于碳素钢

$$\lg f_c = \frac{2300}{T} - 2.24 - \frac{181}{T} [\%c]$$

$$\therefore a_c = [\%c] \exp\left(\frac{2300}{T} - 2.24 - \frac{181}{T} [\%c]\right)$$

当 a_c 已知时, 上式只有 $[\%c]$ 一个变量。计算机可根据牛顿迭代法得出其数值解。计算结果就是气相碳势 C_g 。

活度系数 f_c 还与钢中合金元素有关。针对本厂产品可以用以下经验公式:

$$\begin{aligned} \lg f_c = & \left(0.228 - \frac{180}{T}\right) \%C \left(0.009 - \frac{31.4}{T}\right) \%Ni \\ & + \left(0.108 - \frac{175}{T}\right) \%Cr - \left(\frac{56}{T} - 0.015\right) \%Mo \end{aligned}$$

$$-2.12 + \frac{2215}{T}$$

3. 微型计算机多因素碳势控制的试验结果

试验是在生产条件下在 105 吨气体渗碳炉中进行, 成套装置的配置如图 1 所示。

CO、CO₂、CH₄ 红外仪以及热电偶的讯号连续输送到 MCHP-Ⅱ型系统的过程通道, 并由计算机根据(1)式计算出 a_c 值。计算机根据实测结果计算出的 a_c 值的高低作出调节决策, 并发出调节指令由过程通道带动调节单元调节渗碳剂的加入量, 实现炉气碳势的自动控制。

图 2 是炉内碳势的实测值(挂片定碳结果)与炉气碳势控制值 C_g (按公式(1)计算并由微机系统进行控制)之间的关系。图 2 中试验数据的回归线恰好是对角线, 从而证明了公式(1)的正确性。除了个别一二个数据点之外, 所有数据都落在上级下达的指标($\pm 0.07\% c$)的范围内。用数理统计方法计算的标准离差为 $\pm 0.039\% c$ 。

从图 2 还可以看出, 在微型计算机多因素碳势控制条件下, 甲醇-煤油, 甲醇-异丙醇和甲醇-丙酮三种不同的渗碳介质具有相同的碳势控制精度。

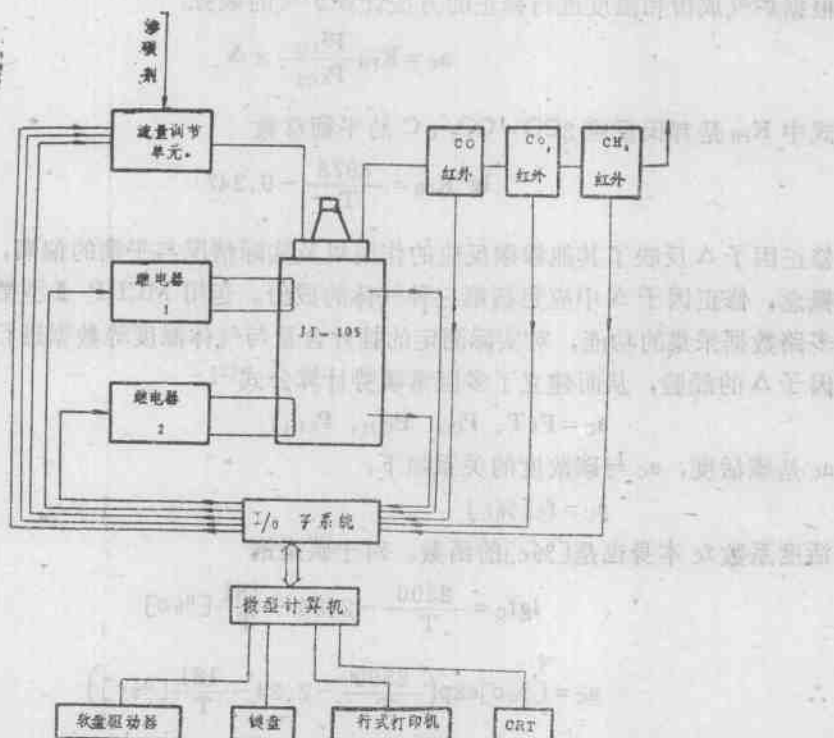
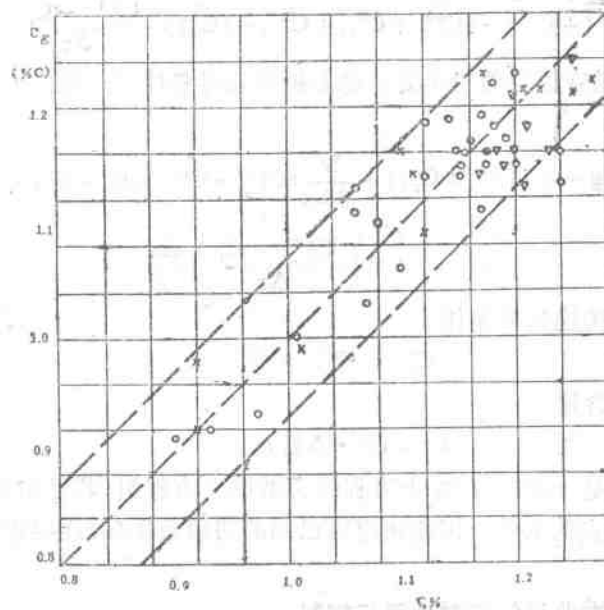


图 1 微型计算机碳势控制示意框图



挂片含碳量 %c
 x — 甲醇-丙酮 o — 甲醇-异丙醇 v — 甲醇-煤油
 图 2 炉内碳势实测值(挂片含碳量)与控制值 C_g 之间的关系

三、渗层浓度分布的实时计算与控制

1. 气体渗碳物质传递的数学模型

气体渗碳物质传递过程如图 3 所示:

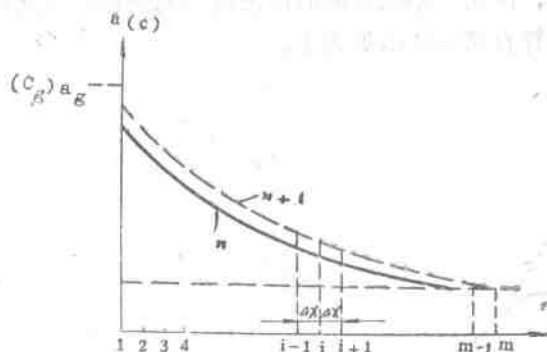


图 3 气体渗碳物质传递过程及其有限差分方程计算的结点划分

用菲克第二定律描述渗层浓度分布

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial \tau} \quad (2)$$

(2)式的中间加数有限差近似公式如下^[10]:

$$\frac{D}{2(\Delta x)^2} (C_{i+1}^{n+1} + C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^n + C_{i-1}^n - 2C_i^n) = \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta \tau} \quad (3)$$

本文采用根据质量守恒原理得出的非稳态扩散边界条件^[9], 得出 $i=1$ 结点的有限差分式如下:

$$\begin{aligned} \beta(C_g - \frac{1}{2}(C_1^{n+1} + C_1^n)) + \frac{D}{2\Delta x}(C_2^{n+1} - C_1^{n+1} + C_2^n - C_1^n) \\ = \left(\frac{C_1^{n+1} - C_1^n}{\Delta \tau} \right) \frac{\Delta x}{2} \end{aligned} \quad (4)$$

在结点 m 处是零物质传递边界条件

$$C_{m+1}^{n+1} = C_{m-1}^{n+1} = C^0 \quad (5)$$

C^0 为钢中原始碳含量

初始条件:

$$C_i^0 = f(i \cdot \Delta \%) \quad (6)$$

方程式(3)(4)(5)是一组共有 m 个方程的大型联立方程组, 若已知 n 时刻各点浓度, 即可计算出 $n+1$ 时刻各点的浓度。因此可应用已知的初始条件(6)逐层求出各时间层次的浓度分布。

2. 渗层碳浓度分布曲线的实时计算与控制

MCHP-Ⅲ型微电脑系统能按上述数学模型实时计算渗层碳浓度分布。方程(4)中的 C_g 值是按 T 、 P_{CO} 、 P_{CO_2} 、 P_{CH_4} 实时采样值计算、将实时采样的温度数据代入 $D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$ 中就可以计算出扩散系数。我们采用的时间间隔 $\Delta \tau$ 为 11-16 秒, 在整个渗碳与扩散过程中不断进行计算, 并用直观的图象显示在 CRT 屏幕上。

渗层碳浓度分布的实时控制, 在渗碳周期的大部份时间内表面碳势控制在较高的数值, 有利于加快碳向工件内部扩散。而在渗碳的最后阶段降低气相碳势, 使表面含碳量符合零件设计的要求, 并获得良好的浓度分布曲线(图 4), 考虑到降温阶段渗层内浓度分布将继续发生微小的变化, 因此本系统在降温阶段继续对炉温, 气相碳势进行监测, 并继续进行渗层浓度分布的计算直至工件出炉为止。

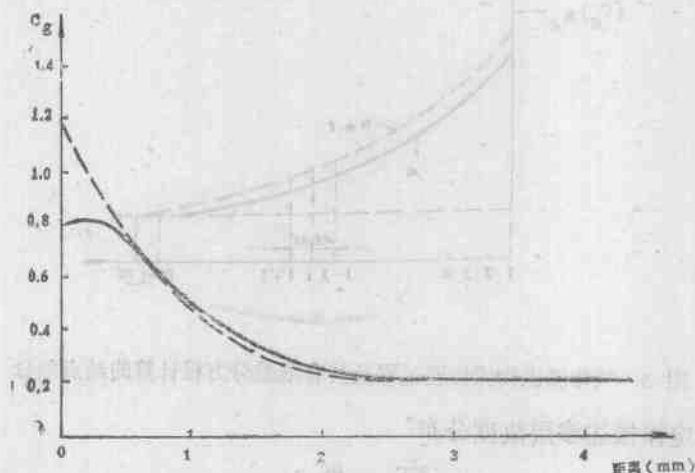


图 4 碳浓度分布曲线的电子计算机计算结果 $T = 930^\circ\text{C}$ 渗碳期

$C_g = 1.2\% \text{C}$ 10.5 小时, 扩散期 $C_g = 0.8\% \text{C}$ 1.5 小时

3. 深层渗碳浓度及分布微型计算机控制的试验结果

某厂的大模数重载齿轮要求渗碳层深度为3.5~4.0毫米,表面含碳量0.75~0.85% C 。要求表层碳浓度分布平坦,应用 MCHP-Ⅲ型微机控制系统根据数学模型进行控制。工艺过程如图(5)所示。

按图(6)20CrNiMo钢渗层渗碳工艺规范(甲醇+异丙醇),由电子计算机根据过程实际进行情况用扩散数学模型计算的渗碳浓度分布曲线及剥层分析的实测值见图(6),二者吻合得很好。渗层总深度约4.0mm,表面至1.3mm处的含碳量在0.8%~0.75% C 之间。获得了令人满意的浓度分布。由此可见用 MCHP-Ⅲ型按渗碳扩散数学模型进行渗层浓度分布控制已经达到了实用化阶段。

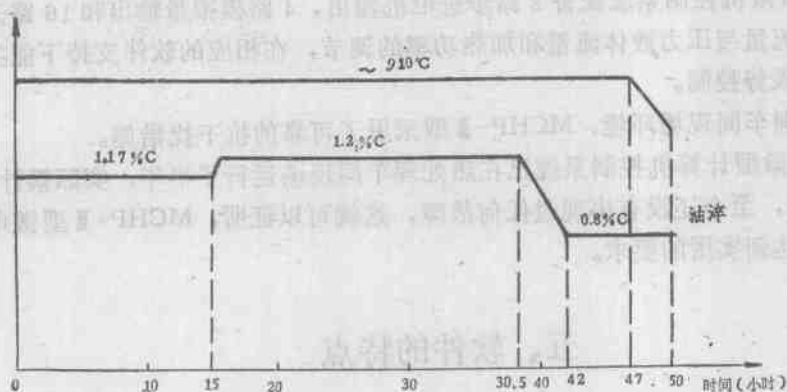


图 5 20CrNiMo 钢深层渗碳工艺规程(甲醇+异丙醇)

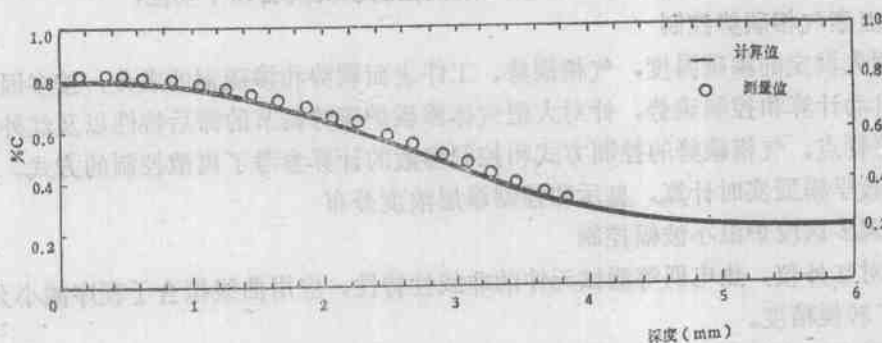


图 6 20CrNiMo 钢微型计算机控制深层渗碳渗层浓度分布

四、MCHP-III 型微机控制系统的功能

MCHP-Ⅲ型多功能微型计算机控制系统包括过程通道 I/O 子系统,紫金Ⅱ型微型计算机、CRT 显示器、宽行打印机和 2 台软盘驱动器。

主机内存容量 64K, 可以适应数学模型在线控制, 采样运算, 数据处理, 图象显示等多种需要。

由于整个应用软件已接近 48k, EPROM 的容量远远不能满足需要, 因此本系统配置