

杨 全
张 真 编著

金属凝固与 铸造过程 数值模拟



浙江大学出版社

内容简介

本书为论述金属凝固与铸造过程数值模拟的专著。

全书共分六章,分别介绍金属凝固与铸造过程的传热学原理,非稳态导热微分方程的有限差分解法及有限元解法,与铸型材料、充型过程、偏析、收缩、热裂、微观组织与机械性能等有关的物理模型及其模拟方法,模拟过程的简化与优化等内容。书后并有附录,介绍矩阵运算的基本概念及数值模拟中涉及的各种参数与热物性。

本书可作为高等院校金属材料、铸造、热加工等专业本科生与研究生的教材或教学参考书,也可供相应专业领域工程技术人员参考。

金属凝固与铸造过程数值模拟

杨全 张真 编著

责任编辑 龚建勋

* * *

浙江大学出版社出版

(杭州玉古路 20 号 邮政编码 310027)

浙江大学出版社电脑排版中心排版

杭州金融管理干部学院印刷厂印刷

浙江省新华书店发行

* * * * *

860×1188 32 开 14.5 印张 264 千字

1996 年 9 月第 1 版 1996 年 9 月第 1 次印刷

印数:0001—1000

ISBN 7-308-01820-2/TP·154 定价:12.00 元

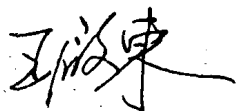
序 言

金属的凝固与铸造过程是决定其后产品质量的首要环节，一直受到金属材料与材料工程领域内广大科学研究与工程技术人员的密切关注和深入研究。但由于过程复杂，影响因素众多，迄今对其中许多现象及其机理仍然众说纷纭，尚未对其客观规律取得广泛一致的共识。近年来迅速发展并日益得到广泛应用的计算机数值模拟技术已在许多工程技术领域取得令人瞩目的技术经济效果。同样，在金属凝固与铸造领域，它也已日益显示其巨大的优越性，在揭示凝固过程规律、预测与防止多种铸造缺陷、优化铸造工艺、提高产品质量、节约生产成本等方面具有其他研究试验方法难以匹敌的独特优点。因而，随着计算机应用的日趋广泛和普及，使数值模拟技术为更多的专业科学研究和工程技术人员所了解、熟悉与运用，是很有意义的。本书就是在这方面的一个有益的尝试。

金属的凝固与铸造是一个从高温开始并经历温度激烈变化的过程，又是一个涉及液、固相变的过程，显然，受传热学和凝固理论基本原理的支配。数值模拟以此作为基本出发点，当属不言而喻，本书在这方面的论述也较为系统和详尽。但是，支配整个过程的除上述能量守恒与传递方程外，还应包括质量与动量的守恒与传递过程。就此而论，本书虽也综合了近年来的研究成果，有所涉及，但只能说是初步的，有待于今后不断地深入与拓展。

金属的凝固与铸造过程从微观与宏观尺度去研究考察的任务，常常分属于同一材料学科不同方向的科学研究人员和工程技

术人员。在宏观尺度上以导热微分方程为基础的温度场计算已逐渐成为常规的基础模拟技术,但在微观尺度上对形核与晶体生长过程的模拟则相对来说还研究得不够充分。此外,计算机数值模拟其实质是计算数学、计算机技术与专业技术互相结合的产物,它的发展显然需要这些领域中的科学技术工作者共同努力。可以预期,当以上不同领域或方向的研究人员与专业技术人员能在明确的目标下各自努力而又携手合作时,金属凝固与铸造数值模拟的研究与应用就将更为健康与坚实地向前发展,从而不仅对本领域的科学研究水平,亦将对实际生产水平起更大的促进作用。



1996年8月

前 言

金属的凝固与铸造过程是决定其后产品质量的关键性过程，长期以来一直受到人们关注与广泛研究。由于影响凝固过程的因素很多，尤其因为，这是一个涉及高温及金属与铸型材料相互作用的复杂过程，难于控制和直接观测，因而形成了众多的研究技术，稍加归纳就可达十余种之多。它们之中大部分的方法均以金属学原理及凝固理论为依据，围绕金属在凝固与铸造过程中其微观组织形成与发展的规律，由最终的组织去反推凝固的进程及其特征。在模拟研究领域内曾取得过辉煌成绩的是使用有机材料模拟金属的凝固过程，克服了金属的不透明性及其高温过程所带来的障碍，这也为凝固理论的发展作出了重大贡献。至于其他模拟方法，均因不同程度的局限性而未能得到广泛应用。

近年来，随着计算机技术的迅猛发展而出现的计算机数值模拟则开创了金属凝固与铸造过程研究的新局面，它是基于凝固与铸造过程的传热学原理，侧重研究金属从液态到固态，及在固态下组织转变时的传热学特征，研究凝固进程中金属或铸件断面上的温度场分布及其演变规律，并进而将其与伴随着凝固进程所发生的一系列物理或物理化学现象相联系，为制订合理的工艺设计、指导生产实践、保证产品质量提供可靠依据。

金属或铸件凝固过程中的温度场及其变化规律，也可通过实验研究的途径去获得，但由于客观条件的限制，往往难于准确与完整，因而近年来，通过数学方法以达此目的的研究越来越多。

在数学方法中又可分为解析法与数值法两种。解析法依据的是经典的传热学原理及严格的数学演绎, 由于铸造过程的复杂性, 通常只能解决一些简单形状如平板、圆柱或球体等的温度场计算, 对比较复杂的形状或环境条件则束手无策。数值法以近年来迅速发展的数值计算方法与计算机技术为依托, 模拟金属或铸件凝固过程中的温度场分布及其变化规律。

随着对数值模拟过程研究的不断深入, 现在利用计算机不仅可获得凝固过程不同时刻的温度场分布, 还可能揭示液体金属的充填过程、凝固过程中的固相形成规律及应力场分布, 以及由此而形成的微观组织及相应的机械性能、宏观与微观缺陷等等, 在优化铸造过程, 保证铸件质量, 提高经济效益方面显示出极大优越性。作为研究上述各种现象与过程的基础, 则是对凝固过程中温度场的模拟。

本书在就凝固过程数值模拟作简要的概述后, 重点介绍有关传导传热及导热微分方程的基本原理; 不稳定导热方程求解的有限差分方法与有限元方法; 各种定解条件的讨论及其处理; 围绕铸造过程不同内容的数值模拟研究, 例如铸型材料的热物性、铸造中金属液的流动与充型过程; 伴随凝固过程而产生的收缩、偏析、裂纹等缺陷的判断与预测; 凝固金属的微观组织及其性能等内容。最后针对数值模拟方法的改进与简化进行一些讨论。书末还有若干附录, 除简要介绍了矩阵代数的基本概念外, 主要是提供数值模拟计算中有用的各种材料热物性数据及有关的参数、函数与单位换算, 相信对读者有一定帮助。

本书在编写过程中力求内容精炼, 讲清基本概念, 同时也注意到涉及各种不同问题时的基本思路与分析方法。它可作为铸造、热加工、金属材料等专业本科生与研究生的教材或教学参考资料, 也可供在上述领域工作的科技人员参考。

由于作者水平所限, 书中缺点错误在所难免, 欢迎批评指

正。对书中所引用的各种资料，愿借此机会在这里向原作者表示深切的谢意。谢学正同志在整理文稿过程中给予多方协助，对他们的辛勤劳动作者也一并在此表示感谢。

1997年浙江大学将庆祝她的百年华诞，作者躬逢其盛，拙作也得以列入学校的百年校庆出版计划，这使我们深感欣喜和荣幸，就以此书作为献给这个节日的一份薄礼吧！

编著者

1996年春于求是园

目 录

第一章 绪 论	1
第一节 金属凝固与铸造领域数值模拟研究概况.....	1
第二节 数值模拟的任务与内容.....	3
1.2.1 数值模拟的任务与内容	3
1.2.2 数值计算方法与计算格式	5
第三节 发展与展望.....	8
1.3.1 完整的定量描述与统一模型	8
1.3.2 存在问题与今后发展.....	13
第二章 导热过程的传热学原理与导热微分方程	15
第一节 导热过程与傅立叶定律	16
2.1.1 温度场、等温面、温度梯度和热流.....	16
2.1.2 傅立叶定律.....	19
第二节 傅立叶导热微分方程	21
2.2.1 傅立叶导热微分方程.....	21
2.2.2 不同条件与不同坐标系下的傅立叶方程.....	23
第三节 边值条件	26
2.3.1 概述.....	26
2.3.2 边界条件.....	27
第四节 简化假设与实际问题的模型化	31
2.4.1 概述.....	31
2.4.2 几何条件的处理.....	33

2.4.3	物性条件的处理	34
2.4.4	时间条件的处理	36
2.4.5	环境条件的处理	37
第五节 凝固潜热的处理		38
2.5.1	概述	38
2.5.2	温度回升法(或称温度补偿法)	40
2.5.3	有效比热法(或称当量比热法或等价比热法)	42
2.5.4	热焓法	44
2.5.5	潜热释放模式的影响	46
第三章 求解导热问题的有限差分法		49
第一节 概述		49
第二节 差分格式		52
3.2.1	概述	52
3.2.2	显式差分格式	56
3.2.3	完全隐式差分格式	59
3.2.4	六点差分格式(C-N格式)	64
3.2.5	带权差分格式	66
第三节 不同差分格式的比较		67
3.3.1	概述	67
3.3.2	差分格式的稳定性	68
3.3.3	差分格式的精度	71
第四节 边界条件的差分化及其处理		74
3.4.1	给定温度的边界条件	75
3.4.2	对流换热的边界条件	78
3.4.3	其他边界条件	81
第五节 交替方向隐式法		83
第六节 直接差分法		86
3.6.1	内节点法	86

3.6.2 外节点法	89
第四章 求解导热问题的有限元法	92
第一节 有限元法的基本概念	93
4.1.1 泛函与变分	93
4.1.2 一个运算实例	97
4.1.3 不同类型温度场的泛函	102
4.1.4 温度插值函数	106
第二节 网格剖分	111
4.2.1 概述	111
4.2.2 有限元法网格的剖分与编号	112
4.2.3 网格自动生成及其计算机程序	114
第三节 单元分析	116
4.3.1 二维稳态温度场的单元分析	117
4.3.2 二维非稳态温度场的单元分析	122
第四节 总体合成	127
4.4.1 二维稳态温度场的总体合成	128
4.4.2 二维非稳态温度场的总体合成	132
第五节 加权余量法	137
4.5.1 概述	137
4.5.2 导热问题的伽辽金法有限元方程	138
第五章 铸造过程数值模拟各论	144
第一节 砂型的热物理性能	145
5.1.1 概述	145
5.1.2 浇注法测定热物性	147
5.1.3 综合法测定热物性	157
第二节 金属液的流动与充型过程	162
5.2.1 概述	162
5.2.2 充型过程的流动解析	164

5.2.3	同时考虑传热过程的流动解析	170
第三节	铸件的收缩缺陷与补缩	172
5.3.1	概述	172
5.3.2	固相率与温度的关系	173
5.3.3	收缩缺陷的预测及其判据	176
第四节	凝固过程中的偏析	193
5.4.1	概述	193
5.4.2	预测宏观偏析的方法	197
第五节	铸件热裂的数值模拟	200
5.5.1	概述	200
5.5.2	热裂的预测及其判据	202
第六节	微观组织与机械性能	206
5.6.1	微观组织的形成及其模拟	206
5.6.2	形核过程	207
5.6.3	共晶型微观组织的生长	210
5.6.4	枝晶型微观组织的生长	213
5.6.5	微观组织与机械性能的关系	217
第七节	凝固过程的微-宏观统一模型	220
5.7.1	概述	220
5.7.2	等轴凝固的 TDR 微-宏观统一模型	221
5.7.3	LSXW 微-宏观耦合模型	231
5.7.4	统一模型中的固相率	236
第六章	数值模拟方法的若干改进与简化	240
第一节	概述	240
第二节	计算误差的控制与网格剖分	241
6.2.1	自适应网格剖分的理论	241
6.2.2	自适应网格的剖分方法	243
6.2.3	基于 Chvorinov 定律的网格剖分原则	244

第三节 三维问题的简化计算方法	246
6.3.1 等值模数法与修正热含量法	247
6.3.2 当量潜热法	249
6.3.3 修正热物性法	251
第四节 减少铸型部位计算时间或不计铸型的 计算方法	252
6.4.1 热流束法	252
6.4.2 N 方程法	257
6.4.3 边界函数法(q 法)	258
6.4.4 FEM—NFEIM 法	263
附 录	
附录一 矩阵代数基础知识	270
附录二 误差函数表	287
附录三 若干常用单位及其换算表	289
附录四 关于金属材料的热物性值	291
附录五 关于铸型材料的热物性值	302
附录六 与传热及流动有关的一些参数	309
参考文献	312

第一章 绪 论

第一节 金属凝固与铸造领域 数值模拟研究概况

以导热偏微分方程为基础的凝固与铸造过程数值模拟研究始于60年代,并逐步的在二个方面不断取得进展,一方面是在专业技术领域内,初期的数值模拟限于传热过程,且常常须要作一系列的假设以简化模拟条件,例如①金属液瞬间充满铸型;②充型后无任何液相的自然或强制流动;③各种材料的热物性均为常数;④金属与铸型紧密接触,其间无气隙与热阻……等等。即使如此,许多不同条件下的温度场模拟计算,结果还是与实际测定基本一致,为数值模拟的不断发展展示了良好的前景。在此基础上的不断改进导致数值模拟更真实地反映实际铸造过程,同时也暴露了其中存在的诸多薄弱环节,例如大量研究的结果,发现金属与铸型的热物理性能对模拟精度影响很大,由此导致了对材料热物性的专题研究。研究还发现,探索金属与铸型之间气隙形成

的规律,适当处理气体中的热阻或传热系数也非常重要,这也导致了以后在这方面的专题研究。

另一方面在数值计算方法上也得到不断的扩展与改进。初期的数值模拟主要使用有限差分法,以后陆续在有限差分法的基础上发展了交替方向隐式法及直接差分法,后者直接从单元体能量守恒的物理概念出发来建立计算格式,在网格剖分上还兼有有限元法的优点,能较好地处理复杂的几何形状。接着,又陆续引入了边界元法和有限元法用于凝固过程的数值模拟。各种数值计算方法具有共同的特点,即它们均能用于求解支配铸造过程的基本导热方程,揭示凝固过程中温度非稳态分布的基本规律。同时它们又围绕求解域的离散及求不同类型基本方程显示出各自的不同特点。因而,须针对凝固与铸造过程的不同侧面,要求的模拟精度以及计算时间与计算机容量等不同因素选用合适的数值计算方法。

随着数值模拟技术的广泛应用与不断深入,人们逐渐认识到,仅仅以导热方程作为凝固与铸造过程的基本方程是远远不够的,因而液相流动问题越来越受到重视。当人们把注意力集中于微观组织的形成时,关于形核、晶粒生长及溶质扩散的各种机理就被逐渐地引入凝固模型,当人们着眼于微观组织与机械性能的联系及铸件成形后的力学行为时,关于金属与铸型高温力学行为的研究及相应的应力-应变规律也慢慢被引入模型,从而使我们对支配凝固与铸造过程的各种现象有了更为完整和规律性的认识,对如何建立统一的微-宏观模型以便把这个过程的微观规律与宏观规律结合起来作全面的评价,展示了良好的前景。

随着计算机技术与模拟技术的发展,一些具有较强处理能力与相对成熟的商业化通用软件也陆续问世,其中大部分是在美国开发的。早在80年代伊始,有人就对这类软件作了测试与比较,可供测试的即已达20余种。这种状况又反过来为数值模拟研究的进一步深入提供了有利条件。

国内在这方面虽起步较迟,约始于70年代末,但发展也十分迅速。以沈阳铸造研究所、大连理工大学、哈尔滨工业大学等院所为代表,模拟研究的对象十分广泛,内容不断深入,并相应开发了一系列的应用软件。但迄今通用性较强的商业化软件包仍较缺乏,对进一步推动此项研究的广泛与深入开展十分不利。

凝固与铸造过程的数值模拟为铸造工艺的计算机辅助设计提供了基础,它与几何模拟、数据库或专家系统等技术相结合,即可形成完整的铸造工艺CAD系统或软件包,从而成为推动我国铸造工业迅速发展的强大动力。

第二节 数值模拟的任务与内容

1.2.1 数值模拟的任务与内容

作为铸造技术的核心环节,金属的浇注与凝固过程包含着各种传递现象,如热量、质量及动量的传递,以及其他复杂过程。所有这些过程原则上都既可以从微观的原子尺度,也可从连续介质的宏观尺度上去描述。数值模拟的任务即在于建立正确的数学模型,通过恰当的数值方法,利用计算机来求解这些模型,从而得到能反映过程规律、指导实践的结果。这一过程所包含的各种环节可以以图1.1来示意说明。

在此流程图中,中心环节无疑是ⅢA,即求解各种支配凝固与铸造过程的基本方程,并与各类判据函数相结合,预测过程中的各种现象或优化工艺设计。

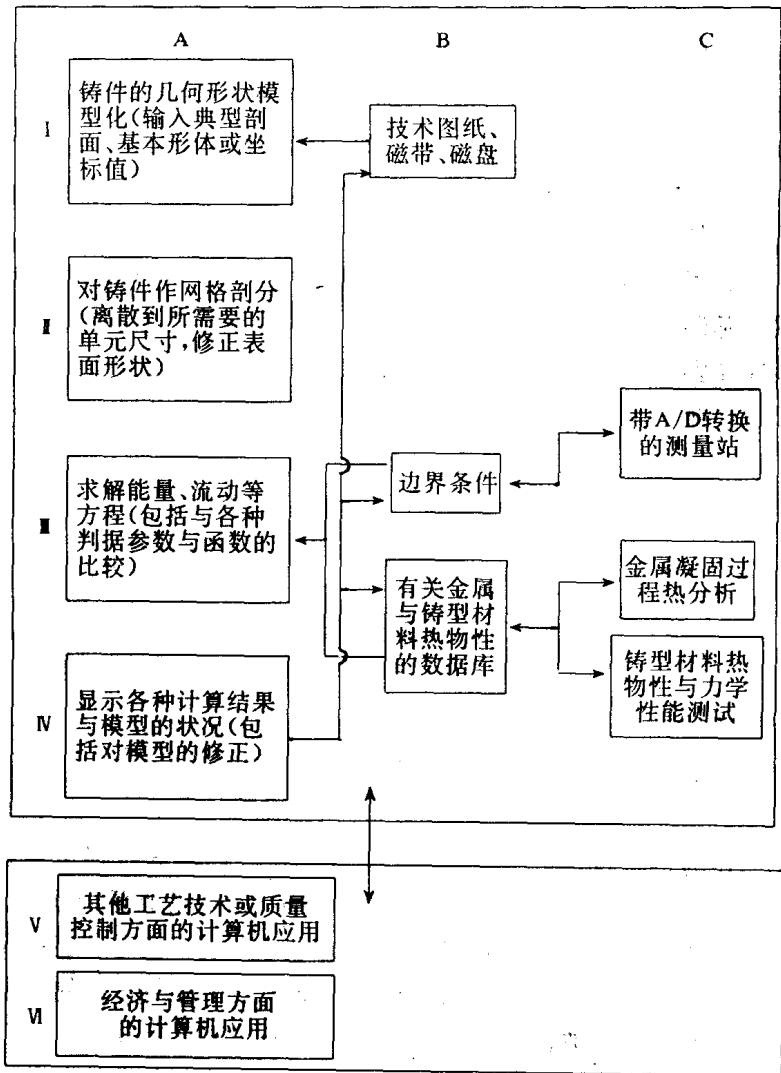


图1.1 凝固与铸造过程数值模拟的内容及其相互关系流程图

但要达到这个目的并不容易。求解基本方程须有适当的边界条件配合，方能得到针对某个具体问题或系统的确定解，而金属

的铸造及随后的冷却与凝固是一个相当复杂的过程，精确的边界条件很难定义。这至少与以下一些因素有关：首先，金属的流动情况极为复杂，且与时间有关。其次，复杂的铸件形状及多元材料系统使热流情况也变得极为复杂。再次，金属与铸型的热物性都是温度的函数，这种函数关系目前尚有很多不甚了了。最后，在凝固的金属外壳与铸型之间可能产生气隙，这将显著影响传热及随后的凝固过程，但是气隙何时形成，在哪里形成，程度如何，怎样将它纳入计算过程中去，这些都是问题。

从图 1.1 中也可看出，实现成功的模拟还有待 III B 以至 III C 中各种环节的配合。这也就是为金属/铸型系统提供各种工艺条件下精确的边界条件，测定金属与铸型的热物性及其随温度或其他条件变化的规律。这是一项基础性工作，与方兴未艾的数值模拟研究本身相比，仍是薄弱环节。

环节 I A 是对系统作数值计算的必要条件。对铸件或铸型进行离散化或网格剖分的方法与所使用的数值方法及计算格式有关，有时也与 I A 中几何模拟一起作为整个软件的前置处理部分。下面还会谈到，不同的网格剖分方法涉及对物体表面形状的近似处理或修正，从而会对模拟结果的精度带来影响。除了对空间领域的离散外，对时间领域同样也要作离散处理。

环节 IV A 是整个软件系统的后处理部分，主要是输出或显示数值模拟的结果。随着计算机软硬件技术的发展，包括彩色显示在内的各种功能日益增强，成功的后处理程序应能结合模拟对象选用最能揭示过程规律的模拟结果输出或显示方式。

1.2.2 数值计算方法与计算格式

金属的凝固与铸造过程无论从传热，传质或其他传递过程来看，都是非稳态过程。描述这类过程的偏微分方程绝大部分都无