

ZHUZAO GUOCHENG
MONI FANGZHEN
JI GONGYI SHEJI

铸造过程 模拟仿真及工艺设计

毛红奎 徐宏 著



国防工业出版社
National Defense Industry Press

铸造过程模拟仿真及 工艺设计

毛红奎 徐宏 著

国防工业出版社

·北京·

内 容 简 介

随着计算机技术的发展,计算材料科学已成为一门新兴的交叉学科。除实验和理论方法外,计算材料科学是解决材料科学中实际问题的第三大重要研究方法。

本书主要介绍铸造过程的计算机模拟技术,全书共分6章,主要内容包括:绪论、铸造充型过程数值模拟技术、铸造凝固过程数值模拟技术、铸造模拟过程前后处理技术、基于CAE的铸造工艺CAPP技术、铸造专家系统。本书除了介绍已有铸造过程数值模拟常用方法之外,还介绍了本课题组的一些研究成果,主要包括:基于边界切网格的铸造充型/凝固过程数值模拟技术,铸造CAE的前后处理技术、基于铸造CAE的铸造工艺CAPP及缺陷专家系统等内容。

本书可作为铸造领域科研人员在科研及铸造生产中的技术参考资料,也可作为材料加工工程专业研究生及高年级本科生的教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

铸造过程模拟仿真及工艺设计/毛红奎,徐宏著. —北京:
国防工业出版社,2011.11
ISBN 978-7-118-07474-1

I. ①铸... II. ①毛...②徐... III. ①铸造-过程-
数值模拟②铸造-工艺设计 IV. ①TG2

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第084345号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

北京奥鑫印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 14 $\frac{1}{4}$ 字数 330 千字

2011年11月第1版第1次印刷 印数 1—3000册 定价 45.00元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)68428422

发行邮购:(010)68414474

发行传真:(010)68411535

发行业务:(010)68472764

前 言

铸造过程数值模拟技术(CAE)经过了四十多年的发展历程,从简单模拟到复杂模拟、从温度场模拟到流动场、应力场模拟,从宏观模拟到微观模拟,从普通重力铸造过程模拟到低压铸造过程、压铸过程等特种铸造过程模拟,从实验室模拟研究到工业化模拟的实际应用。特别是近些年来,数值模拟技术在人类社会的各个领域得到了广泛的应用,已有众多的企业纷纷采用数值模拟技术,应用于实际生产。目前,欧、美、日等工业发达国家的铸造企业普遍应用了模拟技术,特别是汽车铸件生产商几乎全部装备了仿真系统,成为确定铸造工艺的固定环节和必备工具。根据美国科学研究院工程技术委员会的测算,模拟仿真可提高产品质量5倍~15倍,增加材料出品率25%,降低工程技术成本13%~30%,降低人工成本5%~20%,提高投入设备利用率30%~60%,缩短产品设计和试制周期30%~60%等。

目前,国内铸造过程数值模拟技术的研究几乎涉及到铸件的整个生产过程,从事该项技术研究及应用的高校、研究所和公司很多,其中大多数是偏向于应用的。在很多高校,铸造过程数值模拟技术也已经成为铸造专业的本科生、研究生教学的一门重要课程。随着铸造过程数值模拟技术在企业中的进一步推广,企业技术人员对该项技术也会逐渐掌握。

中北大学山西省铸造新工艺工程技术研究中心长期从事铸造领域的计算机应用研究,特别是对铸造过程的宏微观模拟仿真研究,取得了一系列成果。先后完成了国防科工委基础科研项目、总装备部预先研究项目、山西省科技攻关项目、山西省基金等有关铸造工程的计算机宏观和微观仿真研究。

本书作者是该研究中心的科研人员,多年来从事铸造过程数值模拟技术研究工作,本书内容是作者长期工作的积累,对深入研究该领域的科研人员有一定的指导作用。本书内容与同类书相比,体现了本中心的最新研究成果,主要包括切网格技术在铸造充型/凝固过程数值模拟中的应用,基于铸造CAE进行铸造工艺设计的CAD设计及应用,OpenGL技术及VTK技术在后处理显示软件开发中的应用,缺陷专家系统等。本书可为相关研究、技术人员提供入门学习和参考。

本书第1章,第2章第1~8节、第3章第4~5节,第5章第1节~第3节由中北大学毛红奎撰写,第2章第9节,第3章第1、2、3、6节,第4章,第5章第5节由中北大学徐宏撰写,第5章第4节,第6章由山西青年管理干部学院郝建华撰写,书稿得到中北大学铸造中心党惊知教授、张国伟副教授以及北京北方恒利科技发展有限公司朱江、宋彬等技术开发人员的大力支持与帮助,在此深表感谢。

作者

2011年5月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 铸造过程数值模拟的内涵	1
1.2 铸造过程数值模拟的主要方法	2
1.2.1 数值离散方法	2
1.2.2 凝固过程数值计算方法	4
1.2.3 铸件充型过程数值模拟方法	4
1.3 网格生成技术	7
1.3.1 结构化网格	7
1.3.2 非结构化网格	8
1.3.3 用于铸造模拟的网格生成技术	8
1.4 浸入边界法及其应用	9
1.5 铸造工艺 CAD 技术的发展	10
1.6 铸造过程模拟计算结果的验证方法	11
1.7 铸造过程数值模拟技术存在的问题及发展方向	12
第 2 章 铸造充型过程数值模拟技术	14
2.1 铸造充型过程的数学模型	14
2.2 紊流模型	16
2.2.1 $k-\varepsilon$ 双方程紊流模型	17
2.2.2 代数应力模型	17
2.2.3 低雷诺系数紊流模型和壁面函数法	19
2.3 计算模型的离散化	21
2.3.1 迎风格式	21
2.3.2 中心差分格式	22
2.3.3 基于正交网格的离散化格式	22
2.3.4 基于 Cut cell 网格的方程离散	29
2.4 N-S 方程的求解方法	36
2.4.1 SIMPLE 算法	36
2.4.2 共轭梯度法	38
2.4.3 SOLA-VOF 法	39
2.4.4 近似盒迭代法 (ABX)	41
2.5 自由表面的处理	47

2.6	其他问题的处理	50
2.6.1	边界条件	50
2.6.2	自由表面压力边界条件	52
2.6.3	数值稳定性条件	52
2.6.4	对流量的修正	53
2.6.5	潜热处理	53
2.7	充型过程流场算法的改进	55
2.7.1	针对界面模糊现象的改进	55
2.7.2	流体碰壁时体积函数的分配	57
2.7.3	提高计算效率的方法	58
2.8	流场模拟试验验证	60
2.8.1	模拟软件验证	60
2.8.2	标准试验的模拟(水力模拟试验)	63
2.8.3	实际浇注过程与模拟计算的对比	70
2.8.4	边界切网格模拟计算与水力试验结果的对比	75
2.8.5	边界切网格计算结果与锯齿形网格的计算结果对比	78
2.9	铸造充型过程数值模拟技术应用	82
2.9.1	重力充型过程数值模拟	82
2.9.2	低压铸造充型过程数值模拟	85
2.9.3	压力铸造充型过程数值模拟	86
2.9.4	精密铸造充型过程数值模拟	87
2.9.5	消失模铸造充型过程数值模拟	89
2.9.6	金属型倾转铸造	90
第3章	铸造凝固过程数值模拟技术	91
3.1	铸造凝固过程的数学模型	91
3.1.1	控制方程	91
3.1.2	初始条件	92
3.1.3	边界条件	92
3.1.4	有限差分离散	93
3.2	铸造凝固过程的数值求解	94
3.2.1	初始条件	94
3.2.2	边界条件的确定	94
3.2.3	结晶潜热的处理	95
3.2.4	正交网格与边界切网格的温度场结果对比	101
3.3	重力铸造下缩孔与缩松的预测	103
3.3.1	缩孔预测	103
3.3.2	缩松预测	104

3.4	低压铸造条件下的缩孔与缩松预测	105
3.4.1	缩孔预测	105
3.4.2	缩松预测	106
3.5	试验验证	108
3.6	铸件凝固过程数值模拟技术应用	113
3.6.1	砂型铸钢件应用实例	113
3.6.2	低压铸造应用实例	116
3.6.3	精密铸造应用实例	118
第4章	铸造模拟过程前后处理技术	121
4.1	铸件网格自动剖分	121
4.1.1	STL 文件格式	121
4.1.2	网格剖分原理	123
4.1.3	均匀网格剖分	127
4.1.4	非均匀网格剖分	130
4.1.5	基于非均匀网格算法的边界切网格剖分	132
4.1.6	剖分实例	136
4.2	基于 OpenGL 的图形显示技术	138
4.2.1	OpenGL 技术概述	138
4.2.2	OpenGL 的工作顺序	148
4.2.3	模型空间和模型矩阵	148
4.2.4	OpenGL 的数据处理过程	148
4.2.5	OpenGL 基本程序结构	149
4.2.6	基于 OpenGL 的图形显示应用	149
4.3	基于 VTK 的图形显示技术	151
4.3.1	VTK 技术特点	152
4.3.2	VTK 的框架结构	152
4.3.3	VTK 层次结构	153
4.3.4	VTK 的可视化处理	153
第5章	基于 CAE 的铸造工艺 CAPP 技术	157
5.1	铸造工艺 CAPP 的技术内涵	157
5.2	冒口 CAD 系统	159
5.2.1	冒口的设计原则	159
5.2.2	冒口设计的常用方法	160
5.2.3	冒口库的建立	167
5.2.4	冷铁的计算	168
5.3	浇注系统的设计	168
5.3.1	转包浇注时浇注系统各截面尺寸的计算	168

5.3.2	漏包浇注时浇注系统各截面尺寸的计算	169
5.4	基于 Pro/E 二次开发的浇冒口系统绘制	170
5.4.1	系统软硬件选型	170
5.4.2	软件开发工具简介	171
5.4.3	本系统中的几种数据处理方法	178
5.5	铸造工艺 CAPP 系统应用	180
5.5.1	皮带轮毛坯件应用实例	180
5.5.2	侧架铸件应用实例	181
第 6 章	铸造专家系统	191
6.1	铸造工艺分析专家系统	191
6.1.1	铸造专家系统的发展	192
6.1.2	铸造专家系统现状	195
6.1.3	铸造专家系统应用前景	195
6.1.4	专家系统的特点	195
6.1.5	专家系统的工作原理	196
6.1.6	专家系统关键技术问题	197
6.2	铝铸件缺陷分析专家系统	199
6.2.1	铝铸件缺陷分析专家系统的主要功能	199
6.2.2	知识库的建立及推理机的设计	201
6.2.3	系统的人机接口	207
6.2.4	铝铸件缺陷专家系统程序实现	208
参考文献	214

第1章 绪论

铸件在生产之前, 首先应编制出控制该铸件生产工艺过程的科学技术文件, 这就是铸造工艺设计。其过程是根据铸件要求、生产批量和生产条件, 以及对铸件的结构分析, 确定铸造工艺方案、工艺参数和工艺规程, 编制工艺卡, 设计工艺装备的全过程。因此, 铸造工艺设计的好坏, 对铸件质量、生产率及成本起着很大的作用。

目前的铸造工艺设计主要是凭借经验, 无法满足高质量和短交货期的铸件市场的竞争要求, 为此, 铸造工作者急需寻找科学、快速、可靠的铸件工艺设计手段来满足现代工业对铸造业的要求, 铸造过程数值模拟就是体现这一设计手段的重要技术。

随着计算机技术的发展, 计算材料科学已成为一门新兴的交叉学科。除试验和理论方法外, 计算材料科学是解决材料科学中实际问题的第三大重要研究方法。随着计算材料学的发展, 在实际生产之前可对铸件生产进行计算机数值模拟, 预测其可能产生的缺陷, 并进一步改进工艺和结构。根据美国科学研究院工程技术委员会的测算, 模拟仿真可提高产品质量 5 倍~15 倍, 增加材料出品率 25%, 降低工程技术成本 13%~30%, 降低人工成本 5%~20%, 提高投入设备利用率 30%~60%, 缩短产品设计和试制周期 30%~60%等。

1983年, 在国际第50届铸造会议凝固数值模拟专题会议上, 美国密执安大学Pehlke教授及佐治亚工业大学Berry教授的报告中提出铸造工艺CAD 的概念并把它归结为是计算模拟、几何模拟和数据库(DATABASE)的有机结合。发展到现在, 完整的或广义的铸造工艺计算机辅助设计包括工艺设计及工艺优化或铸造凝固过程模拟两个方面。其目的是利用计算机辅助铸造工作者优化铸造工艺, 预测铸件质量, 确定铸造方案, 估算铸件成本, 显示并绘制铸造工艺图、工艺卡等技术文件。经过十几年的探索和研究, 计算机辅助设计在工业中得到越来越广泛的应用, 也为铸造工艺设计的科学化、精确化提供了良好的工具, 成为铸造技术开发和生产发展的重要内容之一。

1.1 铸造过程数值模拟的内涵

铸造过程数值模拟系统以铸件充型、凝固过程作为研究对象, 采用数值分析技术、数据库技术和可视化技术, 计算和显示铸件成型过程中的流场、温度场和应力场等分布, 并根据模拟结果预测铸件质量, 从而改进铸造工艺。

铸件充型、凝固数值模拟系统主要包括前处理软件、中间计算软件和后处理软件三个模块, 如图 1-1 所示。前处理软件模块的主要功能是实现几何条件加载、参数设置和网格剖分及提供有关铸造工艺信息。中间计算软件模块的任务是根据铸造过程涉及的物理场, 为数值计算提供计算模型, 并根据铸件质量或缺陷与物理场的关系(判据)预测铸件质量,

内容主要包括温度场、流场、浓度场、应力场及涉及到晶粒形核和长大的微观组织计算。铸造过程的宏观模拟(温度场、流场、浓度场、应力场)软件已经用于指导实际生产, 微观组织模拟也取得了一些突破性进展。后处理软件模块的任务是将充型、凝固过程的模拟计算结果以直观的图形形式展示出来, 让模拟者能够直接观察到模拟计算的结果。

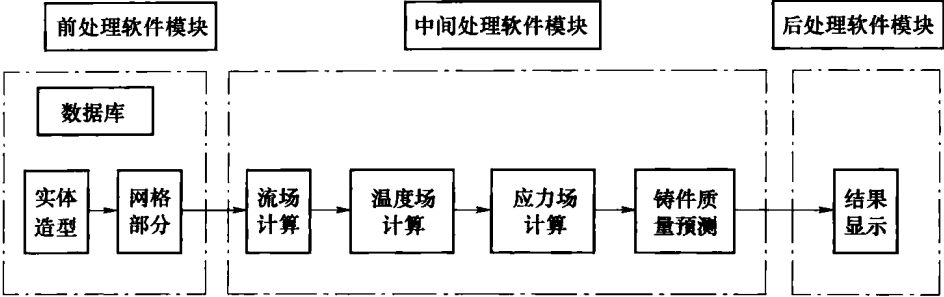


图 1-1 铸造过程数值模拟系统的组成

1.2 铸造过程数值模拟的主要方法

1.2.1 数值离散方法

研究流体传输现象一般有两种基本的方法：一种是宏观连续理论包括流体力学(Fluid Mechanics)及热力学(Thermodynamics)；另一种是微观运动学理论(Kinetic Theory)，它是统计力学的非平衡态分支，两种方法都可以推导出同样的系统控制方程。在数值模拟的过程中，虽然采用的离散求解方法不同，但都有相同的特点，即首先把计算区域划分成许多控制体或网格，然后在这些小块上把微分方程离散成代数方程，再把小块上的代数方程汇合成总体代数方程组，最后在一定的初边值条件和边界条件下求解方程组，从而求得计算区域内各节点的物理量。数值模拟的正确性和精确度取决于所建模型的物理理论依据是否正确合理以及网格的划分、方程的离散、初边值条件、边界条件、代数方程组的求解等几个因素。对流动问题的方程的离散主要有有限元方法、有限差分法和有限体积法，正在兴起的极有希望的另一种方法是格子气方法，各种方法均有其自身的优点和适应性。

1. 有限差分法

有限差分法建立在经典数学理论的基础上，将求解域划分为差分网格，将运动微分方程中的导数项以差商来代替，从而将微分方程转化为易于求解的代数方程。有限差分法具有概念清晰，易于理解，程序简单，处理效率高等优点。它的离散格式灵活，可根据需要提高格式精度，其解的存在性、收敛性和稳定性早已有较完善的研究成果，是比较成熟的数值方法，目前应用较广。有限差分法的缺点是在模拟边界上受网格密度的限制。有限差分法不能方便的应用到非正交网格上，数值精度较低，这样就大大限制了其应用，也正是因为此原因，非正交网格及各种差分格式的发展一直是人们研究的热点。

2. 有限元法

有限元法又称有限单元法，它是以变分原理为基础同时吸收有限差分方法中的区域

离散思想而发展起来的一种有效的数值计算方法。有限元法的基本思想：将空间上的连续场离散成有限个，并按照一定方式相互联系在一起的形成单元组和体，在每一个单元内部用假定的近似函数来分片表示场函数，单元内的近似函数通常使用单元节点的值及其插值函数来表示，这样就可以将一个连续的无限自由度的问题转化成为一个离散的有限自由度问题，然后再通过对这些单元进行积分把偏微分方程转化成为一组线性方程组，求解该方程组即可得到场的近似数值解。这种方法具有较强的适应性，计算精度较高，因而具有很广泛的适应性，特别适合于几何、物理条件比较复杂的问题。

与有限差分法相比，有限元法具有能够适应边界形状不规则的区域，便于处理自然边界条件等优点，但它又存在计算格式复杂、计算量及存储量大、大型系数矩阵较难求解等缺点。正是由于这些困难所在，限制了有限元法在流场中的应用。

3. 有限体积法

有限体积法又称有限容积法或控制体积法，有限体积法的基本思想：把计算区域离散为若干个网格节点，围绕每个网格节点取一系列互不重复的控制体，在每个控制体上利用物理量的守恒关系建立节点的离散方程，其中为了得到界面上通量的离散关系式，必须假设物理量在结点间的近似变化规律(局部近似)，因此，有限体积法兼有有限元法和有限差分法的特点，从网格划分来看与差分法类似，而从取控制体和局部近似来看又类似有限元法。有限体积法最突出的特点是从物理量的守恒规律出发，在推导过程中概念清晰，离散化方程就是物理量在控制体上的守恒关系式。所以，物理量的守恒不受网格大小的制约。当采用无结构化网格时，该方法能像有限元方法一样适用于不规则网格和复杂边界情况，且处理效率与有限差分法相似，而高于有限元法，所以在数值模拟中有着很大的发展潜力，它采用上风差分格式解动量方程，相比之下，这种方法由于添加了隐式速度项使单步计算时间延长，迭代次数增加，因而计算效率不高。为此，目前已研究出针对有限体积法的改进松弛解法，它可以保证在提高计算效率的同时获得稳定的数值解。在法国研制的 Simulor 软件中采用该方法进行铸造充型过程数值计算，并可应用于形状较为复杂的实际铸件。本书的流场计算采用有限体积法进行充型过程的求解。

4. 格子气方法在充型过程中的应用与发展

格子气自动机 LGA 及在其基础上发展的格子玻耳兹曼方法(LBM)是用比较简单的微观模型来模拟复杂的宏观的流体行为，是近年来发展起来的一种全新的计算流体力学的方法。它的基本思想是用简单的局域相互作用来表现复杂系统的整体行为及其演化，根据对流体分子运动的描述，将细胞自动机具体化就得到模拟流体力学的格子气自动机。它的成功有望成为揭示连续物理的新手段，实现用不连续模型描述连续运动的客观对象并直接进行计算的大胆设想，它预示着计算流体力学的诸多领域，包括湍流、带化学反应的流动，多孔介质内部的流动，多相流等将会产生一个方法上的突破。格子气模型不用推导复杂的流体力学方程，算法稳定，程序设计简单，模拟结果直观性强，可以方便的用于可视化技术，边界处理容易，对复杂边界条件的计算处理具有传统建模方法无法比拟的灵活性，还有运算上的完全并行等。它的诞生为计算流体力学开辟了一个全新的方向，主要应用于复杂几何边界流体流动、多孔介质流、多相流及非等温流等的模拟。但也有人对此持谨慎态度，认为它在使用前还有许多问题尚待解决，需要经过更长时间的考验。

格子波耳兹曼方法经过近年来的发展，在流动模拟中有了实际应用，并取得了良好的效果。如文献报道，其模拟了波形板复杂流道的流场，计算了流场的状态。采用的是十三点格子波耳兹曼模型，边界处理成无滑移、反弹边界。结果表明，该模型与其他数值计算方法相比，能更方便地处理边界，因此，能有效、精确和稳定地模拟复杂流动现象。这说明该方法是种较好的数值模拟方法，具有较好的工程应用背景。

1.2.2 凝固过程数值计算方法

凝固是一个非常复杂的物理化学过程，由包括热量传输、动量传输、质量传输及相变等一系列过程耦合而成的。要精确地模拟凝固过程，必须求解连续性方程、Navier-Stokes(N-S)方程、傅里叶方程及质量传输方程等，但是将所有这些过程耦合在一起进行求解，在目前还是非常困难的。在一般情况下，若铸件充型时间和整体凝固时间相比很短时，常常可以假设铸型是瞬时充满的，这时只需计算温度场即可。当铸件壁很薄或充型时间和凝固时间相差不多时，必须耦合充型过程模拟进行初始温度场计算，然后再进行凝固过程温度场模拟。温度场模拟是预测缩孔缩松形成、微观组织形成及热裂、变形等的基础。经过多年的发展，温度场模拟技术已经比较成熟。

凝固过程的模拟常用的有有限差分法、有限元法和边界元法。有限元法和边界元法能够处理较为复杂的物体以及在边界节点获得较精确的解而受到越来越广泛的重视。但是就方法发展成熟的程度、实现的难易及应用的广泛性等方面而言，有限差分法仍占相当优势。

有限差分法主要有显示差分、隐式差分和半隐式差分。显示差分使用最为广泛，但是该方法的稳定性和收敛性强烈的受时间步长和空间步长的影响。隐式差分的稳定性不受时间步长的限制，但是为了保证计算精度，时间步长也不能过大。

1.2.3 铸件充型过程数值模拟方法

充型过程主要的控制方程是 N-S 方程、连续性方程和能量方程。求解 N-S 方程的形式主要有拉格朗日法和欧拉法。采用拉格朗日法容易引起网格扭曲、缠结及网格重分，致使仅有少数人采用，而欧拉法具有固定网格，计算量小的优势，使其得到了广泛的应用。

目前，围绕欧拉法主要有以下几种方法：SIMPLE、MAC 及 SMAC、FAN、SOLA、投影法等，在自由表面的处理上主要有 VOF、Level-set、守恒标量法等。其中应用最为广泛的是 SOLA-VOF 方法。一些商用模拟软件的充型分析系统以 SOLA-VOF 为基础，并融合了开发工作者的经验进行修正，如德国的 MAGMA、比利时 Sirris 研究所的 ViewCAST、Anycasting 等国外的商品化软件，还有国内清华大学计算机辅助铸造研究室的 FT-star 模拟软件、华中科技大学的华铸 CAE、恒利公司的 CASTSoft 等。

1. SIMPLE 方法

1972 年，Patankar 提出了 SIMPLE 方法和 SIMPLER 方法，它是一种求解压力耦合的半隐式方法。在用 SIMPLE 方法计算非定域时，不稳定速度场的方法是由美国明尼苏达大学 S.V.Patankar 教授总结出来的。SIMPLE 是典型的比较全面的流场计算方法。计算出的速度场不仅满足于连续方程的要求，也满足动量方程的要求。其主要特点是压力场和速度场同时迭代，但是在采用 SIMPLE 算法求解非定常问题时，其每个时间步长内都

需要进行内迭代，如果内迭代精度不高的话，则不易满足散度场为零的条件。

2. MAC 及 SMAC 方法

MAC 方法是 1965 年美国 Los Alamos 实验室的 Harlow 和 Welsh 开发的用于处理不可压缩黏流自由表面流动的计算方法。该方法首先求解压力泊松方程获得收敛的压力场，再求解 N-S 方程得到速度场，仅适用于简单形貌的自由表面流动，MAC 方法特别适用于自由表面和多介质问题的计算。SMAC 方法(Simplified MAC)是 MAC 方法(Maker and Cell)的简化，SMAC 方法计算速度场时，它离散后的差分方程迭代中没有压力项的计算，通常校正压力项由校正势函数来取代，并用其校正速度场，校正后的速度场如不能满足连续方程，则反复迭代势函数，修改速度场，直至满足连续方程为止。SMAC 方法的特点在于势函数场迭代。但由于加入大量的表示点，占用内存大，计算时间长，随着其他方法的发展，MAC 类方法的使用者越来越少。

3. SOLA 方法

SOLA-VOF 技术是美国 LOS Alamos 科学实验室研究的一种计算方法。在 SOLA 方法中，压力的初值可以随机设置，将随即假设的压力代入 N-S 方程中，求得假设压力下计算出来的速度场，这个速度场若不满足连续性方程，则按照一定的方式进行压力场修正，然后再回代到 N-S 方程，经过反复调整压力场计算，直到计算出来的速度场满足连续性方程，这时计算出来的速度、压力即为该时刻的解。

4. 投影法

在求解 N-S 方程的原始变量法中，大部分算法需要在动量方程和连续性方程之间进行反复迭代，以求得速度和压力，如前面提到的 MAC、SIMPLE、SOLA 方法。在原始变量法中还包括一种不在动量方程和连续性方程之间进行迭代的数值方法——投影法。

投影法求解 N-S 方程的思想最早是由 Chorin 所提出的，当时 Chorin 认为投影法在时间方向上至多只有一阶精度，之后经过 20 多年的发展，人们发展了各种各样的投影法，并提出了高阶精度的投影格式。对于非稳定不可压缩 N-S 方程，Gresho 详细讨论了一阶、二阶和三阶精度的投影法，同时给出了理想的中间速度场的边界条件，并证明在很薄的边界层之外简化的投影法和简化的边界条件可以得到与理想的边界条件相同的精度。Dukowicz 和 Dvinsky 基于 AF(Approximation Factorization)技术提出了关于 N-S 体系的高阶投影法。通过采用块 LU 分解，Perot 分析了投影法解的精确性和边界条件的影响。Ming-Jiu Ni 采用矩阵分析的方法提出了用于求解非稳态 N-S 方程的二阶时间精度的投影法。

投影法在求解过程中将解耦后的 N-S 方程分为几步计算，就可以得到速度和压力值，免去了反复迭代过程，因而提高了计算效率。分数步长法在每个时间步长内仅求解一次泊松方程，且当泊松方程求解达到一定精度时，对连续性方程满足性较好。

投影法的实际工程应用大多在计算水力学中，在铸造充型模拟计算方面的应用较少，清华大学的杨杰将投影法用于压铸充型过程的数值模拟计算中，提高了计算效率。

上述几类算法中，MAC 类算法是专门针对自由表面流动提出的，其他几类方法的差别在迭代方法上。SMAC 采用的是势函数一场迭代，而 SOLA 和 SIMPLE 是两场迭代，普遍认为后一种方法更为有效。就 SOLA 和 SIMPLE 而言，其区别在 SOLA 法忽略了周围单元的影响，而 SIMPLE 方法的压力修正方程充分考虑了这一影响。Xu Zhian 认为，这两点差异正是 SOLA 算法的不足之处，为此他从这两方面改进了 SOLA 算法，使计算

更加有效。另外，就通用性而言，SIMPLE 方法应用面较广，在紊流处理、传热传质及涡合力方面有一定优势。通过以上比较，综合考虑所有的铸件充型过程算法，SIMPLE 方法具有通用性，有效性，准确性，且在流动过程中传热传质计算方面具有优越性，适合于进行藕合计算，但是计算速度较慢。所以，本书采用 SOLA 方法进行铸件充型过程流动及藕合计算更具有实际意义。

5. 充型过程自由表面的确定和边界条件的施加

目前，用来处理自由表面的方法主要有 MAC 方法、VOF 方法及守恒标量方程法。MAC 方法采用交错网格技术，即速度矢量位于网格界面，其他量位于网格中心。在流体域引入一组无质量的不参与计算的标识点，用于表明白由表面的位置及流动历程。任一标识点的速度根据面积加权的插值公式，采用最靠近标识点的几个网格的速度来得到。MAC 方法实际上是一种欧拉—拉格朗日混合方法。MAC 方法能描述充填过程中自由表面的大变形、波浪卷曲乃至飞溅等细节，因而被日本的 Niyama、Anzai 等在工作站上应用。但 MAC 方法由于加入大量标识点，占用内存大，计算时间长，尽管后来发展了 SMAC 法和只计算自由表面附近几层单元的标识点的 SMU 方法，但随着其他计算方法的发展，MAC 方法的使用者越来越少。

自由表面处理方法的另一个重大突破是 VOF 方法的提出，它基于 MAC 方法的思想，1975 年，由 Hirt 和 Nichols 提出的。同 MAC 方法相比较，这种算法一个单元只需一个存储量，显著减少了自由表面计算的工作量。但在三维情况下，确定自由表面的取向十分困难且计算量增大，即使采用不考虑自由表面取向的简化处理方法，也要对至少 24 种自由表面情况进行分析以确定自由表面的边界条件，处理过程很繁琐。

黄文星是较早开展这方面研究的学者。1989 年，他认为 VOF 方法中自由表面的趋向在三维时难以确定，因此放弃了该法，采用了 SOLA-MAC 方法。但由于 MAC 法固有的缺点，1994 年，他又开展了 VOF 方法的三维研究。在其研究中将可能的自由表面由 64 种减少到 24 种，裴清祥和袁浩扬采用了忽略表面单元压力的方法来简化三维压力边界条件，袁浩扬还指出了结合惯性原理及连续性原理对 64 种可能的表面的分布情况施加速度边界条件的方法，1993 年，Xue 和 Hansen 等越过二维 AD 格式，直接构造三维 AD 格式。由于自由表面方程自身的不足，导致构造三维 AD 格式时的自由表面的取向困难，从而导致自由表面边界条件的施加困难，使三维自由表面计算从根本上加以改进。

守恒标量法是 Liu 和 Spalding 于 1988 年提出的。其克服了 VOF 法的两大缺陷，即二维自由表面取向的确定及自由表面边界条件的施加。由于守恒标量法中流场的求解是在包含气象在内的全域内求解，这样就避免了施加自由表面边界条件，这对紊流自由表面流动的模拟尤其有利，此外还可以直接对背压进行处理，无需简化；再者，由于同时求解了气液两相，因而有望模拟飞溅现象。极为重要的一点是，在离散方程时，守恒标量法采用了 Van-Leer 格式，不需确定自由表面取向，易于进行三维计算，易于与计算流体力学通用软件相结合。就近几年文献所知，现在自由表面计算方法多采用 VOF 方法，西安交通大学的麻向军通过对 Van-Leer 格式进行修正，采用守恒标量法通过采用两个不同的时间步长计算充型过程的流场和自由表面，克服了流场计算时时间步长过小的缺点，使得充型过程数值模拟的计算速度大大提高，而计算结果仍能满足工程实用的要求。大连理工大学的科研人员也对守恒标量法进行了应用。

上述三种方法中，守恒标量法和 VOF 方法只用一个变量来确定自由表面，与 MAC 法相比，占用内存少，计算速度快，因此得到广泛应用。守恒标量法与体积函数法之间，前者须对气、液两相进行全场计算，后者需要施加自由表面边界条件。VOF 方法被普遍采用，主要用来求解金属液充型流动的自由表面问题。许多研究者以二维 VOF 方法为基础，将其扩展到三维。但是这种方法在扩展到三维时，会出现一些数值处理方面的问题，大大增加了求解的难度，主要是自由表面边界条件施加的原因。

1.3 网格生成技术

对于连续的物理系统的数学描述，如动量方程、能量方程及傅里叶方程等，通常是用偏微分方程来完成的。为了在计算机上实现对这些物理系统的行为或状态的模拟，连续的方程必须离散化，在方程的求解域上(时间和空间)仅仅需要有限个点，通过计算这些点上的未知变量继而得到整个区域上的物理量的分布。有限差分法、有限体积法和有限元法等数值方法都是通过这种方法来实现的。这些数值方法非常重要的一个部分就是实现对求解区域的网格剖分。

1974 年，Thompson 等提出了采用求解椭圆型方程方法生成贴体网格，在网格生成技术的发展中起到了开创作用。随后 Steger 等又提出采用求解双曲型方程方法生成贴体网格。但直到 20 世纪 80 年代中期，相比于计算格式和计算方法的飞跃发展，网格生成技术未能与之保持同步发展。因而从 20 世纪 80 年代开始，各国计算流体和工业界都十分重视网格生成技术的研究。20 世纪 90 年代以来迅速发展的非结构网格和自适应笛卡儿网格等方法，使复杂外形的网格生成技术呈现出了更加繁荣发展的局面。现在网格生成技术已经发展成为 CFD 的一个重要分支，它也是计算流体力学近 20 年来一个取得较大进展的领域。

目前，在 CFD 高度发展的美国，网格生成所需的人力时间占一个计算任务全部人力时间的 60% 左右，可见“网格生成是 CFD 作为空气动力学工程应用的有效工具所面临的关键技术之一”。在文献中 Steger 还认为“目前生成空间网格的方法可以认为是令人满意的，但在几何描述和表面网格的生成方面仍需做出更大的努力”，且“成功地生成复杂外形地网格需要依靠专职队伍的努力”。

网格剖分技术已经有几十年的发展历史了。到目前为止，结构化网格技术发展得相对比较成熟，而非结构化网格技术由于起步较晚，实现比较困难等方面的原因，现在正在处于逐渐走向成熟的阶段。

1.3.1 结构化网格

结构化网格生成源于美国 Lawrence Livermore 国家实验室的 Winslow 和 Crowley 在 20 世纪 60 年代后期的工作，以及苏联科学家 Godunov 和 Prokopov 在同一时期的工作^[78]。结构化网格有清晰的结构，所有内点周围网格拓扑结构相同，它处理简单几何体是十分有效的。结构化网格可以分作单块网格和多块网格。多块网格可以处理复杂的几何体，在这种方法中复杂几何体被看作组合的块，但是块与块之间的连接和变更节点间距比较困难。结构化网格，特别是多块网格在 CFD 工程实用化发展中应用十分广泛。其优点是

结构简单，提供了更多的单元尺寸和形状控制，便于数值处理。缺点是在处理复杂几何体时缺乏适应能力，不利于处理复杂的几何体。

1.3.2 非结构化网格

非结构网格是另一类型的计算网格，它舍去了网格节点的限制，节点和单元的分布是任意的，因而能较好地处理边界。非结构网格生成方法在其生成过程中都采用一定准则进行优化判定，因而能生成高质量的网格，且很容易控制网格的大小和节点的密度。一旦在边界上指定网格的分布，在两个边界之间可以自动生成网格，无需分块或用户的干预。因此，近年来非结构网格方法受到了高度的重视，有了很大的发展。

非结构网格的基本思想基于如下假设：四面体是三维空间最简单的形状，任何空间区域都可以被四面体单元所填满，即任何空间区域都可以被以四面体为单元的网格所划分。由于非结构网格舍去了网格节点的结构限制，易于控制网格单元的大小、形状及网格点的位置，因此比结构网格具有更大的灵活性，对复杂外形的适应能力非常强。此外，对于结构网格，在计算域内网格线和平面都应保持连续，并正交于物体边界和相邻的网格线和面；而非结构网格则无此限制，这就消除了网格生成中的一个主要障碍；且其网格中一个点周围的点数和单元数都是不固定的，可以方便地作自适应运算，合理分布网格的疏密，提高计算精度。正因为有这一系列优点，非结构网格技术在 20 世纪 80 年代末和 90 年代初得到了迅速的发展。生成非结构网格的方法主要有两类：Delaunay 三角化法和推进阵面法。

1.3.3 用于铸造模拟的网格生成技术

网格自动生成技术是一个近年来发展非常迅速的研究领域，自从 20 世纪 70 年代至今，各种网格自动生成算法不下 100 种。这些算法可以大致分为两大类，即以四面体(三角形)为单元的方法和以六面体(四边形)为单元的方法。四面体(三角形)方法是用三角形或四面体单元来分解任何区域，主要应用于有限元计算，如由美国 USE 公司开发的 Procast 就采用四面体网格对铸件进行剖分。六面体(四边形)方法是用四边形或六面体单元来分解任何区域，在铸造模拟计算中被广泛使用。铸造模拟软件大多针对于 STL 文件进行网格剖分，仅有少数软件针对于其他格式的文件进行网格剖分如 IGES 等。

但是，六面体网格最大缺陷就是对铸件的空间适应性较差，因此，纯粹的使用这种网格会丢掉一些信息，造成计算的准确度下降，严重的时候会产生错误的计算结果。例如在计算充型过程时，如果采用弧形较大的浇道，由于网格是六面体，在网格剖分不是足够细的情况，会造成很大的能量损失，计算结果与实际浇注过程偏差很大；再有就是在计算大型壁厚不均匀铸件时，为了保障计算的精度，那么需要足够小的网格尺寸，这就为后续的计算带来很大的计算量，计算时间会呈几何级数增加；而网格尺寸较大时，容易丢失一些薄壁的信息，造成较大的温度场计算误差，这将影响缩孔、缩松的缺陷预测准确性及应力—变形计算的准确性。因此，需要对这种网格进行改进，以提高后续计算的准确性。

六面体正交网格主要被应用有限差分法或者有限体积法求解充型/凝固过程的模拟计算，该网格具有剖分容易，计算简单的特点。因此，广泛地应用于科学研究和商业软件

件上。网格的划分方法主要有射线法和切片法，切片法来源于激光烧结快速成型技术的层剖切技术，是应用最广泛的一种方法，理论成熟且方法简单。四面体的网格主要被应用于有限元法求解充型及凝固过程，因为程序编织和求解方法难度较大，所以，大大限制了它的推广使用，现有的商品化软件仅有 ProCAST 在使用这种技术，而其他商品化软件都使用六面体网格。

清华大学的贾宝仟、中北大学的徐宏等人采用切片法实现了直角六面体网格全自动剖分技术，华中科技大学的陈立亮等人采用射线法完成了网格的自动划分。2004 年，文曦、熊守美对 STL 文件实现了非均匀网格划分，在保证模拟精度的基础上，大大减少了网格数量，2006 年庞永盛完成了基于 STL 的 Cut cell 笛卡儿网格算法，将其应用于后处理显示中，解决了可视化中的图像表面“锯齿”的问题。

1.4 浸入边界法及其应用

浸入边界法(Immersed Boundary Method, IBM)最初由 Peskin 在 1972 年提出用于模拟人类心脏中的血液流动。它的基本思想是将复杂结构的边界模化成 N-S 动量方程中的一种体力，并使用简单的笛卡儿网格有效地避开贴体网格生成的困难，提高了计算效率。经过三十多年的不断发展和改进，目前，浸入边界法已成功应用于生物流体问题、流固耦合问题、物体绕流以及多相流问题等。

浸入边界法既是一种数学建模方法，又是一种数值离散方法，它的一个主要特点是整个流场计算都使用笛卡儿网格，而不是按照物体形状生成复杂的贴体网格。笛卡儿网格相对于贴体网格的优势在于容易生成和计算简单。一个外形复杂的物体生成贴体网格的工作量一般占整个计算时间的 25%，而生成笛卡儿网格则要容易和快速得多。

浸入边界法的另一个特点就是将浸入边界模化成流场中的力源而不是边界条件，这也是浸入边界法可以使用笛卡儿网格进行计算的原因。日前，按照对力源项处理方式将浸入边界法分为两类：连续力法(Continuous Forcing Approach)和离散力法(Discrete Forcing Approach)。连续力法的力源项满足某种特定的力学关系式(如胡克定律)，一般具有解析表达式，主要用于处理弹性边界问题。所谓的弹性边界问题是指弹性结构在流场中的响应与运动问题，例如，生物膜在外部与内部流场的共同作用下产生不断的变形和运动。离散力法的力源项由离散后的控制方程求出，一般无法获得其解析表达式，主要用于处理固体界面问题(如刚体绕流)，此类问题的物体形状不会发生改变，而且流场只存在于物体的外部(或内部)。

前面所提到的浸入边界法都无法模拟高雷诺数的运动，为了解决这一问题可将浸入边界附近的计算模块修正成类似处理边界条件的形式。目前，可模拟高雷诺数的运动的浸入边界法主要有两种：虚拟网格有限差分法(Ghost cell FDM)和切割网格有限体积法(Cut cell FVM)。

虚拟网格有限差分法将虚拟网格定义在浸入边界内部，保证每个虚拟网格至少与流场中的一个网格点相邻，流场计算在遇到虚拟网格就会停止，不需要计算浸入边界内部的网格点，虚拟网格上的各种变量值由周围流体网格点插值得到。虚拟网格法目前已应用于包括可压缩流在内的许多流动问题：如圆柱绕流、雷诺数为 $O(10^5)$ 量级的机翼绕流