

分类号 _____

学号 D201577259

学校代码 10487

密级 _____

华中科技大学
博士学位论文

铸造充型过程中成形类缺陷
演化机理及数值模拟研究

学位申请人：曹流

学科专业：材料加工工程

指导教师：廖敦明 教授

答辩日期：2018年03月20日

**A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Doctor of Engineering**

**Study on the evolution mechanism and
numerical simulation of forming defects during
cast-filling processes**

Candidate : Cao Liu

Major : Materials Processing Engineering

Supervisor : Prof. Liao Dunming

Huazhong University of Science and Technology

Wuhan 430074, P. R. China

March 20th, 2018

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除文中已经标明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对本文的研究做出贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到，本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：曹流

日期：2018年6月6日

学位论文授权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权华中科技大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

本论文属于 保密，在____年解密后适用本授权书。
 不保密。

(请在以上方框内打“√”)

学位论文作者签名：曹流

日期：2018年6月6日

指导教师签名：曹毅明

日期：2018年6月6日

摘要

缺陷预测及工艺优化是铸造宏观过程模拟的最终目的,而铸造充型过程中可能产生的成形类缺陷(如卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣等),往往只能借助充型模拟结果间接地分析,未能充分利用数值模拟技术所带来的数字化分析优势。且随着对铸造模拟技术实用化要求的逐步提高,相关缺陷分析方法已满足不了实际生产需求。采用数值模拟手段对铸造充型过程中成形类缺陷进行深入研究,对提高铸件性能和优化铸造工艺有着十分巨大的价值。本文对铸造充型过程成形类缺陷数值模拟所涉及的各个方面进行了深入的研究和探讨,包括铸造充型过程多相流数学建模、冷隔缺陷演化机理及预测和氧化夹渣缺陷演化机理及预测等。同时,本文基于计算流体力学开源代码完成了相关求解器的开发工作,有助于广大科研工作者深入研究铸造充型过程数值模拟技术。

首先,考虑到液固转变对铸造充型过程影响较大,提出了一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型,即高固相率糊状区采用临界固相率方法,低固相率糊状区采用变黏度模型,中等固相率糊状区采用多孔介质拖拽模型,有效地处理了液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。建立了气液固多相流数学模型,用于计算充型过程中“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合作用。其中,VOF-PLIC算法用于追踪界面前沿,CSF模型用于计算表面张力,等效比热法和温度校正法相结合共同处理潜热。基于计算流体力学开源代码OpenFOAM,开发了铸造充型过程求解器。计算了两个充型基准实验(S型模具水模拟实验和铝合金基准件充型实验),验证了本文流动场模型基础算法(气液两相流计算)的准确性。计算和对比了不同糊状区流动模型下一底注式铸造工艺的计算结果,验证了本文所提出的糊状区流动行为计算模型的合理性。

其次,冷隔的形成是由于一液面前沿已部分凝固,原子的扩散和运动能力较差,无法与其他液面处的晶粒在原子尺度上形成牢固的连接。影响冷隔缺陷的主要因素包括界面前沿凝固状态、碰撞剧烈程度和汇聚程度。考虑到隐式界面追踪算法只能得到扩散型界面前沿,提出了适用于冷隔缺陷预测的界面前沿判断算法。考虑到冷隔缺陷是由金属液界面前沿交汇产生的,参照拉格朗日粒子追踪的思想,提出了判断界面前沿碰撞的算法。结合冷隔缺陷演化机理,提出了一考虑金属相固相率、速

度和体积比的冷隔缺陷生成模型，并在已得到的铸造充型过程求解器的基础上，开发了铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器。

再次，氧化夹渣缺陷的产生是一复杂的物理化学变化过程，并处于气液固多相耦合流动状态。铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的主要影响因素包括金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣。结合已有的化学反应模型(化学燃烧速率计算模型和型芯发气速率计算模型)，提出了一考虑金属相体积比、温度和当前氧化夹渣密度的氧化夹渣生成速率计算模型。考虑到充型过程中氧化夹渣会在铸型壁面上发生粘附和累积，提出了一氧化夹渣缺陷壁面粘附模型。在已开发的铸造充型过程求解器的基础上，完成了铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的开发工作。

最后，设计了一组多壁厚铜合金低压铸造工艺，分析和对比了不同壁厚下的充型过程和铸件最终充型高度，验证了所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性。设计了一组具有不同浇道的锌合金高压铸造工艺，分析了不同浇道下的充型过程和铸件最终卷气缺陷分布。卷气缺陷预测结果与实际铸件气孔分布对应良好，验证了所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性。针对一组具有不同浇道的铜合金低压铸造工艺，计算和对比了其充型及冷隔缺陷演变过程。冷隔缺陷预测结果与实际铸件冷隔分布对应良好，验证了所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。针对一典型铝合金铸造工艺和一铜合金低压铸造工艺，对比和分析了氧化夹渣缺陷演变过程。氧化夹渣缺陷预测结果与实际铸件表面氧化夹渣缺陷分布对应良好，验证了所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。上述基准试验件和铸造实验证明了本文铸造充型过程中成形类缺陷数值模拟技术的可行性和实用性，能够为实际铸造生产提供科学指导。

关键词：铸造充型；成形类缺陷；数值模拟；冷隔；氧化夹渣；OpenFOAM

Abstract

Defects prediction and process optimization are the ultimate goals of numerical simulation technology of casting macroscopic process. But the forming defects (such as gas entrapment, misrun, cold shut and oxide inclusion), which may be generated during cast-filling processes, often only can be analyzed indirectly with the filling simulation results. It fails to take full advantage of the numerical analysis benefits of numerical simulation. With the practical requirements of casting simulation technology gradually increasing, the related defects analysis cannot meet the demand of actual production. Therefore, it has significance for optimizing the casting process and improving the overall performance of casting, to study the forming defects during cast-filling processes by the numerical simulation method. In this paper, all aspects involved in the numerical simulation of the forming defects during cast-filling processes were deeply studied and discussed, including the multiphase flow mathematical modeling in the cast-filling process, the evolution mechanism and prediction of cold shut defect, the evolution mechanism and prediction of oxide inclusion defect, and so on. Meanwhile, the related solver development works here were based on CFD (computational fluid dynamics) open source code, which can help the majority of researchers in-depth study of numerical simulation technology in cast-filling processes.

Firstly, considering that liquid-solid conversion has a great influence on the cast-filling process, a calculation model of mushy region flow behavior through measurement of solid-fraction was developed, which could effectively investigate the flow behavior of mushy region in different stages. Generally, the critical solid-fraction method was adopted for mushy region with high solid-fraction, the variable viscosity method was applied for mushy region with low solid-fraction, and the porous medium drag-based model was used for mushy region with middle solid-fraction. The mathematical model of gas-liquid-solid multiphase flow was established, which was used to calculate the coupling effect of “air-liquid metal-solidified metal” in the cast-filling process. The VOF-PLIC algorithm was used to track the interface front, the CSF model was used to calculate the

surface tension, and the equivalent specific heat and temperature correction methods worked together to deal with the latent heat. A cast-filling process solver was developed based on the CFD open source code OpenFOAM. Two filling benchmark experiments (an S-shaped channel water filling experiment and an aluminum alloy benchmark test) were calculated to verify the accuracy of the basic algorithm of flow field model (gas-liquid two-phase flow calculation). Computation and comparison of the calculation results of a bottom-pouring casting process under different mushy zone flow models verified the rationality of the calculation model of mushy region flow behavior in this paper.

Secondly, the formation of cold shut is due to that a liquid front has been partially solidified, and atoms are less diffusive and less athletic, unable to form strong bonds with other grains at the atomic scale. The main factors affecting the cold shut defect include the interface fronting solidification state, the degree of collision and the degree of convergence. Considering that the implicit interface tracking algorithm can only get the diffusion interface front, an algorithm for judging the interface front was proposed for the cold shut defect prediction. Considering that the cold shut defect was produced by the intersection of liquid metal fronts, an algorithm to determine the frontal collision of the interface was proposed, with reference to the idea of Lagrangian particle tracking. Combining with the cold shut defect evolution mechanism, a formation model of cold shut, which is related to solid-fraction, velocity and volume-fraction of metal phase, was developed here. A predictive solver for cold shut defects during the cast-filling process was developed, on the basis of the obtained cast-filling process solver.

Thirdly, the formation of oxide inclusion defects is a complex process of physical and chemical changes, and in the gas-liquid-solid multiphase coupling flow state. The main influencing factors of oxide inclusion defects during the cast-filling process are the liquid metal-air contact degree, the liquid metal temperature, and the generated oxide inclusion. Combining with the existing chemical reaction models (a chemical combustion rate calculation model and an core gas formation rate calculation model), a formation rate model that is relevant to the volume fraction of liquid metal, the temperature, and the current oxide inclusion density, was proposed here. A boundary condition was developed to handle the adhesion and accumulation on the wall. A predictive solver for oxide

inclusion defects during the cast-filling process was developed, on the basis of the obtained cast-filling process solver.

Finally, a set of low pressure die casting crafts with different wall thickness were designed, and the filling processes and casting final filling heights under different wall thickness were analyzed and compared, which verified the accuracy of the proposed calculation model of mushy region flow behavior in predicting the misrun defect. Two zinc alloy HPDC (high pressure die casting) processes with different runners were designed, the filling process under different runners and the distribution of final air entrapment defects in the castings were analyzed. The predicted results of the air entrapment defects corresponded well with the actual casting pore distributions, which verified the practicality of the adopted gas-liquid-solid multiphase flow model in predicting the air entrapment defect. Aimed at two copper alloy LPDC (low pressure die casting) processes with different runners, the filling and cold shut defect evolution processes were calculated and compared. The predicted results of cold shut defects corresponded well with the actual cold shut distribution of castings, which validated the practicability of the predictive model of cold shut defect. Aimed at a representative aluminum alloy casting technology and a practical copper alloy casting technology, the evolution processes of oxide inclusion defects were compared and analyzed. The prediction results of oxide inclusion defects corresponded well with the actual distribution of oxide inclusion defects on the casting surface, which validated the practicability of the predictive model of oxide inclusion defect. The above-mentioned benchmark tests and casting experiments proved the feasibility and practicability of the numerical simulation technology of forming defects in the cast-filling process, which could provide the scientific guidance for the actual casting production.

Key words: cast-filling; forming defects; numerical simulation; cold shut; oxide inclusion; OpenFOAM

目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	III
第 1 章 绪论.....	1
1.1 研究背景和意义.....	1
1.2 铸造充型过程数值模拟研究现状.....	4
1.3 冷隔缺陷预测研究现状.....	18
1.4 氧化夹渣缺陷预测研究现状.....	21
1.5 本领域目前存在的不足之处.....	25
1.6 本文研究内容及研究目标.....	26
第 2 章 铸造充型过程流动数学模型及数值计算方法.....	30
2.1 引言.....	30
2.2 基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型.....	31
2.3 气液固多相流数学模型.....	35
2.4 铸造充型过程数值计算方法.....	43
2.5 铸造充型过程流动数学模型实验验证.....	52
2.6 本章小结.....	64
第 3 章 冷隔缺陷演化机理及预测模型.....	66
3.1 引言.....	66
3.2 冷隔缺陷演化机理.....	67
3.3 流动界面前沿及其碰撞判断.....	69
3.4 冷隔缺陷生成模型.....	73
3.5 冷隔缺陷数值计算方法.....	77

华中科技大学博士学位论文

3.6 本章小结.....	82
第 4 章 氧化夹渣缺陷演化机理及预测模型.....	83
4.1 引言.....	83
4.2 氧化夹渣缺陷演化机理.....	84
4.3 氧化夹渣缺陷生成速率计算模型.....	86
4.4 氧化夹渣缺陷壁面粘附模型.....	92
4.5 氧化夹渣缺陷数值计算方法.....	94
4.6 本章小结.....	98
第 5 章 成形类缺陷数值模拟的实验验证.....	99
5.1 引言.....	99
5.2 多壁厚低压铸造工艺浇不足缺陷实验验证.....	100
5.3 不同浇道下锌合金高压铸件卷气缺陷实验验证.....	104
5.4 不同浇道下铜合金低压铸件冷隔缺陷实验验证.....	109
5.5 不同浇道下铝合金铸件氧化夹渣缺陷实验验证.....	117
5.6 铜合金低压铸件氧化夹渣缺陷实验验证.....	122
5.7 本章小结.....	128
第 6 章 结论与展望.....	130
6.1 全文总结.....	130
6.2 研究展望.....	131
致 谢.....	132
参考文献.....	133
附录 I 攻读博士学位期间的学术成果.....	146

第1章 绪论

1.1 研究背景和意义

我国是全球最大的铸件生产国家，据最新统计，2016年我国各类铸件总产量约为4720万吨，我国的铸件总产量已经连续16年保持世界第一。根据中国机械工程学会铸造分会公布的数据显示(图1-1)^[1]，我国的铸件总产量已进入平稳保持阶段，中国铸造行业正面临全面转型升级的关键时刻。铸造对国民经济的发展起着重要的作用，是基础工业的一项主要支柱，在《中国制造2025》^[2]战略目标中，有十大重点领域均与铸造行业密切相关。提升铸件产品质量的稳定性和一致性，预防和消除铸造缺陷，是“十三五”期间的一项重要任务^[3]。因此，深入发展我国的铸造技术，提升我国铸造产业的国际竞争力，仍是广大铸造工作者的重要研究课题^[4,5]。

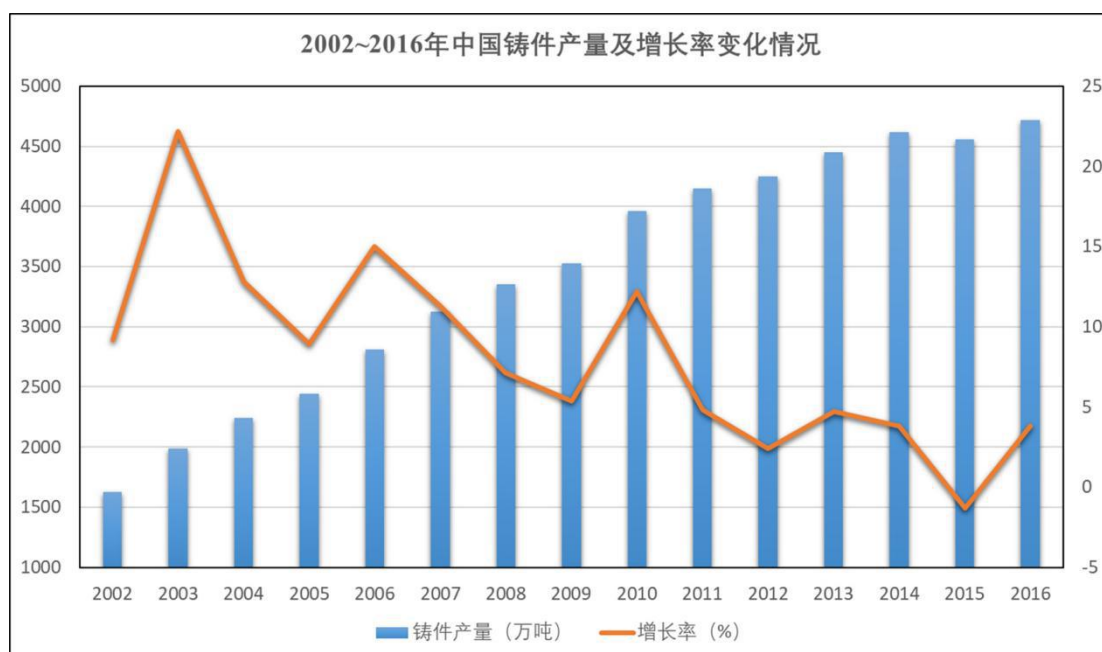


图 1-1 2002~2016 年中国铸件产量及增长率变化情况^[1]

Fig. 1-1 China's casting output and growth rate change from 2002 to 2016^[1]

铸造是一个极为复杂的材料加工成形过程，其中涉及到许多复杂的物理化学反应及相互作用。铸造在宏观尺度上包含传热、流动和传质现象，在微观尺度上表现为枝晶与晶粒组织演变，还涉及收缩和弯曲等应力应变行为，同时伴随气孔、偏析、

裂纹等各类缺陷的形成与发展^[6,7]。自 1962 年 Fursund^[8]最先采用计算机模拟铸件温度场以来,铸造过程数值模拟技术有了长足进展。近年来,随着计算机模拟技术的日益成熟,数值模拟手段在优化铸造宏观过程方面的作用越来越重要^[9]。计算机数值模拟技术可以有效地再现和预测铸造工艺过程中可能出现的问题,对传统的铸造工艺设计和生产过程进行现代化和信息化改造,从而实现工艺过程的优化,降低制造成本^[10]。

准确描述铸造过程的关键之一是物理模型,铸造宏观过程的物理模型包括流动场模型^[11]、温度场模型^[12]和应力场模型^[13]。铸造充型过程所采用的流动场模型为 Navier-Stokes 方程^[11]。铸造过程的温度计算包括两个阶段:充型过程和凝固过程。其中,充型过程的温度计算可视为瞬态对流-扩散问题^[14],凝固过程的温度计算可视为瞬态扩散问题^[12]。铸造过程中产生的应力可分为三个部分:由于铸件冷却速率不同,收缩量不一致,各部分相互牵制而产生温度应力;由于铸件在凝固和收缩过程中发生固-液相转变和固-固相转变,引起铸件体积变化而产生的相变应力;由于铸型、型芯等对铸件收缩的阻碍而引起的机械应力。目前铸造过程应力场模拟的研究主要集中在凝固以后阶段,固相区铸造热应力计算的力学模型主要有:热弹性模型^[15]、热弹塑性模型^[16]、热黏弹性模型^[17]、热弹黏塑性模型^[18]等。从上述物理模型可知,铸造宏观过程模拟中直接求解的物理量包括:充型速度、充型压力、充型体积比、温度、固相率和应力状态(包括主应力、切应力、主应变、切应变等)。

缺陷预测及工艺优化是铸造宏观过程模拟的最终目的,不同铸造工艺所关心的铸造缺陷并不一致,总体来说,铸造缺陷主要包括:浇不足、冷隔、卷气、氧化夹渣、型芯发气、缩孔缩松、变形、残余应力、裂纹、宏观偏析、模具冲蚀等。而绝大多数铸造缺陷(如冷隔、氧化夹渣、裂纹等)不能仅依据直接求解的物理量进行分析,还需要提出相应的判据,才能够完成直观且定量化的分析。目前铸造模拟商用化软件和相关学术研究主要集中于铸件凝固及应力演变过程中所产生的缺陷,如缩孔缩松^[19]、型芯发气^[20]、宏观偏析^[21]、变形^[22]、残余应力^[23]、模具冲蚀^[24]等(图 1-2),且取得了较好的实用效果。而铸造充型过程中可能产生的相关缺陷,如卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣等,往往只能借助充型模拟结果间接地分析,未能充分利用数值模拟技术所带来的数字化分析优势,且随着对铸造模拟技术实用化要求的逐步提高,相关缺陷分析方法已满足不了实际生产需求。实际铸件生产中,卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣缺陷显著降低铸件的表面精度,严重时导致铸件开裂,甚至直接报废^[25]。

本文将上述缺陷归结为成形类缺陷，即在铸造充型过程中可能产生的影响铸件表面形态和内部结构连续性的一类缺陷。因此，采用数值模拟手段对铸造充型过程中成形类缺陷进行深入研究，对提高铸件整体性能和优化铸造工艺有着十分巨大的价值。

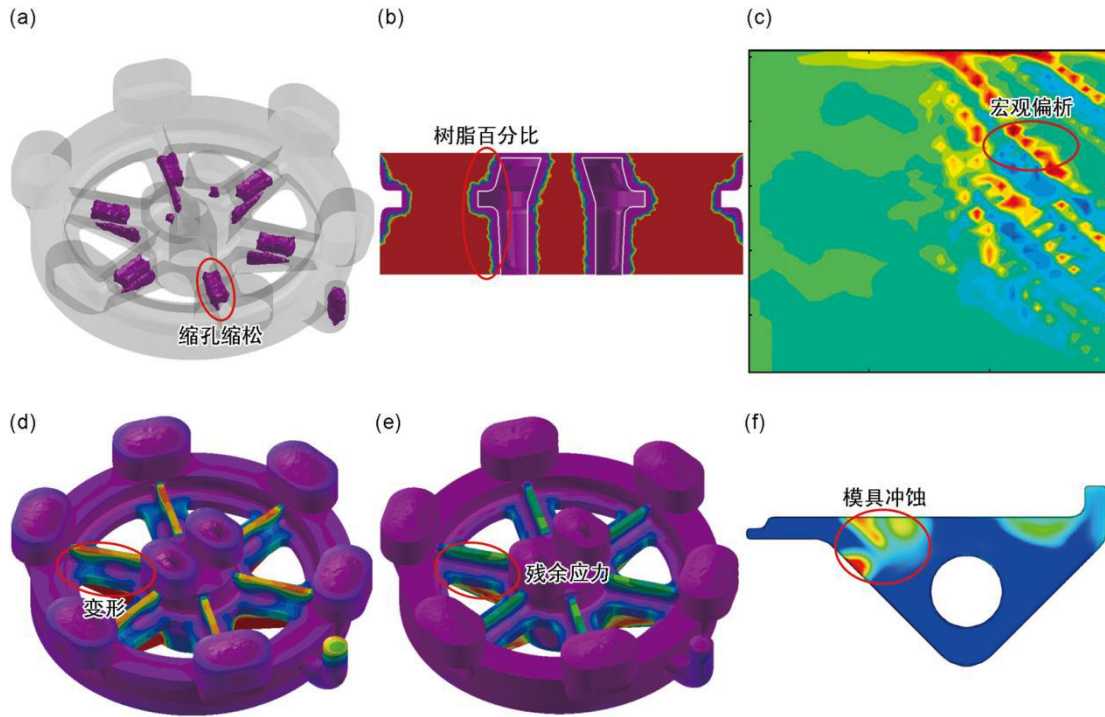


图 1-2 铸件凝固及应力演变过程中所产生缺陷的模拟结果：(a) 缩孔缩松；(b) 型芯发气；(c) 宏观偏析；(d) 变形；(e) 残余应力；(f) 模具冲蚀

Fig. 1-2 Simulated results of defects produced during casting solidification and stress evolution: (a) shrinkage; (b) core gas; (c) macrosegregation; (d) deformation; (e) residual stress; (f) mold erosion

本文着眼于铸造充型过程中成形类缺陷的数值模拟研究，在深入认识成形类缺陷的演化机理的基础上，分别提出适用于浇不足、冷隔、卷气和氧化夹渣缺陷的预测模型，实现针对铸造充型过程中成形类缺陷的数值模拟技术。浇不足和卷气缺陷的预测主要受充型过程流动模型的影响，如金属液流动行为的计算、气液固多相耦合作用等。冷隔和氧化夹渣缺陷的预测一方面也受充型过程流动模型的影响，另一方面受冷隔和氧化夹渣生成速率、壁面边界处理等模型的影响。因此，下面将从以下三个部分对相关内容的国内外研究现状进行综述：(a) 铸造充型过程数值模拟；(b) 冷隔缺陷预测；(c) 氧化夹渣缺陷预测。接着，在国内外研究现状的基础上，给出本领域目前存在的问题。最后，对本文的铸造充型过程中成形类缺陷演化机理及数值模

拟研究进行总体介绍。

1.2 铸造充型过程数值模拟研究现状

铸造充型过程缺陷预测的基础是铸造流动场计算结果，即液态金属的充型形态、速度、压力等信息。只有在获得准确的铸造流动场前提下，相关缺陷的预测结果才有指导意义。铸造充型过程数值模拟可以视为计算流体力学(Computational fluid dynamics, CFD)的一个分支，因此，铸造充型过程数值模拟所涉及的主要技术包括：物理模型、界面追踪、物性参数、边界条件、网格划分以及数值求解。

准确描述数值求解问题的关键是物理模型和边界条件。不同铸造工艺有很大的差异，如低压铸造过程中充型平稳，重力起主导地位，而高压铸造过程中入射速率极快(达 30 m/s 以上)，充型流动过程变化快，重力的影响可以忽略不计。凝固过程还涉及相变，往往与流动过程和应力演变过程相耦合，如何在宏观层面上准确地处理相变问题也是难点之一。铸造充型过程的边界条件需视不同铸造工艺而定，如低压铸造^[26]涉及到压力下充型，离心铸造^[27]涉及到旋转轴设定，定向凝固^[28]涉及到辐射换热处理等。因此，寻求有效的物理模型和边界条件一直是准确预测铸造充型过程的关键。

铸造充型过程是典型的多相流问题，而多相流数值模拟的关键之一是界面前沿追踪。具有复杂几何铸件的充型过程中，金属液面的流动形态往往异常紊乱，给相关界面前沿追踪算法带来了很大的难度。在薄壁类铸件的充型过程中，金属液前沿流动虽然平稳，但表面张力往往对充型过程起到明显的影响，而表面张力的计算往往也依赖于界面前沿追踪的准确性。因此，寻求能同时描述复杂界面形态和准确计算表面张力的界面前沿追踪算法，一直是铸造充型过程数值模拟的重点所在。

随着数值模拟技术的快速发展，针对铸造充型过程模拟的网格划分类型和数值求解算法均有了长足的进展。从最初的差分网格^[29]，逐步出现四面体网格^[30]、自适应六面体网格^[31]甚至混合网格^[32]。与网格划分类型相对应，相关数值求解算法也逐步应用到铸造充型过程模拟中，主要包括：有限差分法(Finite Difference Method, FDM)^[33]、有限元法(Finite Element Method, FEM)^[34]和有限体积法(Finite Volume Method, FVM)^[35]。近年来，随着计算能力的大幅提高，无网格算法如光滑粒子流体力学(Smoothed Particle Hydrodynamic, SPH)^[36]也逐渐在铸造充型过程模拟中，尤其

是在高压铸造^[37]领域得以应用。因此，寻求同时能保证计算准确性和效率的网格划分算法和数值求解方法，是铸造充型过程数值模拟的重要方向之一。

国内外学者对铸造充型过程数值模拟进行了大量的研究，下面按照所涉及的几个关键问题分别进行介绍。

1.2.1 流动场模型

铸造充型过程所采用的流动场模型为 Navier-Stokes 方程^[38]，即动量方程，用于控制速度 \mathbf{U} 的变化：

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla p + \mathbf{S} \quad (1-1)$$

式中， ρ 为密度， kg/m^3 ； t 为时间， s ； p 为压力， Pa ； \mathbf{S} 为源项； $\boldsymbol{\tau}$ 为应力张量。

对于绝大多数铸造充型过程而言，通常将液态金属液视为牛顿流体^[39,40]，即认为液态金属内摩擦剪应力和单位距离上两层流体间的相对速度成比例。

Homayonifar 等^[41]基于 SOLA-VOF(Solution Algorithm-Volume of Fraction)算法建立了三维单相流模型，对高压铸造(High Pressure Die Casting, HPDC)过程中的卷气现象进行了模拟，并提出了混合 VOF-Lagrange 算法预测充型过程中的飞溅。任立新等^[42]基于压铸热流道系统的原理，依据锌合金水龙头本体设计其流道浇注系统，利用铸造模拟软件 Flow-3D 对其冷流道浇注系统和热流道浇注系统分别进行压铸充型过程模拟，通过模拟结果对比和分析冷、热流道浇注系统在温度场、压力场和表面缺陷分布的差异，并进行了生产验证。Wu 等^[43]采用 SOLA-VOF 算法对立式离心铸造的充型过程进行了计算，并通过相应的水力学实验验证了所建立的数值模型。上述研究均采用单相流模型计算铸造充型过程，并未考虑充型过程中气相的影响，如孤立气相对液相的阻碍作用等。

由于单相流模型只考虑了液态金属的流动行为，只能定性地分析卷气缺陷。为了更为准确地计算卷气和背压对充型过程的影响，Han 等^[44]在单相自由表面流动模型的基础上，通过在气相中施加追踪粒子来描述气相的运动，但此模型忽略了金属液内部气体的压力变化。Lee 等^[45]和 Attar 等^[46]基于理想气体喷射理论，提出了针对 HPDC 充型过程的背压模型，该模型通过金属液的进流速度和气相的出流速度大致估算出自由液面处的背压大小，但此模型未考虑气体卷入金属液的现象，且局限于

HPDC 工艺。Prindiville 等^[47]在上述模型的基础上，通过额外求解气体的浓度方程来考虑气泡的动态行为，但忽略了气相速度的影响。Zhao 等^[48]采用 DFDM (Direct Finite Difference Method) 算法对高压铸造的充型过程进行模拟，模拟及实验结果表明，高压铸造产品的最终气孔分布主要取决于充型过程中的卷气以及凝固阶段的压力控制，但计算过程中对气液界面做了简化处理。因此，最适合考虑气相对充型过程影响的计算方法是两相流模型，即同时计算金属液相与气相的运动过程。但气液两相具有大密度比和大粘度比的相界面，给数值计算带来了很大的难度。

Tavakoli 等^[49]针对铸造充型过程，提出了基于 VOF 算法的多相流计算模型，采用 Projection 方法同时求解气液两相的流动场，并将气液两相均视为不可压缩流体。Chen 等^[50]同样提出了基于 VOF 算法的不可压缩气液两相流动模型，并采用 SOLA 算法进行压力修正。Hao 等^[51]将金属液相视为不可压缩流体，将气相视为可压缩流体，采用 SOLA 算法求解气相两相的流动场，并通过 Level Set 算法表征气液两相界面。相比单相流模型而言，两相流模型直接求解气液两相的流动场，自然地考虑了气相的压力和速度对液相流动的影响，因此，两相流模型可以直接预测卷气缺陷。图 1-3a~b 为采用单相流模型计算充型过程的结果，即计算过程中不考虑气相的影响。可以看出，充型过程中金属液内部的气相区会“凭空消失”。图 1-3c~d 为采用两相流模型计算充型过程的结果，即计算过程中考虑气相的作用。可以看出，充型过程中金属液内部的气相在液相的作用下会发生运动。

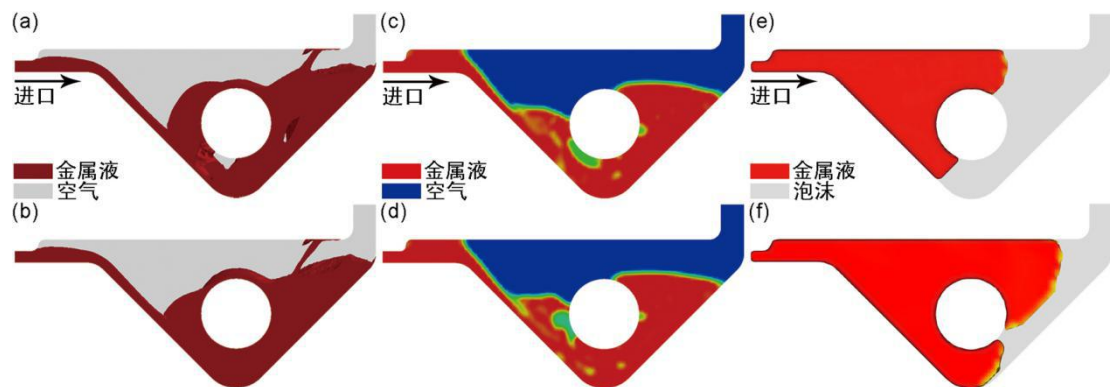


图 1-3 不同流动场模型下的充型过程模拟结果对比：(a~b) 单相流模型；(c~d) 两相流模型；(e~f) 消失模铸造充型过程

Fig. 1-3 Comparing the filling process simulation results under different flow field models: (a~b) single-phase flow model; (c~d) two-phase flow model; (e~f) lost foam casting filling process

与一般铸造过程中金属液充填模具空腔不同，消失模铸造过程中，泡沫模样在高

温金属液的作用下分解气化，会在金属液前沿与模样之间产生气隙层，气隙层的存在显著降低了金属液的充型能力，使得消失模铸造的界面推移方式与其它铸造工艺明显不同。图 1-3e~f 为消失模铸造充型过程的模拟结果，液面前沿呈现出明显的整体推进形态。魏尊杰等^[52]对金属液充填干砂消失模时气隙尺寸及气隙压力进行了数值计算，结果表明：在充型过程中气隙尺寸及压力基本保持不变，模样及涂料性能对气隙尺寸及压力影响很大。陈亚娟^[53]首先通过分析消失模铸造的充型过程，并对充型过程的模拟做了一些必要的简化。在分析已有界面推移模型的基础上，综合考虑金属液流动时受到模样分解产生气体压力的阻碍作用，建立了将气隙压力作为流动前沿的边界条件进行计算的界面推移模型。在进行消失模铸造充型过程的耦合计算时，建立了合适的数理模型，利用有限差分法进行数值求解。考虑金属液前沿受到模样分解时强的激冷作用，以及金属液的辐射散热，并以此作为边界条件进行计算。Liu 等^[54]采用 Flow-3D 计算了消失模铸造充型过程，其中金属液-模样间隙压力受泡沫分解速率和涂料透气性共同影响，并基于间隙压力的变化提出了相应的间隙界面换热系数计算方法。张倩^[55]采用铸造模拟软件 ProCAST 模拟了板形灰铸铁件的消失模铸造充型过程，获得了各种工艺因素对消失模铸造充型过程中金属液的充型速度、气膜压力、气膜厚度及金属液前沿温度的影响规律。上述研究中，应用最广的界面推移模型为气隙压力方程法，该方法通过气隙中泡沫模样的质量守恒方程，导出气隙中的反压阻力，并将其应用至消失模铸造流动场模型中。

1.2.2 界面前沿追踪

两相流数值模拟的关键之一是界面前沿追踪，流动过程中液相形态的明锐程度和表面张力的计算完全取决于界面前沿的表征质量。在 CFD 领域中，界面前沿追踪算法可归结为两类思想，即显式界面追踪和隐式界面追踪。所谓的显式界面追踪，是直接通过网格的变化来描述界面的运动，显式地给出界面运动情况。Lewis 等^[56]提出了任意的拉格朗日-欧拉方法来描述铸造充型过程的界面前沿变化，采用欧拉模型计算液相流动场，采用拉格朗日模型计算界面网格的变化。但由于该方法未考虑气相的影响，且重构界面网格时做了很多简化，使得其未能描述铸造充型过程中复杂的界面变化过程(如卷气等)。Funck 等^[57]实时修正界面处网格速度场使其保持 C1 连续，进而通过网格顶点路径的线积分得到其变形数据，该方法具有较好的体积守恒性和

特征保留性，但不适用于铸造充型这类几何形状变化异常剧烈的情形。Bridson 等^[58]基于 Perlin 噪声原理构建了一个简单且有效的湍流速度场生成模型，可以有效地显示湍流扰动对自由界面运动的影响，但该模型不适用于铸造充型过程的界面前沿扰动情形。Brochu 等^[59]针对显式界面前沿追踪过程中网格缠结问题提出了相应的解决措施，并在开源代码平台 GitHub 上公布了其开源程序 El Topo。该方法可以较好地描述界面碰撞时的几何拓扑变化，图 1-4 是开源代码 El Topo 计算 Enright 测试算例^[60]时的界面变化结果。

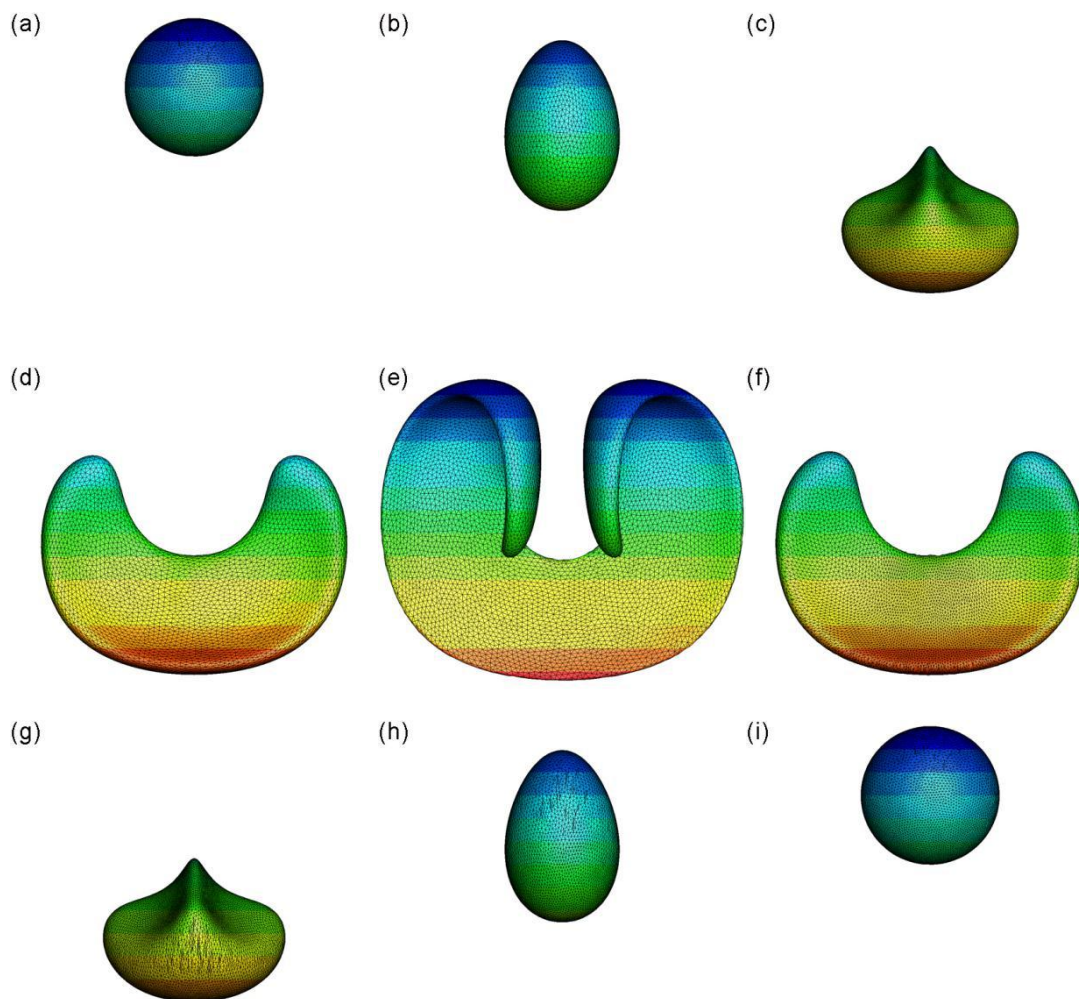


图 1-4 开源代码 El Topo 计算 Enright 测试算例时的界面变化结果：(a) 0.01 s；(b) 0.28 s；(c) 0.55 s；(d) 0.82 s；(e) 1.36 s；(f) 2.17 s；(g) 2.44 s；(h) 2.71 s；(i) 3 s

Fig. 1-4 Interface changes results of the Enright test calculated by the open-source code El Topo: (a) 0.01 s; (b) 0.28 s; (c) 0.55 s; (d) 0.82 s; (e) 1.36 s; (f) 2.17 s; (g) 2.44 s; (h) 2.71 s; (i) 3 s

从上述分析可知,显式界面追踪算法可以清晰地给出界面前沿的运动情况,但如何有效地处理界面前沿的几何拓扑结构变化,仍然是此类算法的难点所在。目前相关算法还只能针对简单的界面前沿变化情形,显式界面追踪算法难以精确描述铸造充型过程中复杂的界面前沿变化。在目前铸造充型过程界面前沿追踪的研究中,绝大部分采用隐式界面追踪算法。所谓的隐式界面追踪,是通过追踪相体积比的变化来表征界面运动,间接地给出界面运动情况,而无需界面重构操作。

Nichols 等^[61]针对二维两相流运动情形,提出了 VOF(Volume of Fluid)算法用于描述界面前沿运动。此算法采用采用体积比因子来表示不同区域中液相所占体积分数,体积比因子为 1 时表示该区域完全由金属相占据,体积比因子为 0 时表示完全由气相占据,界面处的体积比因子的值介于 0 和 1 之间。郝静^[62]采用新的界面追踪技术 Level Set 方法描述铸造气液两相界面,并利用高精度离散格式求解界面输运方程,并在此基础上发展了新的适用于铸造充型过程气液两相流动的 SOLA-Level Set 算法。该算法改进了传统的 SOLA 方法使其具备求解可压缩气体运动方程的能力,使用 Ghost Fluid 方法解决了气液两相界面处密度跨越较大易引起的计算发散问题。Level Set 算法的核心思想是将界面前沿看作某个标量函数的零等值面,该标量正、负值分别代表液相和气相,该标量满足相关的方程,在任意时刻,只要得到该标量的分布,即可确定界面前沿的位置。但 Level Set 算法在计算过程中极易产生质量损失问题,造成金属液内部气泡的不准确的体积和质量模拟结果。上述研究中,界面前沿周围均会出现明显的界面扩散现象,即很难得到界面前沿所在的确切位置,这是连续性计算方法所不可避免的^[63]。因此,为了更为准确地描述充型过程的界面前沿,国内外学者相继提出了用于表征更加精确的界面前沿的计算方法。

Kang 等^[64]基于 Level Set 算法提出了一明锐界面计算方法,用于表征气液两相流过程中的界面前沿变化,采用 Projection 方法求解 Navier-Stokes 方程。并随后将此方法应用于火焰爆炸和相变问题的求解^[65]。Sussman 等^[66, 67]基于 CLSVOF(Coupled Level Set and Volume of Fluid)方法^[68]提出了相应的明锐界面计算方法,同时采用 Projection 方法求解 Navier-Stokes 方程。Enright 等^[69]为了克服 Level Set 方法所带来的质量耗散问题,提出了一有效的半拉格朗日颗粒 Level Set 方法,用于获得明锐的界面前沿。该基于颗粒的 Level Set 方法不仅解决了界面扩散的问题,同时避免了采用高阶离散方案所带来的昂贵的计算代价。Pang 等^[70]采用基于 SOLA 模型的颗粒 Level Set 方法计算铸造充型过程,该方法在追踪界面前沿过程中,将一有效的快速

重新初始化算法和颗粒 Level Set 方法相结合，用于计算距离场的运动，图 1-5 为其计算的底注式充型过程中气液两相运动结果。

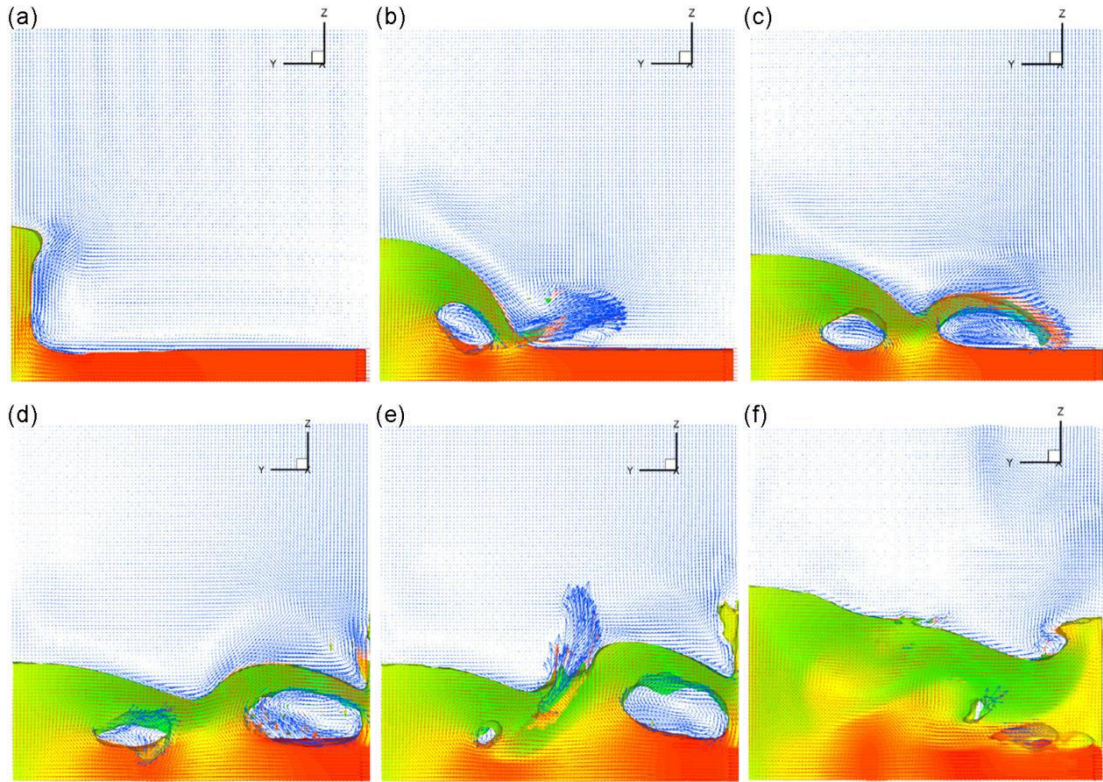


图 1-5 底注式充型过程中气液两相运动的模拟结果^[70]: (a) 0.35 s; (b) 0.56 s; (c) 0.67 s; (d) 0.82 s; (e) 0.97 s; (f) 1.35 s

Fig. 1-5 Simulated results of gas-liquid two-phase motion in bottom injection molding^[70]: (a) 0.35 s; (b) 0.56 s; (c) 0.67 s; (d) 0.82 s; (e) 0.97 s; (f) 1.35 s

1.2.3 糊状区流动行为

上述研究主要将铸造充型过程归属为气液两相流的范畴，但实际铸造过程中，金属液往往会在充型过程就开始凝固，发生液相向固相的转变，尤其是在采用金属型模具、铸件具有薄壁结构等情形下。金属液由液相向固相转变，即所谓的糊状区转变，使得金属相的流动行为也发生转变。采用准确的模型计算液固转变对流动行为的影响，不仅可以更为准确地计算充型过程中糊状区与液相之间的相互作用，也能准确描述浇不足及冷隔等缺陷的形成过程，对提高铸造充型过程的模拟准确性具有重要作用。在 CFD 领域中，国内外学者针对糊状区对流动行为的影响进行了一些研

究, 处理方法主要分为: ① 临界固相率方法; ② 变粘度模型; ③ 多孔介质拖拽模型。

(1) 临界固相率方法

所谓的临界固相率方法, 认为当金属相内部枝晶生长到一定程度后, 枝晶间形成了牢固的连接, 液相无法在枝晶间流动, 金属相停止流动。金珠梅等^[71]对双辊连续铸轧工艺中的流动场和温度场进行了数值计算, 认为金属相的固相率高于某一临界值后, 金属相便失去了流动特性, 只能随着轧辊发生运动。Wang 等^[72]采用数值模拟手段对熔模铸造充型及凝固过程进行了计算, 认为流体单元固相率高于某个临界值之后, 便停止流动。采用停止流动的临界固相率会强制性地令高固相率区域停止流动, 但很难体现固相率逐步增加过程中流动行为的渐变效果。

(2) 变粘度模型

所谓的变粘度模型, 认为糊状区不会对液相流动产生大的影响, 可以看作此时流体的粘度发生变化, 进而通过增大粘性力来体现糊状区对液相流动的影响。Yoshizawa 等^[73]提出了一非平衡态表达式, 用于描述湍流情形下流体粘度的变化, 该模型考虑了湍流动能及其耗散率的非平衡态影响。Arnberg 等^[74]通过研究铝合金枝晶生长过程, 提出了随固相率变化的粘度计算模型。Frehse 等^[75]采用随切变速率而变化的粘度, 计算不可压缩 Newton 流体的稳流过程, 根据流体性质, 实现粘度随着切变速率变化而增大或减小。采用变粘度方法可以体现出粘性力随固相率增大而增加的效果, 但很难达到让高固相率区域停止流动的目的, 换言之, 很难获得合理的满足不同固相率的粘度模型。

(3) 多孔介质拖拽模型

所谓的多孔介质拖拽模型, 认为当枝晶处于逐渐长大的阶段时, 对液相流动起到一定的阻碍作用, 液相可以在枝晶间流动。可以将糊状区等效为多孔介质, 糊状区对液相流动的影响可以等效为多孔介质对液相流动的拖拽作用。目前的多孔介质拖拽模型均建立在 Darcy 定律的基础上, Darcy 定律^[76]是于 1856 年由法国工程师 Darcy 研究水通过饱和砂的实验总结得到的, 用于描述饱和土中水的渗流速度与水力坡降之间的线性关系。Carman^[77]研究了流体通过颗粒层的过程, 将糊状区等效为多孔介质, 在 Darcy 定律^[78]的基础上, 提出了随固相率变化的多孔介质拖拽力表达式, 即 Carman-Kozeny 公式。Voller 等^[79]在 Carman-Kozeny 公式的基础上, 计算了液固转变过程中的对流扩散问题。Jana 等^[80]将 Carman-Kozeny 公式作为额外的源项添加至动

量方程，用于表征枝晶网络对熔体流动的影响。采用等效多孔介质的方法具有较为合理的物理解释，适用于糊状区固相率处于中间水平的情况，即枝晶已对液相产生阻碍作用，但还不足以堵塞流动。因此，结合已有的液固转变影响流动行为的方法，并在此基础上提出更为合理和全面的处理模型，对准确描述铸造过程中糊状区的影响具有重要价值。

1.2.4 物性参数

准确的物性参数(热物性参数和应力参数)是获得准确模拟结果的基础。铸造过程是合金从液相线温度以上逐步降至室温的过程，因此，铸造过程模拟所需的合金物性参数需要涵盖对应的温度范围。热物性参数主要包括：密度、比热容、导热系数、潜热、液固相线温度、温度-固相率曲线、温度-热焓曲线、动力黏度等；应力参数主要包括：Young's 模量、Poisson 比、热膨胀系数、屈服应力、硬化参数等。当铸造模拟过程中采用的是新合金时，由于无法从已有的物性参数库进行查找，如果完全通过实际测试的方法来获得上述参数，即使耗费大量的人力物力，也难以获得高温情形下的绝大部分参数(如比热容、导热系数等)。目前，已有一些专门用于计算合金物性参数的软件(如 JMatPro^[81]、Material Studio^[82]、Thermo-Calc^[83]等)能够较好地计算铸造合金的物性参数，因此，较好地将实际测试与物性参数计算软件相结合的方法是：首先采用能谱仪(Energy Dispersive Spectrometer, EDS)^[84]测量合金成分；接着采用差热分析仪(Differential Thermal Analysis, DTA)^[85]测量合金液固相线温度；之后依据合金成分，采用物性参数计算软件计算得到合金物性参数；最后根据实际测量的液固相线温度，适当调整所计算的合金物性参数。

为了进一步获得与实际情况吻合的合金物性参数，还需通过浇注实验进行修正和验证，目前应用较多的实验方法是针对简单试样的测温实验。测温实验中影响温度的 2 个主要因素是合金自身的导热能力、合金与铸型的换热能力。因此，一般需要将修正合金物性参数与反求界面换热系数^[86, 87]共同进行。作为示例，图 1-6 给出了采用反热传导法求解铜合金与金属模具间的界面换热系数的装置和等效换热系数结果。

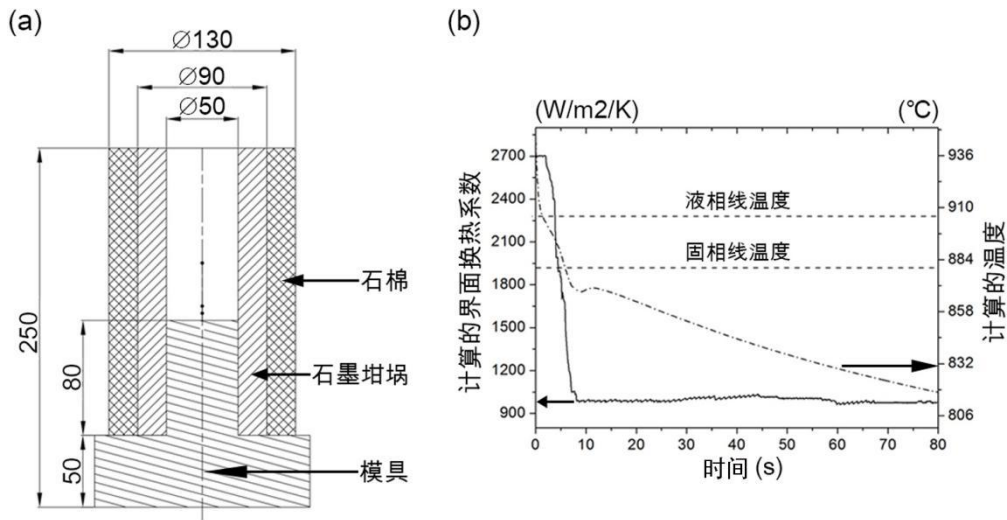
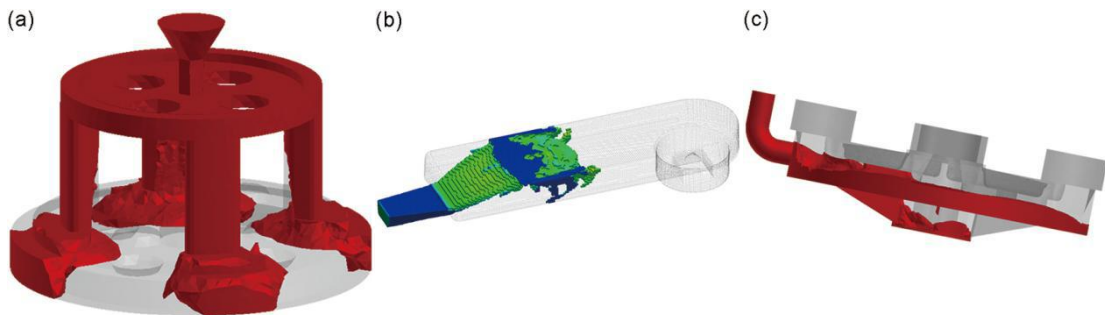


图 1-6 采用反热传导法求解铜合金与金属模具间的界面换热系数的实验设计和结果：(a) 实验设计(单位：mm)；(b) 反算得到的界面换热系数曲线

Fig. 1-6 Experimental design and results of the interfacial heat transfer coefficient between copper alloy and metal mold using anti-heat conduction method: (a) experimental design (unit: mm); (b) interface heat transfer coefficient curve by the inverse calculation

1.2.5 边界条件

从数值模拟的角度出发，不同铸造工艺的区别在于所设置的边界条件不同，本文将重力场设置、旋转设置等均纳入边界条件范畴。图 1-7 为不同铸造工艺的模拟结果，包括：重力铸造^[88, 89]、高压铸造^[90, 91]、倾转铸造^[92, 93]、离心铸造^[94]、低压铸造^[95]和定向凝固^[96, 97]。从模拟结果可以看出，不同边界条件设置使得铸造过程明显不同，表 1-1 为不同铸造工艺下所采用边界条件的汇总。



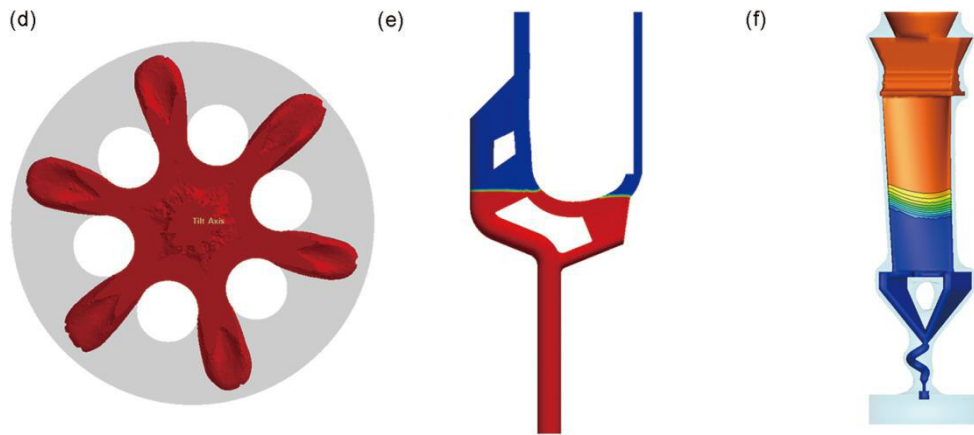


图 1-7 不同铸造工艺的模拟结果：(a) 重力铸造；(b) 高压铸造；(c) 倾转铸造；(d) 离心铸造；
(e) 低压铸造；(f) 定向凝固

Fig. 1-7 Different casting process simulation results: (a) gravity casting; (b) high pressure die casting;
(c) tilting casting; (d) centrifugal casting; (e) low pressure die casting; (f) directional solidification

表 1-1 不同铸造工艺的边界条件

Tab. 1-1 Different casting process boundary conditions

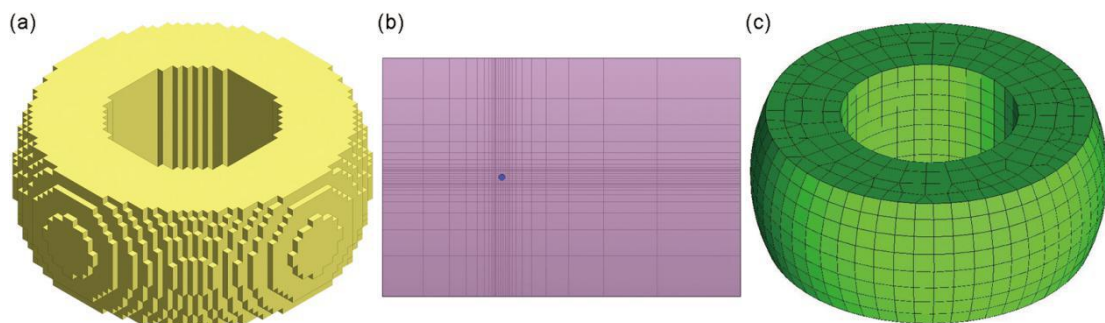
铸造工艺	边界条件
重力铸造	速度进口、温度进口、空冷边界
熔模铸造	速度进口、温度进口、空冷边界
高压铸造 (HPDC)	速度进口、温度进口、空冷边界
低压铸造 (LPDC)	压力进口、温度进口、空冷边界
离心铸造	速度进口、温度进口、空冷边界、旋转轴设置
倾转铸造	速度进口、温度进口、空冷边界、倾转设置
定向凝固	速度进口、温度进口、抽拉设置、辐射换热边界

需要说明的是，实际高压铸造过程中，一般通过调节压力阀门的大小来控制充型的快慢，并未设置进口速度。但由于高压铸造中进口压力过大，从数值模拟的角度出发，设置过大的压力进口边界极易造成流场计算发散，考虑到高压铸造充型时间极短(有些小型铸件在 0.03 s 以内)，通常换算出相应的进口速度，进而设置进口速度边界。

1.2.6 网格划分

数值求解的本质是将连续性介质上的偏微分方程问题转换为离散节点上的线性方程求解。网格作为数值计算的载体，其节点数目和位置代表了计算量和计算区域。判断网格质量的好坏，主要从三个方面考虑：网格单元的质量、拟合实际几何模型的程度和与数值求解算法的兼容度。

网格单元的质量通常指单元长宽比、是否存在畸形单元等，目前的网格划分程序基本可以保证较好的网格单元质量。由于网格区域即代表求解区域，拟合实际几何模型的程度即代表吻合实际铸造过程的程度。最初采用的差分网格(图 1-8a)的最大缺点是拟合铸件形状的精度不高，多重网格(图 1-8b)在差分网格基础上将不同区域设置为不同网格步长，从而使这个缺点得到了一定程度的改善。自适应六面体网格(图 1-8c)和非结构化网格如四面体网格(图 1-8d)均能够很好地拟合实际几何模型。所谓与数值求解算法的兼容度，指的是网格类型与数值求解算法的匹配程度。铸造宏观过程模拟包括流动场、温度场和应力场求解，由于温度场和应力场求解为无变形或微变形下的物理场求解，只要保证较好的网格单元质量，就能保证目前的求解算法与上述网格类型较好地兼容，计算准确性均能得以保证。由于流动场求解过程中涉及到流动方向上数据的处理，而处理过程中主要依赖网格信息，因此，流动场求解过程应尽可能地确保网格分布形态与流动形态相对应，理想情况是流体流动方向与网格边界垂直。从上述分析可知，自适应六面体网格与数值求解算法的兼容度最高，遗憾的是目前尚难以针对复杂几何形状划分自适应六面体网格。混合网格(图 1-8e)可混合不同网格类型(如四面体网格和六面体网格)，是计算流体力学领域的重要网格类型，预计会逐渐应用到铸造充型过程模拟中^[98]。另外需要说明的是，随着无网格算法逐渐在铸造宏观过程模拟中得以应用，网格划分可以省略，只需定义计算边界即可(图 1-8f)。



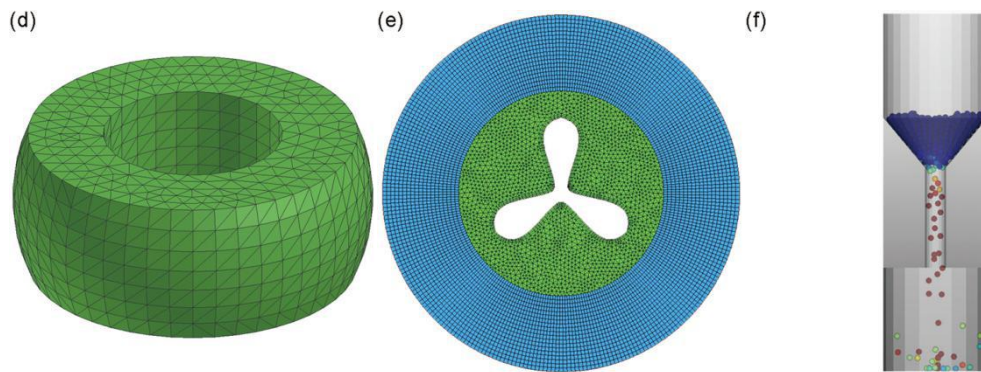


图 1-8 不同的网格类型: (a) 差分网格; (b) 多重网格; (c) 自适应六面体网格; (d) 四面体网格; (e) 混合网格; (f) 无网格算法

Fig. 1-8 Different grid types: (a) differential grid; (b) multigrid; (c) adaptive hexahedral grid; (d) tetrahedral; (e) hybrid grid; (f) meshless algorithm

1.2.7 数值求解

数值求解与网格划分相辅相成, FDM(Finite Difference Method)适用于差分网格和多重网格, FEM(Finite Element Method)适用于除混合网格之外的其它网格类型, FVM(Finite Volume Method)适用于任何网格类型, 无网格算法(如 SPH(Smoothed Particle Hydrodynamic))只需定义边界范围。

FDM 的主要思想是将控制方程中的偏微分操作离散为相邻网格之间的差商。FDM 离散过程简单, 且较容易编程实现, 因此, 最早应用于铸造过程模拟^[99, 100]。FDM 只适用于差分网格和多重网格, 无法拟合复杂曲面边界, 随着计算能力的提高, 可以通过设置足够小的网格尺寸来减小此误差。FDM 的最大缺点是当流动方向偏离坐标轴方向时, 计算精度会大幅下降, 由于不同铸造工艺的充型过程千差万别, 造成 FDM 求解流场的准确性和稳定性难以保证。

FEM 的主要思想是将求解域离散为有限个单元体, 通过形函数获得单元内各点物理量, 进而通过变分法将控制方程转换为节点物理量的矩阵操作。FEM 离散过程复杂, 但求解温度场和应力场时具有很高的精度, 因此, 主要应用于铸造宏观凝固及应力场模拟^[101]。由于四面体网格划分技术最为成熟, 因此, 铸造宏观过程 FEM 模拟中, 主要使用四面体网格进行计算。目前已有较多基于 FEM 的优秀开源代码可供使用, 如 Solidity^[102]等。

FVM 的主要思想是对控制方程两端进行体积分操作, 利用 Gauss 定理将体积分转换为面积分, 进而将面积分转换为节点物理量之间的线性运算。FVM 物理意义较为明确, 具有局部守恒性, 且适用于任何网格类型, 因此, 广泛应用于计算流体动力学分析(包括铸造充型过程模拟)^[103]。虽然 FVM 适用于任何网格类型, 但并不代表任何网格类型下的 FVM 求解精度(主要是流场求解)是一致的, 从流场计算的角度来说, 自适应六面体网格下的 FVM 求解精度是最好的。目前已有较多基于 FVM 的优秀流场开源代码可供使用, 如 OpenFVM^[104]、OpenFOAM^[105]等。

无网格算法(如 SPH)的主要思想是将连续介质用相互作用的质点组来描述, 各个物质点上承载各种物理量, 通过求解质点组的动力学方程和跟踪每个质点的运动轨道, 获得整个系统的力学行为。无网格算法的准确性主要取决于粒子数目的多少, 近年来随着计算能力(尤其是 GPU 运算)的提高, 无网格算法的准确性越来越高。无网格算法主要应用于铸造充型过程模拟^[106], 目前已有一些基于 SPH 的优秀开源代码可供使用, 如 GPUSPH^[107]、DualSPHysics^[108]等。

上述数值求解算法(FDM、FEM、FVM 和 SPH)的差别主要体现在对控制方程的离散方式。对于流动场数值模拟而言, 另一需要重要关注的方面是针对 Navier-Stokes 方程的数值解法, 图 1-9 为目前针对 Navier-Stokes 方程的主要数值解法^[109]。其中, 铸造充型过程数值模拟主要采用压力修正法。

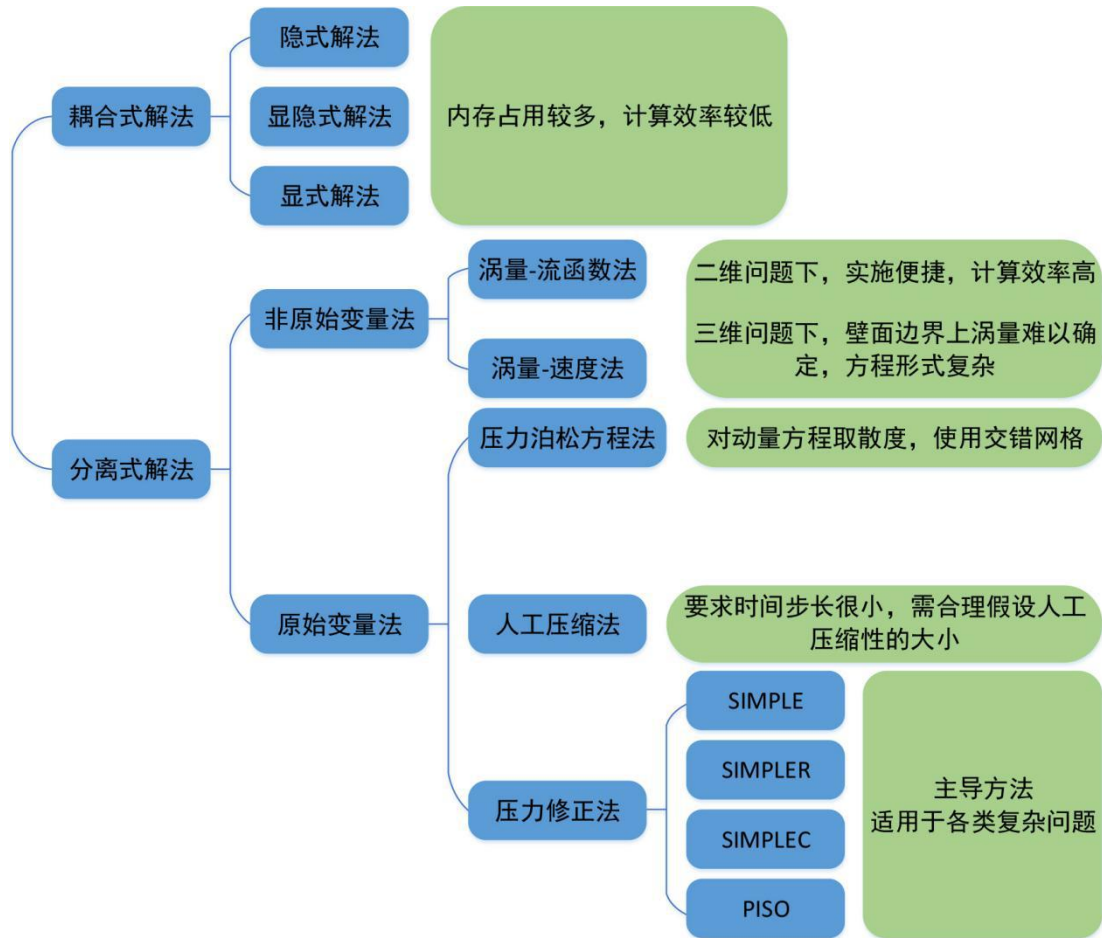


图 1-9 针对 Navier-Stokes 方程的主要数值解法^[109]

Fig. 1-9 Main numerical solutions to Navier-Stokes equation^[109]

1.3 冷隔缺陷预测研究现状

冷隔是铸造生产中常见的缺陷，显著降低铸件的表面精度和力学性能，严重时导致铸件开裂，甚至直接报废。铸造充型过程中，由于浇注温度低、铸型激冷过度、浇注系统不合理等原因，使得两股金属液交汇时，其中一股液面前沿已部分凝固，最终该部位金属熔合不充分，形成冷隔，进而严重影响铸件的表面质量和力学性能。图 1-10 为铸件冷隔缺陷的实际图片，从图中可以明显看出，冷隔缺陷一方面严重影响铸件表面形态，另一方面造成铸件组织结构的不连续性，使得铸件在使用过程中，极易在冷隔缺陷位置出现应力集中，并形成裂纹源。

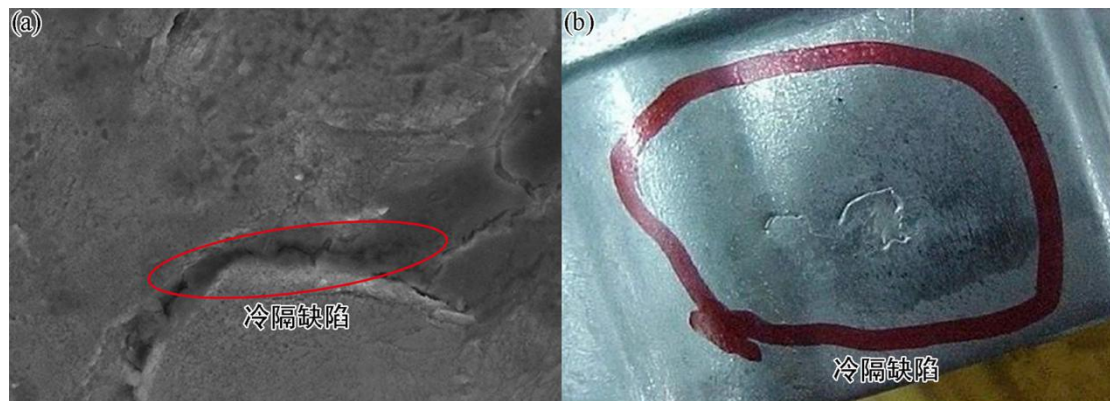


图 1-10 实际冷隔缺陷: (a) 压铸件; (b) 重力铸件

Fig. 1-10 Actual cold shut defect: (a) die casting; (b) gravity casting

目前在实际铸造生产过程中,主要通过实验的手段来分析和预防冷隔缺陷。Jadhav 等^[110]针对灰铸铁汽车缸体件,提出了一套用于分析和减少其冷隔缺陷的实验方法,该方法包括七个部分的分析工序。通过实验分析得出,冷隔缺陷的产生与否并不主要由浇注系统决定,减少冷隔缺陷的主要方法是控制合金成分和浇注温度。由此可见,实际铸造生产过程中冷隔缺陷的影响因素多,且相互之间的作用复杂。实验分析手段虽然能从一定程度上控制冷隔缺陷,但并不能从实质上揭示冷隔缺陷的演变过程。最主要的原因是,冷隔缺陷是在铸造充型过程中形成的,此时模具内部的金属液处于高温流动状态,目前实验手段只能测量和分析铸件最终的冷隔分布,难以直接观测充型过程中冷隔的形成和演变过程。因此,借助于数值模拟手段预测冷隔缺陷的演化过程,对提高铸件整体性能和优化铸造工艺有着十分重要的作用。

在目前预测铸件冷隔缺陷的领域中,可查阅到的研究资料尚少,分析方法主要为:

- ① 结合温度场和流动场模拟结果间接预测冷隔;
- ② 采用简单判据。

(1) 间接预测方法

所谓的间接预测方法,认为冷隔缺陷主要受两个因素(充型过程中金属液界面前沿的凝固状态和界面前沿之间的碰撞)的影响,由于未对冷隔缺陷进行直接地计算,于是通过温度场模拟结果来获得金属液界面前沿的凝固状态,通过流动场模拟结果来获得界面前沿之间的碰撞,综合两者来估计可能的冷隔缺陷分布。

Xiao 等^[111]针对灰铁铸件的水平叠加铸造生产,借助数值模拟手段优化其浇注系统设计,减少了铸件冷隔缺陷。当相关铸造工艺中出现冷隔缺陷,提出了三个解决措施:① 适当降低水平浇道的充型速度,如选取低空隙率的过滤器、加大水平浇道的截面积等;② 采用具有非均匀横截面的水平浇道;③ 相对于浇注入口,适当提

升水平叠加模具另一端的高度。Lee 等^[112]研究了直接挤压铸造过程中，浇注温度对涡旋压缩机铸件的冷隔缺陷的影响。研究表明，随着浇注温度的提高，涡旋压缩机铸件的冷隔缺陷反而越发明显，图 1-11 为不同浇注温度下铸件冷隔缺陷的实际分布。一般认为，较高的浇注温度下的金属流动性较好，冷隔缺陷应当较少。而此研究中，随着浇注温度的提高，金属液更早地接触下模并快速凝固，形成初始的光滑表面，后续挤压过程中难以与其他金属相形成连续平整的表面(形成冷隔缺陷)。Vazquez 等^[113]根据商用化模拟软件计算的流动场和温度场结果，并结合实验结果，发现随着铸型倾斜角度增加，冷隔缺陷明显增加。上述研究均依据温度场和流动场模拟结果间接预测冷隔缺陷，针对个别铸造工艺取得了一定程度上的实用效果，但此类分析方法受不同铸造工艺的影响因素过多，缺乏可推广性。

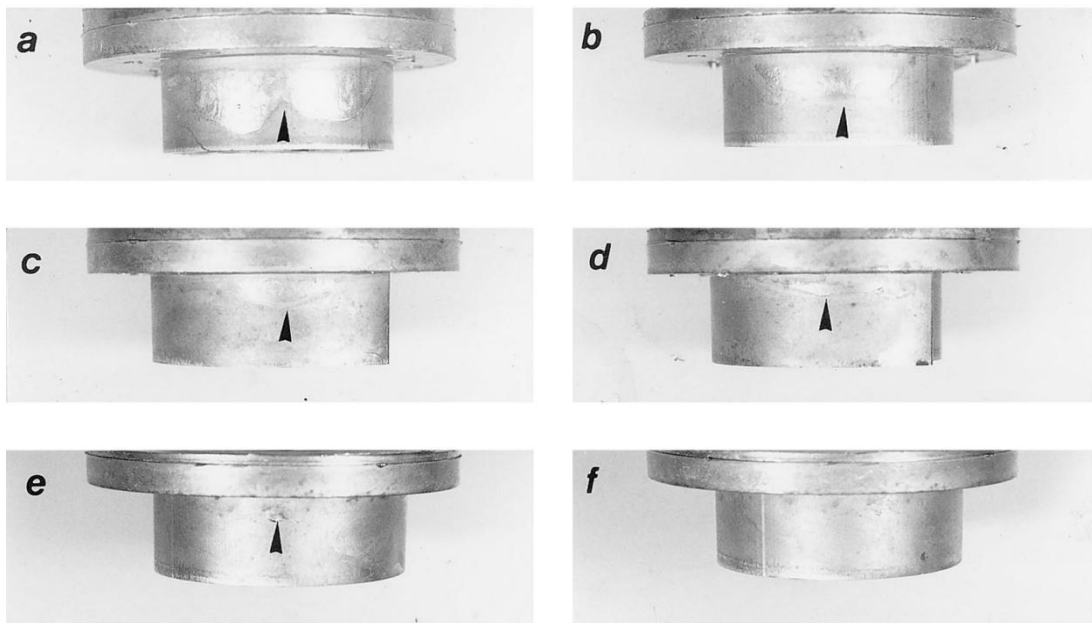


图 1-11 不同浇注温度下涡旋压缩机铸件的冷隔缺陷分布^[112](图中黑色箭头表示冷却缺陷位置):

(a) 800°C; (b) 750°C; (c) 700°C; (d) 670°C; (e) 650°C; (f) 600°C

Fig. 1-11 Distribution of cold shut defects in scroll compressor castings at different pouring temperatures^[112](the black arrow in the figure indicates the location of cooling defects): (a) 800°C; (b) 750°C; (c) 700°C; (d) 670°C; (e) 650°C; (f) 600°C

(2) 简单冷隔判据

所谓的简单冷隔判据，是结合实际铸造生产工艺或数值模拟结果，提出能够判断冷隔生成与否的依据。秦永健等^[114]采用数值模拟与试验观察相结合的方法，确立了

双辊铸造不锈钢薄带出现冷隔缺陷的预测判据，并通过试验结果对该判据进行考核和验证。得出的冷隔判据为：当熔池表面向弯月面过渡的转折点处的临界固相分数大于 0.45 时，SUS304 不锈钢铸带就会出现冷隔缺陷。此判据具有一定的实用性，但不适用于其他铸造工艺。

上述研究中，间接预测方法只能针对个别铸造工艺进行分析，未得出冷隔缺陷演变过程的普遍性规律，因此很难得到推广。冷隔判据方面，目前还未提出有效的冷隔缺陷预测指标。因此，在深入理解冷隔缺陷演化机理的基础上，提出合理全面的冷隔缺陷定量化预测模型，对科学有效地控制冷隔缺陷具有很大的帮助。

1.4 氧化夹渣缺陷预测研究现状

氧化夹渣是铸造生产中常见的缺陷，显著降低铸件的表面精度，严重时导致铸件开裂，甚至直接报废。由于金属液易被空气氧化，在充型开始的瞬间，液面前沿会立即生成一层极薄的氧化膜，并不断变厚。在金属液充型过程中，一部分氧化膜粘附在铸型壁面上并不断累积，累积到一定程度之后就会影响铸件表面质量。另一部分氧化膜被卷入金属液内部而形成氧化夹渣，作为异质形核基底和影响铸件补缩，诱发气孔和孔松缺陷，不仅降低铸件力学性能，还会在服役过程中引发疲劳裂纹。

Samuel 等^[115]通过实验研究了氧化物对 Al-Si 合金凝固过程中缩孔缩松形成的影响，发现氧化物薄膜与铸件内部大的孔洞之间具有较大的关联，同时氧化物薄膜也可以作为其他显微组织成份的形核基底。Liu 等^[116]针对 A356 铝合金低压铸造工艺，研究了浇注速度对铸件氧化夹渣缺陷的影响，发现高的浇注速度下充型过程中会出现涡流，使得氧化膜卷入铸件内部，降低铸件机械性能。Kwon 等^[117]通过在空气中搅拌正常的 A356 铝合金熔液，获得含有较多氧化夹渣的铝合金金属液，并将其与正常的铝合金熔液进行流动性测量实验，发现含有较多氧化夹渣的金属液的流动性明显较差。Cao 等^[118]综述了铝合金铸造过程中氧化夹渣的形成机理和影响因素，并对铝合金铸件中的氧化夹渣缺陷的判断标准、缺陷形态等做了相应说明。图 1-12 为某铝合金铸件拉伸断裂相对面的二次电子像，从图中可以明显看出，铸件断裂的起源即为氧化夹渣所在的位置。

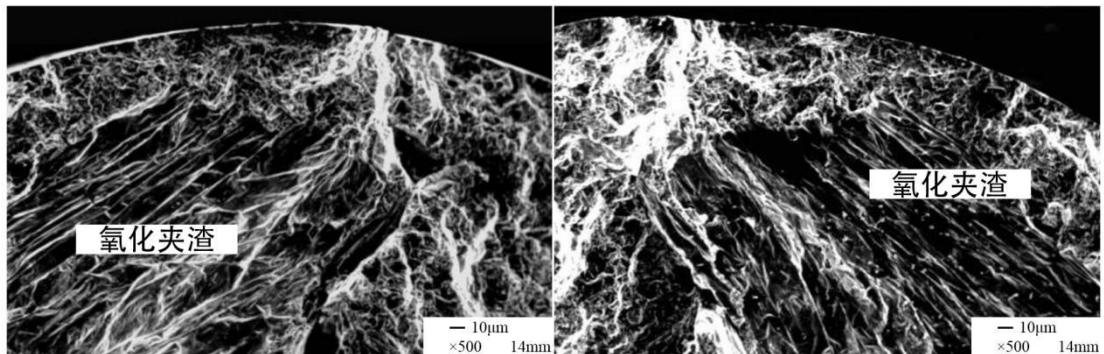


图 1-12 某铝合金铸件拉伸断裂相对面的二次电子像^[118]

Fig. 1-12 Secondary electron image of the tensile fracture surface of an aluminum alloy casting^[118]

通过上述分析可知，氧化夹渣的生成是一复杂化学反应过程，同时氧化夹渣具有较强的壁面粘附性。由于氧化夹渣的生成和演变过程是处于一高温流动状态，目前实验手段只能测量和分析铸件最终的氧化夹渣分布，难以直接观测充型过程中氧化夹渣的形成和演变过程，因而数值模拟手段具有重要的作用。在目前预测铸件氧化夹渣缺陷的领域中，国内外学者提出了较多各具特色的模拟方法^[119-122]，总体上可分为三大类：① 判据模型；② 标量模型；③ 欧拉-拉格朗日模型。

(1) 判据模型

所谓的判据模型，不直接计算氧化夹渣缺陷，而是考虑影响氧化夹渣的主要因素，并结合已有的数值计算结果，间接地得到氧化夹渣缺陷可能的分布。Lai 等^[123]针对轻合金铸造过程氧化夹渣缺陷的形成，将充型过程中由于自由表面的翻卷折叠而产生瞬态自由表面与平稳充型时的自由表面面积之差，即“过剩”自由表面面积，作为氧化夹渣卷入的判据。“过剩”自由表面面积越大，则产生氧化夹渣卷入的可能性就越大。图 1-13 为结合模拟结果和理论计算得到的充型过程中的“过剩”自由表面面积，从图中可以得出不同浇注速度和不同充型时刻下形成氧化夹渣缺陷的相对趋势。Campbell 等^[124]通过研究铝合金铸件的氧化夹渣缺陷，总结出当铝合金金属液自由表面流速超过 0.5 m/s 时，将产生紊态自由表面，进而生成氧化夹渣，于是得出铝合金金属液表面发生氧化膜卷入的临界速度为 0.5 m/s。上述模拟方法只能考虑自由表面附近氧化夹渣卷入的累积效应，并未追踪后续氧化夹渣随金属液的流动，而且只能用于判断氧化夹渣缺陷的整体情况，因而无法预测铸件最终的氧化夹渣分布，而且当铸件形状复杂时，难以确定自由表面流速以及平稳充型时的自由表面面积。

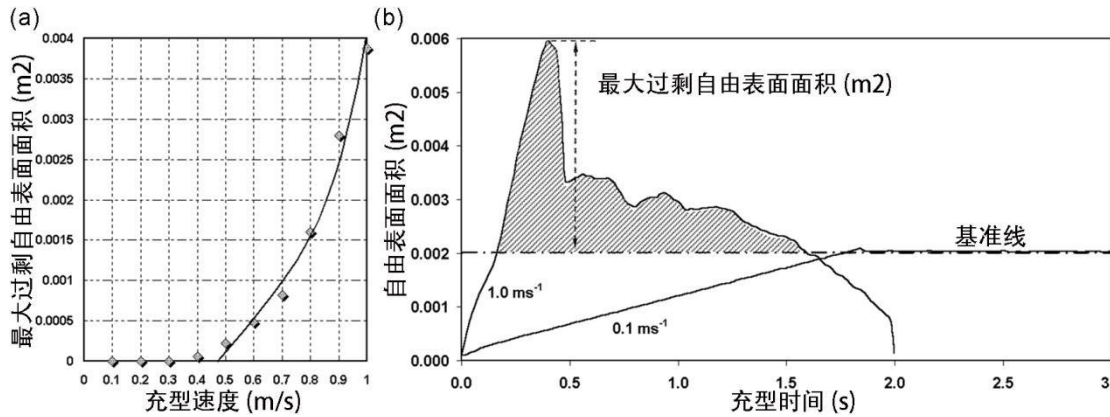


图 1-13 充型过程中的“过剩”自由表面面积^[123]: (a) 不同充型速度下最大的“过剩”自由表面面积; (b) 不同充型时刻下的“过剩”自由表面面积

Fig. 1-13 “Excess” free surface area during filling process^[123]: (a) maximum “surplus” free surface area at different filling rates; (b) “excess” free surface area at different filling times

(2) 标量模型

所谓的标量模型,是采用一标量场来记录氧化夹渣分布,并通过输运方程来计算氧化夹渣缺陷随金属液的流动,从而给出氧化夹渣在铸件内部的分布情况。不同标量模型之间的区别在于所采用的氧化夹渣生成速率计算模型不同。Barkhudarov 等^[125]认为自由表面上氧化夹渣的生成量随紊态自由表面的波动变形和折叠而逐渐积累,且呈匀速递增趋势。Dai 等^[126]针对不同浇注系统下铝合金充型过程,借助铸造模拟软件计算了铸件氧化夹渣缺陷分布,但计算过程中只考虑了充型速度对氧化夹渣的影响。图 1-14 为其采用标量运输模型计算的不同浇注系统下铸件氧化夹渣缺陷的分布情况。赵海东^[127]针对铝合金铸造充型过程中氧化膜的卷入现象,通过判断自由表面的碰撞,提出了氧化膜破碎与卷入,以及破碎氧化膜随液态金属流动的数学模型,以预测充型过程氧化膜的卷入。并对实验铝合金铸件进行了模拟应用,使用特殊 X 射线装置对该铸件实际充型过程及自由表面进行了实时观察验证,对氧化膜卷入的模拟结果进行了验证分析和讨论。Backer 等^[128]采用 Campbell 的实验结果^[124]作为氧化夹渣的生成依据,求解相应的标量场方程,得到铝合金氧化夹渣缺陷分布。上述模拟方法能够追踪氧化夹渣在铸件内部的运动,从而预测铸件内部氧化夹渣的最终分布,但由于没有考虑氧化膜与铸型壁面之间的粘附现象,因而无法给出壁面上的氧化夹渣缺陷分布。

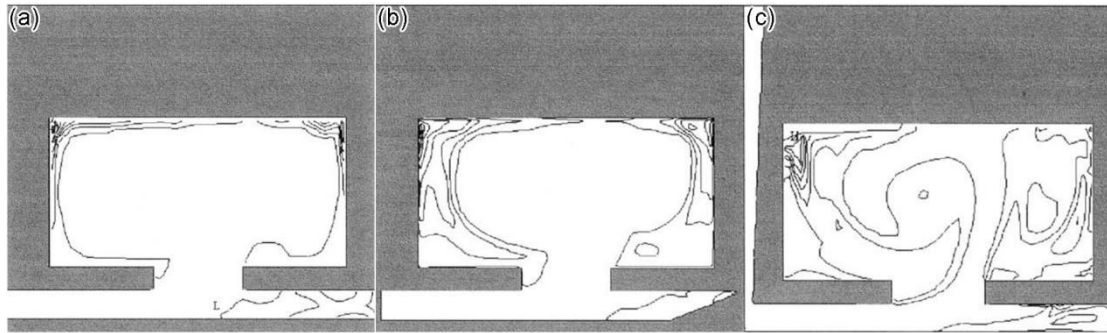


图 1-14 不同浇注系统下铸件氧化夹渣缺陷的分布情况^[126]: (a) 涡流浇道; (b) 矩形浇道; (c) 三角形浇道

Fig. 1-14 The distribution of oxide inclusion defects in different casting systems^[126]: (a) vortex runner; (b) rectangular runner; (c) triangle runner

(3) 欧拉-拉格朗日模型

所谓的欧拉-拉格朗日模型，是将宏观的流体模型和离散颗粒动力学模型相结合，即采用欧拉模型计算连续性充型过程，采用离散颗粒代替氧化夹渣，通过离散颗粒与连续性充型过程的耦合，获得氧化夹渣缺陷的运动和分布。Dai 等^[129, 130]认为铸件内部氧化夹渣的形成主要与金属液界面前沿的折叠有关，在采用欧拉模型计算充型过程的基础上，针对二维流动情形，提出了界面前沿折叠判据，作为氧化夹渣的生成依据，并采用离散颗粒来表征氧化夹渣后续的运动过程。提出了二维“Oxide Film Entrainment Tracking” (OFET, 2-D)算法，计算充型过程中氧化夹渣的运动和卷入等现象。图 1-15 为不同浇注系统下采用 OFET 算法计算得到的氧化夹渣缺陷分布。徐玉桥等^[131]采用欧拉-拉格朗日模型对金属液和夹杂物注入型腔的运动过程以及夹杂物的集聚位置进行了二维数值模拟，并通过水模拟实验进行了验证。Reilly 等^[132]采用颗粒追踪的方法，并依据“Boolean Logic Criteria”来判定自由表面是否发生氧化夹渣的卷入。上述模拟方法能够显式追踪氧化夹渣的运动，但采用离散颗粒来等效连续氧化膜的准确性有待进一步验证，同时，复杂情形下需要大量离散颗粒来保证计算精度，而大量粒子所带来的计算效率难以保证。

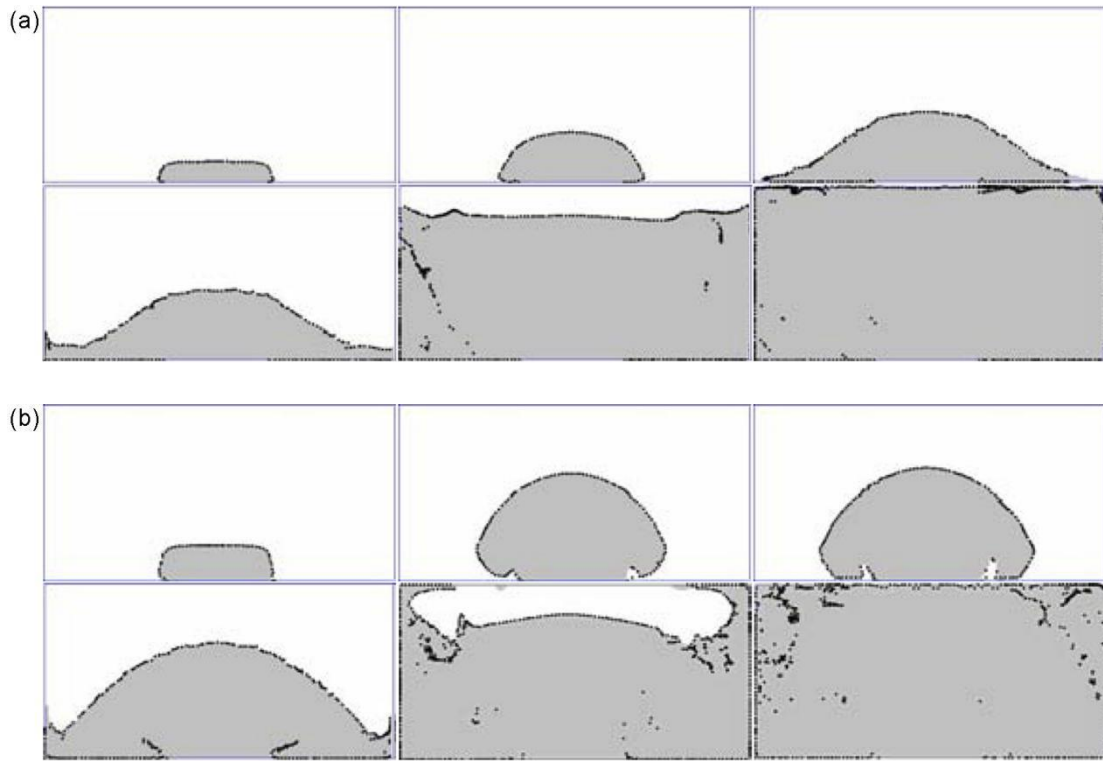


图 1-15 不同浇注系统下采用 OFET 算法计算得到的氧化夹渣缺陷分布^[130]: (a) 涡流浇道; (b) 矩形浇道

Fig. 1-15 Oxide inclusion defect distributions calculated by OFET algorithm under different gating systems^[130]: (a) vortex runner; (b) rectangular runner

正如 Campbell 于 2006 年所言 “the use of entrainment models to optimise filling systems designs for castings has huge commercial potential that has so far being neglected by modellers”^[122], 氧化夹渣的预测对优化实际铸造工艺具有巨大的潜在应用价值。通过上述综述可知, 标量模型是目前可行性和实用性最高的方法, 准确预测铸造过程中氧化夹渣缺陷的关键是计算氧化夹渣生成速率和处理壁面粘附现象, 而目前相关研究仍处于初步阶段。因此, 提出更为合理全面的氧化夹渣预测模型, 定量化预测氧化夹渣缺陷, 对提高铸件整体性能和优化铸造工艺有着十分巨大的价值。

1.5 本领域目前存在的不足之处

近年来, 针对铸造充型过程中成形类缺陷(卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣)数值模拟的各个方面, 理论及实验研究成果丰硕, 但仍然存在一些不足之处, 主要体现

在如下四个方面：

(1) **缺乏适用于铸造充型过程的、全面合理的流动行为计算模型。**铸造充型过程中，尤其是在采用金属型模具、铸件具有薄壁结构等情形下，金属液往往会发生糊状区转变，使得金属相的流动行为发生转变。目前主要采用的流动行为计算模型(临界固相率方法、变粘度模型和多孔介质拖拽模型)只较好地处理了部分糊状区的流动行为，均具有一定的局限性。因此，有待于发展适用于铸造充型过程中金属相全部糊状区状态的流动行为计算模型。

(2) **缺乏全面合理的冷隔缺陷预测模型。**铸造充型过程中，冷隔缺陷的产生与金属相界面前沿的凝固状态和流动情形有关。目前主要采用的冷隔缺陷预测模型(间接预测方法和简单冷隔判据)均只能间接地给出产生冷隔缺陷的可能性，未能充分利用数值模拟技术的优势，且相关预测模型大多只适用于单个铸造工艺，缺乏可推广性。因此，有待于发展更为全面合理的、且具有推广性的冷隔缺陷定量化预测模型。

(3) **缺乏全面合理的氧化夹渣缺陷预测模型。**铸造充型过程中，起初金属液界面前沿会生成一层极薄的氧化膜，并不断变厚。后续流动过程中，一部分氧化膜粘附在铸型壁面上并不断累积，另一部分氧化膜被卷入金属液内部而形成氧化夹渣。目前主要采用的氧化夹渣缺陷预测模型(判据模型、标量模型和欧拉-拉格朗日模型)中，最具可行性和实用性的方法是标量模型，但已有的标量模型大多只考虑了充型速度对氧化夹渣缺陷的影响，且未考虑氧化膜与铸型壁面之间的粘附现象。因此，有待于发展更为全面合理的氧化夹渣缺陷标量模型。

(4) **缺乏对铸造充型过程中成形类缺陷的系统研究。**随着铸造宏观过程数值模拟技术的日益完善，缺陷预测与优化工艺已逐渐成为模拟分析所关心的重点。但目前铸造模拟软件和相关学术研究主要集中于铸件凝固及应力演变过程中所产生的缺陷，未对铸造充型过程中成形类缺陷(卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣)进行系统研究(演化机理、预测模型和实验研究等)。因此，有待于从数值模拟和实验研究两个方面，系统化研究铸造充型过程中的成形类缺陷。

1.6 本文研究内容及研究目标

本文的研究目标是针对铸造充型过程中的成形类缺陷(卷气、浇不足、冷隔和氧化夹渣)，在深入理解其演化机理的基础上，建立相应的全面合理的缺陷预测模型，

为准确预测和控制铸造充型过程中成形类缺陷提供科学分析手段。提出一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型，有效地处理液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。采用气液固多相流模型，计算充型过程中“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合流动过程，准确预测卷气和浇不足缺陷。提出一考虑金属相固相率、速度和金属相体积比的冷隔生成模型，用于定量化预测充型过程中冷隔的演变过程。提出一考虑金属液体积比、温度和当前氧化夹渣密度的生成速率模型，用于定量化预测充型过程中氧化夹渣的演变过程。

结合上述研究目标，本文主要的研究内容如下：

(1) 考虑到目前的流动行为计算模型只较好地处理了部分糊状区的流动行为，具有一定的局限性。本文拟提出一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型，有效地处理液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。拟采用气液固多相流模型，计算充型过程中“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合流动过程，准确预测卷气和浇不足缺陷。借助于两个充型基准实验(S型模具水模拟实验和铝合金基准件充型实验)，验证本文流动场模型基础算法(气液两相流计算)的准确性。借助于不同糊状区流动模型下底注式铸造工艺计算结果对比及分析，验证本文糊状区流动行为计算模型的合理性。

(2) 准确预测冷隔缺陷的关键在于寻找流动界面前沿、判断界面前沿碰撞以及定义冷隔生成模型。本文拟提出一考虑金属相固相率、速度和金属相体积比的冷隔生成模型，并提出一用于判断界面前沿及其碰撞的方法。在已建立的气液固多相流模型的基础上，拟开发准确预测充型过程中冷隔缺陷的求解器。

(3) 准确预测氧化夹渣缺陷的关键是计算氧化夹渣生成速率和处理壁面粘附现象。本文拟提出一考虑金属相体积比、温度和当前氧化夹渣密度的生成速率模型，并提出一边界条件用于处理氧化夹渣在壁面上的粘附和累积。在已建立的气液固多相流模型的基础上，拟开发准确预测充型过程中氧化夹渣缺陷的求解器。

(4) 计算多壁厚铜合金低压铸造工艺实验，分析不同壁厚下充型高度的差异，验证本文浇不足预测模型的准确性。计算不同浇道下锌合金高压铸造工艺实验，分析不同浇道对铸件卷气的影响，验证本文卷气预测模型的准确性。计算不同浇道下铜合金低压铸造工艺实验，分析不同浇道对铸件冷隔的影响，验证本文冷隔预测模型的准确性。计算不同浇道下铝合金铸造工艺和铜合金低压铸造工艺实验，分析不同铸造工艺对铸件氧化夹渣的影响，验证本文氧化夹渣预测模型的准确性。

图 1-16 为本文针对铸造充型过程中成形类缺陷演化机理及数值模拟的研究路线。



图 1-16 铸造充型过程中成形类缺陷演化机理及数值模拟的研究路线图

Fig. 1-16 Research roadmap for evolutionary mechanism and numerical simulation of forming defects in casting filling process

结合图 1-16 所示的研究路线，本文后续的章节安排如下：

(1) 第 2 章：提出一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型，用于处理液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。采用气液固多相流耦合模型计算铸造充型过程。借助于两个充型基准实验，验证本文流动场模型基础算法的准确性。借助于不同糊状区流动模型下底注式铸造工艺计算结果对比及分析，验证本文糊状区流动行为计算模型的合理性。

(2) 第 3 章：提出一考虑金属相固相率、速度和金属相体积比的冷隔生成模型，并提出一用于判断界面前沿及其碰撞的方法。在已建立的气液固多相流模型基础上，开发准确预测充型过程中冷隔缺陷的求解器。

(3) 第 4 章：提出一考虑金属液体积比、温度和当前氧化夹渣密度的生成速率模型，并提出一边界条件用于处理氧化夹渣在壁面上的粘附和累积。在已建立的气液固多相流模型基础上，开发准确预测充型过程中氧化夹渣缺陷的求解器。

(4) 第 5 章：针对多个实际铸造工艺，验证本文的铸造充型过程中成形类缺陷数值模拟技术的可行性和实用性。

(5) 第 6 章：本文研究工作的总结及后续研究工作的展望。

第 2 章 铸造充型过程流动数学模型及数值计算方法

2.1 引言

在目前铸造 CAE 领域中, 往往认为金属相在整个铸造充型过程中具有很好的流动性, 于是, 在金属的流动物性参数库中设置恒定的或随温度变化的动力粘度, 以描述金属相在整个铸造充型过程中的流动行为。但是, 在实际铸造过程中, 尤其是在采用金属型模具、铸件具有薄壁结构等情形下, 金属相往往在充型过程中就发生由液相向固相的转变。而单一的动力粘度的变化无法表征金属相在发生相变过程中的流动行为的转变, 这也是造成当前铸造数值模拟与实际生产之间, 很难在浇不足缺陷预测方面达成一致的主要原因。

除少数的特殊铸造工艺(如真空铸造等)以外, 铸造充型过程是典型的多相流问题, 涉及到金属相的液固转变、空气与金属相之间的耦合作用(如气体阻碍金属相流动、气体卷入金属液等)。但是, 为了保证流动场计算效率和稳定性, 目前市面上几乎所有的铸造模拟软件均采用单相流模型计算铸造充型过程, 甚至大多数软件不需要设置出气口, 这也是造成当前铸造模拟软件在卷气缺陷预测方面, 难以达到实用化要求的主要原因。在相关学术研究方面, 采用两相流模型计算铸造充型过程的技术已较为成熟, 但未考虑“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合作用。

铸造充型过程数值模拟的本质是 CFD 领域中的气液两相流计算, 而气液两相流计算也是 CFD 领域中最基本的计算分支之一。尽管与气液两相流计算相关的研究已持续了近 60 年^[103], 但目前仍未形成一致认可的气液两相流计算模型和求解方法。其原因在于, 气液两相流计算所涉及的许多难点, 如对流项的离散、精确界面前沿表征、质量耗散的控制、求解算法与网格的匹配等, 都是 CFD 领域的普遍性问题。由此可见, 完全从最底层的 CFD 算法开始研究铸造充型过程数值模拟技术, 是一件需要耗费大量精力的研究工程, 这也是阻碍铸造充型过程数值模拟技术得到更为深入的研究(如各类缺陷的定量化预测等)的主要原因。

因此, 为了深入地研究铸造充型过程中成形类缺陷数值模拟技术, 本文在计算流体力学开源代码 OpenFOAM 的基础上, 进行铸造充型过程相关求解器的开发。为了更为合理地描述金属相在整个铸造充型过程中的流动行为, 本文提出一基于固相率

变化的糊状区流动行为计算模型，有效地处理液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。为了准确地预测卷气缺陷，本文采用气液固多相流数学模型计算铸造充型过程。并借助于相关的基准实验和模拟分析结果，证明本文的铸造充型过程流动数学模型的准确性和合理性。

2.2 基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型

从传热学的角度分析，铸造充型过程中，热量的传输过程主要包括：金属液、铸型及空气内部的热传导、合金潜热的释放、金属液与铸型及空气间的对流换热、铸型与空气间的对流换热。图 2-1 为铸造充型过程示意图，从图中可知，当浇注合金不变时，决定金属液温度变化快慢的主要因素是金属液与铸型及空气间的对流换热。考虑到空气的热传导能力很低，所以基本上可以认为金属液与铸型的对流换热能力，决定了充型过程中金属液的降温快慢。尤其是在采用金属型模具、铸件具有薄壁结构等情形下，金属液前端已接触铸型壁面，且金属液内部缺少热量的补充，从而使得金属液前端或铸件薄壁部位降温较快，发生由液相向固相的转变，即进行所谓的糊状区转变。由此可见，考虑糊状区转变对金属相流动行为的影响，对提高铸造充型过程数值模拟的准确性具有重要的作用。

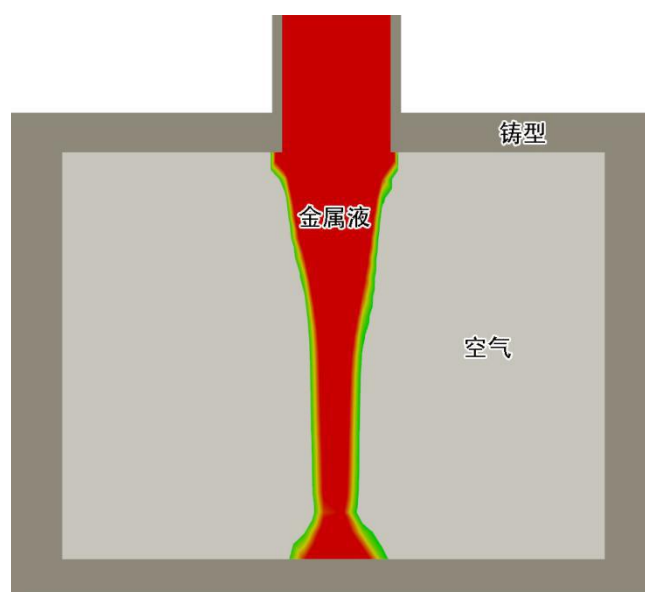


图 2-1 铸造充型过程示意图

Fig. 2-1 Casting filling process diagram

在计算液固转变对流动行为的影响之前,需了解铸造充型过程中糊状区对流动行为的影响机理^[133],即枝晶生长与流动液相之间的相互作用。需要说明的是,由于本文的研究重点是糊状区转变对流动行为的影响,而对于纯金属或具有窄凝固区间的金属而言,其糊状区转变是十分短暂的过程,使得糊状区转变对这类合金的流动行为影响不大,因此,本文的研究对象是具有宽凝固区间的铸造合金。另外,除一些特殊铸造工艺(如半固态铸造、挤压铸造和定向凝固等)以外,绝大部分铸造工艺中最终的铸态组织为柱状晶和树枝晶。对于铸造充型过程中的糊状区转变,由于晶粒在生长过程中会受到液态金属冲刷等作用,一般认为树枝晶的比例明显大于柱状晶的比例,因此,本文认为铸造充型过程中的糊状区转变是以树枝晶生长的形式进行的。

以树枝晶的生长过程来描述铸件充型过程中糊状区的演变,图 2-2 为流动液相中树枝晶形貌演变过程示意图。从图中可以看出,当枝晶刚开始生长时,枝晶间还未形成有效连接,不能对液相流动产生大的影响,枝晶会随着液相运动(图 2-2a);当枝晶生长到一定程度之后,枝晶间形成了相互连接,能对液相流动起到一定的阻碍作用,不过由于枝晶间连接还不是很充分,液相可以在枝晶间流动,枝晶也会受到液相的作用而运动(图 2-2b);当枝晶生长充分以后,枝晶间形成了牢固的连接,液相无法在枝晶间流动,枝晶对液相起到堵塞作用(图 2-2c)。

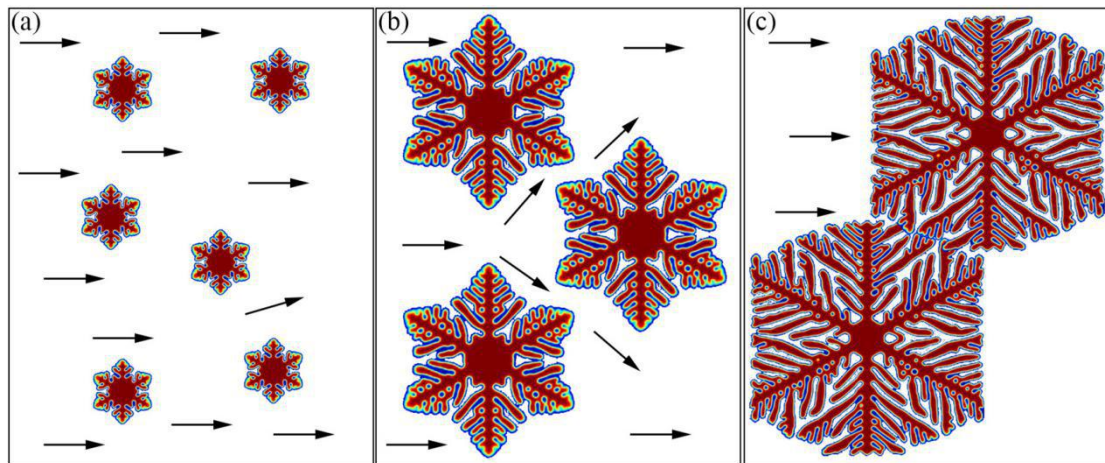


图 2-2 流动液相中树枝晶形貌演变过程示意图(图中箭头代表液相流动): (a) 枝晶开始生长阶段; (b) 枝晶逐渐长大阶段; (c) 枝晶充分生长阶段

Fig. 2-2 Schematics of the evolution process of dendrite morphology in fluid liquid: (a) starting stage of dendrite growth; (b) middle stage of dendrite growth; (c) final stage of dendrite growth

通过上述分析可知,液固转变对流动行为的影响可以分为三个阶段:① 枝晶开

始生长阶段；② 枝晶逐渐长大阶段；③ 枝晶充分生长阶段。首先定义两个参数：下临界固相率 S_{down} ，表示阶段①与阶段②的临界固相率；上临界固相率 S_{up} ，表示阶段②与阶段③的临界固相率。 S_{down} 和 S_{up} 需满足条件 $0 \leq S_{down} < S_{up} \leq 1$ ， S_{down} 和 S_{up} 的数值需结合实际实验来确定。为了便于后续分析，借鉴于 Flow-3D cast 软件(铝合金物性参数库)中相类似的参数^[134]，将 S_{down} 和 S_{up} 的数值分别设为 0.15 和 0.67。因此，根据固相率 ϕ 的变化，本文所采用的液固转变影响流动行为的计算模型分为如下三个部分。

(1) 枝晶开始生长阶段($\phi < S_{down}$)

当枝晶处于开始生长的阶段，即刚开始进行液固转变时，此时枝晶不能对液相流动产生大的影响，枝晶会随着液相运动。认为此时糊状区仍保持着液体的流动性质，可以通过增大金属液内部粘性力来体现枝晶对液相流动的影响。因此，本文采用由 Arnberg 提出的变粘度模型^[74]来计算此阶段糊状区的粘度变化：

$$\mu_e = \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{\phi}{S_{up}}\right)^{-1.55} \quad (2-1)$$

式中， μ_e 为糊状区等效动力粘度，单位为 Pa·s； μ_{liquid} 为液相动力粘度，单位为 Pa·s。

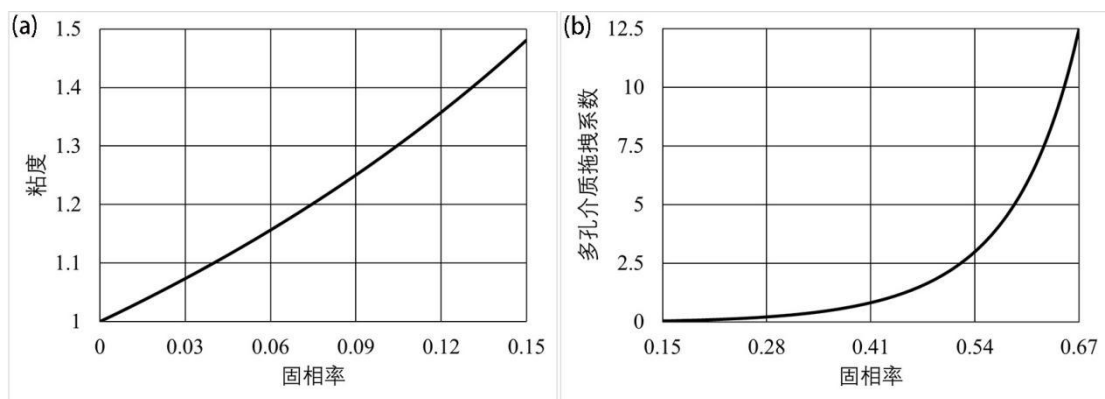


图 2-3 变粘度模型和多孔介质拖拽模型中固相率的影响：(a) 糊状区粘度随固相率的变化；(b) 多孔介质拖拽系数随固相率的变化

Fig. 2-3 Effect of solid phase fraction on the model of variable viscosity and drag of porous media: (a) the change of mushy zone viscosity with solid phase fraction; (b) the change of porous media drag coefficient with solid phase fraction

当认为液相动力粘度 μ_{liquid} 保持不变时，由式(2-1)可知，糊状区粘度随固相率的变化如图 2-3a 所示。从图中可以看出，糊状区粘度基本上随固相率线性增大，此阶段最终的动力粘度大约增加了 50%。

(2) 枝晶逐渐长大阶段($S_{down} \leq \phi \leq S_{up}$)

当枝晶处于逐渐长大的阶段，即液固转变进行到一定程度时，此时枝晶对液相流动起到一定的阻碍作用，液相可以在枝晶间流动，同时枝晶仍能在液相的作用下发生运动。认为此时的糊状区虽然能够如液体一样进行流动，但相比于液体而言，糊状区内部的流动阻力明显加大。可以将此时的糊状区等效为多孔介质，枝晶对液相流动的影响可以等效为多孔介质对液相流动的拖拽作用。因此，本文采用由 Carman 提出的 Carman-Kozeny 模型^[77]来计算多孔介质拖拽系数 F_ϕ ：

$$F_\phi = \rho_m D_{drag} \cdot \frac{\phi^2}{(1.0 - \phi)^3} \quad (2-2)$$

式中， ρ_m 为糊状区密度，单位为 kg/m^3 ； D_{drag} 为自定义常数，用于表征拖拽力的大小，具体取值需结合实际实验进行确定，单位为 s^{-1} 。需要说明的是，多孔介质拖拽系数 F_ϕ 后续用于表征多孔介质拖拽力，并添加至动量方程。

当认为糊状区密度 ρ_m 和自定义常数 D_{drag} 保持不变时，由式(2-2)可知，多孔介质拖拽系数随固相率的变化如图 2-3b 所示。从图中可以看出，多孔介质拖拽系数基本上随固相率指数增大。固相率处于较低阶段时， F_ϕ 随固相率的变化十分缓慢，此时糊状区对液相的拖拽作用还不明显。当固相率增加到一定程度后， F_ϕ 随固相率的增加而明显加大，此时糊状区对液相的拖拽力明显加大。

另外，此时多孔介质拖拽模型用于表征糊状区对液相流动的拖拽作用，但计算过程中仍然是将糊状区视为流体，因此，同样需要此时糊状区的动力粘度参数。本文认为此阶段的糊状区动力粘度 μ_e 为：

$$\mu_e = \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{S_{down}}{S_{up}} \right)^{-1.55} \quad (2-3)$$

(3) 枝晶充分生长阶段($\phi > S_{up}$)

当枝晶处于充分生长的阶段, 即液固转变进入到最后时刻, 枝晶间形成了牢固的连接, 液相无法在枝晶间流动。对于一般铸造过程(如重力铸造、熔模铸造等), 此时糊状区已与铸型壁面形成了牢固的接触连接, 可以认为此时的糊状区速度为零。对于一些特殊铸造过程(如连续铸造等), 由于铸造过程中对铸型施加了额外的作用力, 使得固相金属也能发生运动, 可以认为此时糊状区速度为对应的铸型壁面抽拉速度。因此, 本文在此阶段所采用的临界固相率方法为:

$$U_e = U_{pull} \quad (2-4)$$

式中, U_e 为糊状区速度, 单位为 m/s; U_{pull} 为铸型壁面抽拉速度, 单位为 m/s。对于一般铸造过程, U_{pull} 的数值为零。

综上所述, 结合不同糊状区阶段的流动行为计算方法(式(2-1)、式(2-2)、式(2-3)和式(2-4)), 本文所提出的基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型为:

$$\begin{aligned} \mu_e &= \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{\phi}{S_{up}} \right)^{-1.55} && (\phi < S_{down}) \\ F_\phi &= \rho_m D_{drag} \cdot \frac{\phi^2}{(1.0 - \phi)^3}, \mu_e = \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{S_{down}}{S_{up}} \right)^{-1.55} && (S_{down} \leq \phi \leq S_{up}) \\ U_e &= U_{pull} && (\phi > S_{up}) \end{aligned} \quad (2-5)$$

2.3 气液固多相流数学模型

从数值模拟的角度分析, 宏观层面上的计算流体力学的根源是三大物理定律: 质量守恒定律、能量守恒定律和牛顿第二定律。与之相对应, 铸造充型过程数值模拟所需求解的三类控制方程为: 连续性方程、能量方程和动量方程。其中, 最重要且最复杂的控制方程为动量方程, 而动量方程之所以最为复杂, 其原因是铸造充型过

程中金属液受力较为复杂。除去一些特殊的铸造工艺(如离心铸造、消失模铸造和真空铸造等),绝大部分铸造充型过程中,金属液受到的作用力包括:金属液内部压力、金属液内部粘性力、金属液-空气间表面张力、空气压力和重力,如图 2-4 所示。由此可见,所谓的气液固多相流数学模型,是在三类控制方程的基础上给出所有作用力的等效表达式。因此,将从以下三个方面对本文气液固多相流数学模型进行说明:① 界面前沿追踪及表面张力计算;② 气液固多相流模型(连续性方程、能量方程和动量方程);③ 边界条件及初始条件。

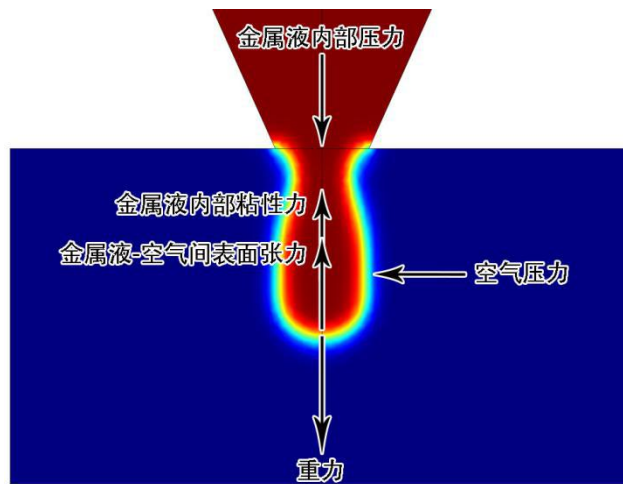


图 2-4 充型过程中金属液所受作用力

Fig. 2-4 The forces acting on the molten metal during filling process

2.3.1 界面前沿追踪及表面张力计算

界面前沿追踪是多相流数值模拟的关键之一,其重要性主要体现在两个方面:各相分布和界面前沿形态。所谓的各相分布,是铸造充型过程中金属相和空气所占据的空间位置。数值计算需要所有空间位置的材质信息,因此,准确的各相分布意味着准确的材质分布信息,这是得到准确计算结果的基础之一。所谓的界面前沿形态,是不同相之间的界面形状。由于表面张力的大小与界面形状密切相关,因此,准确的界面形状是准确地表征表面张力的基础之一。

界面前沿追踪分为显式界面追踪和隐式界面追踪。显式界面追踪直接跟踪界面运动情况,但很难处理复杂界面运动过程中几何拓扑变化。隐式界面追踪根据相体积比的变化来表征界面,易于处理复杂界面的几何拓扑变化以及考虑表面张力的影响,

其中应用最为广泛的是VOF(Volume of Fluid)算法^[135]。VOF算法中采用体积比因子 α 来表示不同位置上相1所占的体积分数，数值1表示该位置完全由相1占据，数值0表示完全由相2占据，界面处的数值在0与1之间。控制体积比 α 分布规律的方程为体积比方程：

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = 0 \quad (2-6)$$

式中， \mathbf{U} 为速度，m/s； t 为时间，s。

由式(2-6)可知，VOF算法求解得到的是各单元的体积比因子(图2-5a)，而无法直接得到计算表面张力所需的界面曲率和界面法向等信息。因此，需要在VOF算法的基础上提出获取准确分界面的计算方法。目前基于VOF算法，已发展了多个界面重构算法^[136]，其中，应用最为广泛的是PLIC(Piecewise Linear Interface Calculation)界面几何重构算法^[137]。所谓的PLIC算法，是在各单元的体积比因子的基础上，通过分段线性插值方法计算得到单元内分界面，进而获得计算表面张力所需的界面曲率和界面法向等信息(图2-5b)。

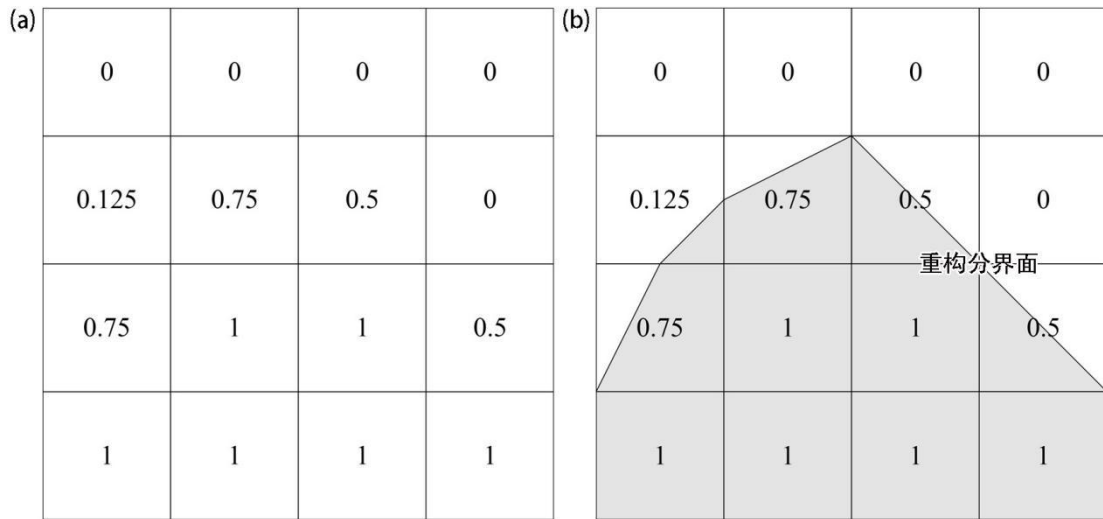


图 2-5 VOF-PLIC 算法示意图：(a) VOF 算法得到的单元体积比；(b) PLIC 算法得到的重构分界面

Fig. 2-5 VOF-PLIC algorithm schematic: (a) unit volume ratio obtained by VOF algorithm; (b) the reconstruction interface obtained by the PLIC algorithm

所谓的表面张力，是一种为了保持界面平衡而作用在每单位长度上的力。它是一种和界面相切的界面张力，表面张力的大小主要与流体的特性有关。在曲面中，均衡的流体表面张力和界面压力降相平衡。由 Young-Laplace 方程^[138]可知：

$$p_1 - p_2 = -C\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2-7)$$

式中, p_1 为相 1 在界面处的压力, Pa; p_2 为相 2 在界面处的压力, Pa; C 为表面张力系数, N/m; \mathbf{n} 为界面处的单位法向量, 其方向由相 2 指向相 1; $p_1 - p_2$ 代表界面压力降。

由于数值计算得到的界面体积比分布是连续的, 所以需要求得界面处不同位置的体积比分布, 才能求出对应的压力梯度, 进而得到等效的表面张力。在 Young-Laplace 方程的基础上, CSF (Continuum Surface force) 模型^[139]可在界面处获得连续的压力分布:

$$p_i = p_2 - \alpha_i C \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2-8)$$

式中, p_i 为界面处不同位置的体积比, Pa; α_i 为界面处不同位置的体积比。

对式(2-8)两端进行求导操作, 可得:

$$\nabla p_i = -\nabla \alpha_i C \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2-9)$$

由于在非界面区域内满足 $\nabla \alpha = 0$, 因此, 可将式(2-9)推广至整个流场区域:

$$\nabla p = -\nabla \alpha C \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2-10)$$

式中, p 为压力, Pa。

通过 α 的分布, 可以得到界面处的单位法向量 \mathbf{n} 为:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (2-11)$$

定义界面处的曲率 κ 为:

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2-12)$$

将式(2-12)代入式(2-10)可得:

$$\nabla p = \kappa C \nabla \alpha \quad (2-13)$$

式(2-13)的物理意义是界面处压力梯度由界面曲率、表面张力系数和体积比梯度决定。而在均衡的流体中, 表面张力与界面压力相平衡。因此, 由式(2-13)可得表面张力计算式为:

$$\mathbf{F}_\sigma = \kappa C \nabla \alpha \quad (2-14)$$

式中， F_σ 为界面处表面张力，Pa/m。

2.3.2 气液固多相流模型

通过上述理论推导，已得到基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型、界面前沿追踪算法以及表面张力计算模型。所谓的气液固多相流模型，是在 Navier-Stokes 方程的基础上，将上述模型进行整合。Navier-Stokes 方程即动量方程用于控制速度 U 的变化：

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \mu \nabla^2 U - \nabla p + S \quad (2-15)$$

式中， ρ 为密度，kg/m³； μ 为动力粘度，Pa·s； S 为源项。

由于式(2-15)需同时计算金属相和空气的速度和压力信息，因此，式中的密度 ρ 为混合密度：

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 = \alpha_1 \rho_1 + (1 - \alpha_1) \rho_2 \quad (2-16)$$

式中， α_1 和 α_2 分别为金属相和空气的体积比； ρ_1 和 ρ_2 分别为金属相和空气的密度，kg/m³。由混合密度 ρ 的处理可知，对于其他物性参数如动力粘度等，也采用同样的混合处理。

当金属相进入糊状区阶段时，由式(2-5)可知，金属相的粘度需要进行相应的变粘度处理：

$$\mu_e = \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{\phi}{S_{up}} \right)^{-1.55} \quad (\phi < S_{down}) \quad (2-17)$$

$$\mu_e = \mu_{liquid} \cdot \left(1.0 - \frac{S_{down}}{S_{up}} \right)^{-1.55} \quad (S_{down} \leq \phi \leq S_{up}) \quad (2-18)$$

当金属相处于液相状态时，结合式(2-14)可知，式(2-15)中的源项 S 为：

$$S = \rho g + F_\sigma = \rho g + \kappa C \nabla \alpha \quad (2-19)$$

式中， \mathbf{g} 为重力加速度， m/s^2 。

当金属相处于糊状区状态时，结合式(2-14)和式(2-5)可知，式(2-15)中的源项 \mathbf{S} 为：

$$\mathbf{S} = \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_\sigma - F_\phi (\mathbf{U} - \mathbf{U}_{pull}) = \rho \mathbf{g} + \kappa C \nabla \alpha - \rho_m D_{drag} \cdot \frac{\phi^2}{(1.0 - \phi)^3} (\mathbf{U} - \mathbf{U}_{pull}) \quad (2-20)$$

一般认为铸造充型过程中，金属相和空气均不可压缩。因此，可得代表质量守恒的连续性方程^[103]为：

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (2-21)$$

铸造充型过程中的温度场计算为典型性的对流-扩散问题，其控制方程为：

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}T) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho c} \nabla T \right) + S_T \quad (2-22)$$

式中， T 为温度， $^\circ\text{C}$ ； k 为导热系数， W/m/K ； c 为比热容， J/kg/K ； S_T 为热源项。

由于铸造充型过程中糊状区转变必定伴随着潜热的释放，本文采用等效比热法和温度校正法相结合共同处理潜热的释放^[140]。等效比热法中，采用等效比热容 c_e 代替式(2-22)中比热容 c ：

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}T) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho c_e} \nabla T \right) + S_T \quad (2-23)$$

$$c_e = \begin{cases} c + L/(T_L - T_S) & T_L \leq T \leq T_S \\ c & T > T_L \text{ 或 } T > T_S \end{cases} \quad (2-24)$$

式中， c_e 为等效比热容， J/kg/K ； T_L 为液相线温度， $^\circ\text{C}$ ； T_S 为固相线温度， $^\circ\text{C}$ ； L 为潜热， J/kg 。

温度校正处理的本质思想是：由于单个时间步长内的等效热容为一定值，其不一定能代表实际吸收或释放的能量，温度校正处理是对不一致的能量进行处理，使得计算程序满足能量守恒的原则。由于热容是针对单元而言的，因此校正处理中使用的各个温度均是针对单元而言的，温度校正处理分为如下 6 种情形。

(1) $T_n > T_L$ 降温至 $T_S \leq T_{n+1} \leq T_L$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_L + (T_{n+1} - T_L)c / c_e \quad (2-25)$$

(2) $T_S \leq T_n \leq T_L$ 降温至 $T_{n+1} < T_S$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_S + (T_{n+1} - T_S)c_e / c \quad (2-26)$$

(3) $T_n > T_L$ 降温至 $T_{n+1} < T_S$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_L + (T_{n+1} - T_L)c / c_e \quad (2-27)$$

如果 $T'_{n+1} < T_S$ ，需要进行第二次校正，校正两次所得温度值为：

$$T''_{n+1} = T_S + (T'_{n+1} - T_S)c_e / c \quad (2-28)$$

(4) $T_n < T_S$ 升温至 $T_S \leq T_{n+1} \leq T_L$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_S + (T_{n+1} - T_S)c / c_e \quad (2-29)$$

(5) $T_S \leq T_n \leq T_L$ 升温至 $T_{n+1} > T_L$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_L + (T_{n+1} - T_L)c_e / c \quad (2-30)$$

(6) $T_n < T_S$ 升温至 $T_{n+1} > T_L$ ，校正一次所得温度值为：

$$T'_{n+1} = T_S + (T_{n+1} - T_S)c / c_e \quad (2-31)$$

如果 $T'_{n+1} > T_L$ ，需要进行第二次校正，校正两次所得温度值为：

$$T''_{n+1} = T_L + (T'_{n+1} - T_L)c_e / c \quad (2-32)$$

式中， T_n 为上一时刻温度， $^{\circ}\text{C}$ ； T_{n+1} 为当前时刻温度， $^{\circ}\text{C}$ ； T'_{n+1} 为校正一次得到的温度， $^{\circ}\text{C}$ ； T''_{n+1} 为校正两次得到的温度， $^{\circ}\text{C}$ 。

2.3.2 边界条件及初始条件

边界条件及初始条件是数值计算得到唯一解的必要条件。通过上述控制方程可知，所求解的物理量包括：速度、压力、相分布和温度。本文认为初始时型腔内部为空气，边界区域分为进口、出口和壁面三个部分。表 2-1 为边界条件设置，表 2-2 为初始条件设置。

表 2-1 边界条件设置

Tab. 2-1 Boundary condition settings

物理量	进口	出口	壁面
速度	$\mathbf{U} = \mathbf{U}_{\text{进口}}$	$\nabla U_x = \nabla U_y = \nabla U_z = \{0, 0, 0\}$	$\mathbf{U} = \{0, 0, 0\}$
压力	$\nabla p = \{0, 0, 0\}$	$p = p_{\text{出口}}$	$\nabla p = \{0, 0, 0\}$
相 1	$\alpha = 1$	$\nabla \alpha = \{0, 0, 0\}$	$\nabla \alpha = \{0, 0, 0\}$
温度	$T = T_{\text{进口}}$	$\nabla T = \{0, 0, 0\}$	$\mathbf{n} \cdot \nabla T = \frac{(\alpha_1 h_1 + \alpha_2 h_2)(T_a - T)}{\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2}$

表中， $\mathbf{U}_{\text{进口}}$ 为进口速度，m/s； U_x, U_y, U_z 分别为速度在三个方向上的分量，m/s； $p_{\text{出口}}$ 为出口压力，Pa，一般设为标准大气压； $T_{\text{进口}}$ 为进口温度，℃，即浇注温度； h_1, h_2 分别为相 1 和相 2 与外界的换热系数，W/m²/K； k_1, k_2 分别为相 1 和相 2 的导热系数，W/m/K； T_a 为外界温度，℃。需要说明的是，出口的温度边界条件可以设为零梯度边界，也可设为空冷边界，两者对计算结果的影响差异不大。

表 2-2 初始条件设置

Tab. 2-2 Initial condition settings

物理量	初始条件
速度	$\mathbf{U} = \{0, 0, 0\}$
压力	$p = p_{\text{大气压}}$

相 1	$\alpha = 0$
温度	$T = T_{\text{室温}}$

表中， $p_{\text{大气压}}$ 为大气压力，Pa； $T_{\text{室温}}$ 为室温， $^{\circ}\text{C}$ 。

2.4 铸造充型过程数值计算方法

获得上述气液固多相流数学模型后，需求解相应的控制方程。目前在开源代码平台上已推出多个 CFD 开源包，其中，OpenFOAM 被公认为在计算准确性、可交互性以及可拓展性等方面最具优势，也是目前在 CFD 领域被使用最为广泛的开源代码，行业内甚至流传着“ANSYS Fluent 普及 CFD，OpenFOAM 定义 CFD”。OpenFOAM 所采用的流场离散算法为 FVM(绝大部分 CFD 开源代码所采用的算法)，因此，本文在 OpenFOAM 的基础上完成相关数值计算，下面将从以下四个方面说明本文铸造充型过程数值计算方法：① FVM 离散思想；② interFoam 求解器(OpenFOAM 中最基本的两相流求解器)；③ 自定义求解器；④ 数值计算流程。

2.4.1 FVM 离散思想

FVM 的离散思想是分别针对单个控制单元，对控制方程两端进行体积分，并进行相应的插值操作，最终获得可求解的离散式。为了更为明确地说明 FVM 离散思想，下面将说明动量方程(式(2-15))和连续性方程(式(2-21))的离散过程。

对式(2-15)两端体积分可得：

$$\int_{CV} \frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} dV + \int_{CV} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) dV = \int_{CV} \mu \nabla^2 \mathbf{U} dV - \int_{CV} \nabla p dV + \int_{CV} \mathbf{S} dV \quad (2-33)$$

式中， CV (Control Volume)代表单个控制单元。

Gauss 散度定理表示矢量场中体积分与面积分之间的一种变换关系：

$$\int_{CV} \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_A \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{F}_f dA \quad (2-34)$$

式中， A 代表控制单元的边界面； \mathbf{n}_f 为边界面的外法向单位向量； \mathbf{F} 为作用在空间

上矢量； f 表示矢量作用在边界面上。

将式(2-34)代入式(2-33)，可得：

$$\int_{CV} \frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} dV + \int_A \mathbf{n}_f \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U})_f dA = \int_A \mathbf{n}_f \cdot (\mu \nabla \mathbf{U})_f dA - \int_{CV} \nabla p dV + \int_{CV} \mathbf{S} dV \quad (2-35)$$

参照文献[103]中相关的离散操作，如扩散项采用 Mathur 等^[141]提出的扩散项离散公式，对流项采用高阶差分格式，速度和压力采用相同的存储位置(即控制单元体心)等，可得到动量方程的离散式为：

$$A_p \mathbf{U}_p = \sum_N A_N \mathbf{U}_N + \mathbf{B} + \sum_i A_i p_i \quad (2-36)$$

式中， \mathbf{U}_p 为当前控制单元的速度； \mathbf{U}_N 为与当前控制单元相接触的其他控制单元的速度； p_i 为当前控制单元加上与其相接触的其他控制单元的压力； A_p, A_N, A_i 分别为离散过程中得到的系数； \mathbf{B} 为离散过程中得到的常数项。由式(2-36)可知，控制单元 P 的体心速度可由与其相连的其他控制单元体心速度和压力求得。

对式(2-21)两端进行体积分可得：

$$\int_A \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{U}_f = 0 \quad (2-37)$$

采用 Mathur 等^[141]提出的控制面速度插值方案，对式(2-37)进行离散，可得连续性方程的离散式为：

$$\sum_i A_{p,i} p_i = S_p \quad (2-38)$$

式中， $A_{p,i}$ 为离散式的系数， S_p 为离散式的常数项。由式(2-38)可知，通过对控制面速度进行特殊插值处理，可将连续性方程变为离散的压力方程，从而实现动量方程与连续性方程的耦合求解。

2.4.2 interFoam 求解器

(1) OpenFOAM 源代码

OpenFOAM^[105]是与计算流体力学软件 ANSYS Fluent^[142]、CFX^[143]等相类似的 CFD 软件，但其是开源的，可视为一在 Linux 系统下运行的 CFD 类库。OpenFOAM

的前身为 FOAM(Field Operation and Manipulation), 后来作为开源代码得以公布, 可自由下载和传播其源代码。其开创者之一为 Jasak(克罗地亚人), 于 1993 年在就读博士学位期间着手 FOAM 的编写工作。目前 OpenFOAM 有两个版本, 一个官方版本由 Weller 维护, 另外一个 ext 版本由 Jasak 维护。

准确来说, OpenFOAM 是一个 C++类库, 用于创建可执行文件, 比如应用程序(application)。应用程序分为两类: 求解器(solver)与工具(utilities)。其中求解器是为了解决特定的连续介质力学问题而设计的, 工具则是为了执行包括数据操作等任务而设计的。OpenFOAM 包含了大量的求解器和工具, 牵涉的问题也比较广泛, 基本涵盖了所有 CFD 领域。OpenFOAM 采用 FVM 算法, 对网格类型几乎不做限制。需要说明的是, OpenFOAM 目前基本只能在 Linux 系统下运行, 虽然已推出了 Windows 下运行的版本, 但计算稳定性还有待提高。OpenFOAM 需要前处理和后处理环境, OpenFOAM 本身包含前处理和后处理接口, 以确保不同环境之间数据传输的一致性。图 2-6 为 OpenFOAM 的结构示意图。

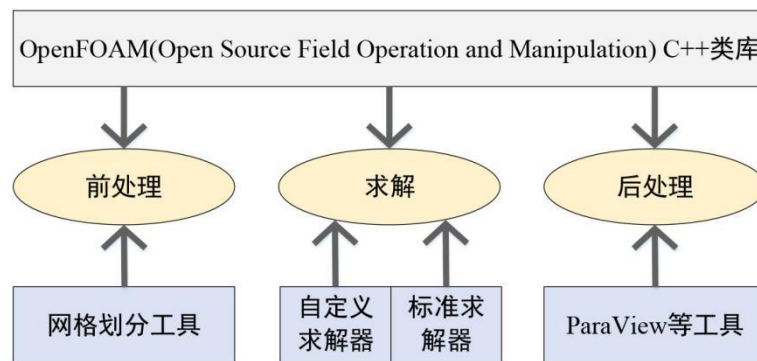


图 2-6 OpenFOAM 的结构示意图

Fig. 2-6 Schematic of OpenFOAM

OpenFOAM 的求解器类别涵盖广泛, 具体包括: 基础 CFD 求解器、集成 Reynolds 平均方法(Reynolds Average Navier-Stokes, RANS)和大涡模拟(Large Eddy Simulation, LES)湍流模型的不可压缩和可压缩流场求解器、浮力驱动流求解器、多相流求解器、粒子追踪求解器、燃烧求解器、热传导求解器、电磁场求解器和固体动力学求解器等。其中, 与本文研究相关的求解器如表 2-3 所示。

表 2-3 OpenFOAM 中与本文研究相关的求解器

Tab. 2-3 The solvers in OpenFOAM related to this article's research

求解器	说明
scalarTransportFoam	标量传输方程求解器
icoFoam	牛顿流体瞬态不可压缩求解器
pisoFoam	采用 PISO 算法的瞬态不可压缩流求解器
pimpleFoam	采用 PIMPLE 算法的大时间步瞬态不可压缩流求解器
interFoam	基于 VOF 模型的可压、绝热、不可溶两相界面捕获求解器

目前 OpenFOAM 针对流场计算的速度-压力耦合求解方法分为三种：SIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)^[144]、PISO(Pressure Implicit with Splitting of Operator)^[145]和 PIMPLE(merged PISO-SIMPLE algorithm)^[146]。其中 SIMPLE 针对稳态求解，PISO 和 PIMPLE 针对瞬态求解，PIMPLE 是 PISO 和 SIMPLE 方法的混合版本，适用于大时间步长情形。上述求解器中 icoFoam 和 pisoFoam 只能采用 PISO 算法。其中，icoFoam 针对“瞬态、不可压缩、层流和牛顿流体”，pisoFoam 针对“瞬态、不可压缩、层流/湍流和牛顿流体”。pimpleFoam 只能采用 PIMPLE 算法，针对“瞬态、不可压缩、层流/湍流和牛顿流体”。因此，pisoFoam 相比于 icoFoam 可以针对湍流情形，pimpleFoam 和 pisoFoam 采用的速度-压力耦合算法不同。求解器 scalarTransportFoam 只能采用 SIMPLE 算法，适用于给定速度场下稳态/瞬态下的标量传输过程，如热对流扩散过程。求解器 interFoam 只能采用 PIMPLE 算法，针对“瞬态、不可压缩、等温、不可溶、层流/湍流、牛顿流体和两相界面追踪(能够处理表面张力作用)”。

(2) interFoam 求解器

如前文所述，铸造充型过程数值模拟的本质是 CFD 领域中的气液两相流计算，而 interFoam 求解器是基于 VOF 模型的可压、绝热和不可溶两相流求解器。因此，本文选择以 interFoam 为基础框架，开发后续相关求解器。

需要特别说明的是，interFoam 求解器在求解相场的时候采用 OpenCFD 公司开发的 MULES 方法^[147]，此方法可以保证在任何数值格式和网格类型的情况下的相场有界。因此在使用 interFoam 求解器的算例中，对流项格式的选择不再局限于那些稳定且有界的格式，如迎风格式等。

2.4.3 自定义求解器

OpenFOAM 作为开源 CFD 代码，其最大的优势在于用户可以通过直接修改底层代码来生成满足自己需求的求解器。从数值模拟的角度分析，求解过程分为六个步骤：控制方程定义、边界条件定义、初始条件定义、控制方程离散、方程组组装和方程组求解。对于流场计算而言，控制方程离散、方程组组装和方程组求解的内容复杂且繁琐，往往需要投入大量的精力才有可能保证算法的准确性和稳定性。

OpenFOAM 作为 CFD 领域的求解类库，很好地将控制方程离散、方程组组装和方程组求解的相关操作进行了封装，用户只需简单地调用相关操作，即可完成离散和求解等功能。简单来讲，为了自定义得到一个新的求解器，用户只需重点关注所需求解控制方程、边界条件和初始条件，按照 OpenFOAM 的格式写入底层代码，通过相关命令语句选择控制方程离散格式和方程组求解算法，进而可以快速且准确地获得所需的求解器。在此过程中，用户可以脱离数值求解的一些基础性工作(如离散算法的具体实施和方程组组装过程等)，专心于所需解决的物理化学问题(控制方程)。这也是未来 CFD，甚至 CAE(Computer Aided Engineering)领域的趋势所在。

结合 2.2 和 2.3 小节中的控制方程，本文需要在 interFoam 求解器中添加或修改的模型和功能如下：① 基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型(式(2-5))；② 动量方程中的源项 \mathbf{S} (式(2-19)和式(2-20))；③ 温度控制方程(式(2-22))；④ 潜热处理(式(2-24)~式(2-32))；⑤ 对流换热边界条件(表 2-1)。考虑到自定义求解器过程中，最重要的两个方面是自定义控制方程和自定义边界条件，因此，将分别以自定义温度控制方程和自定义对流换热边界条件来具体说明这两项工作。

(1) 自定义温度控制方程

从整体上来说，OpenFOAM 中自定义求解器分为四个部分：① 自定义控制方程和物理场求解步骤，并生成相应的求解执行文件；② 自定义边界条件，并生成相应的边界条件执行文件(需要说明的是，OpenFOAM 集成了众多类型的边界条件，因此，自定义边界条件不是必须的)；③ 求解具体问题时，设置相应物理场的边界条件和初始条件；④ 设置相应控制方程的离散算法和方程组求解算法。

所需自定义的温度控制方程为：

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} T) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_e} \nabla T \right) \quad (2-39)$$

下面对自定义温度控制方程的主要步骤进行介绍。需要说明的是，此自定义操作是在 `interFoam` 求解器的基础上进行的。

1) 修改 `createFields.H` 文件

`createFields.H` 文件是 `interFoam` 求解器自带文件，其作用是声明计算过程中所需的物理场(如速度、压力和密度等)。由式(2-39)可知，需要额外定义的物理场有：温度 T 、导热系数 k 和等效比热容 c_e 。

首先自定义一标量场 T ，用于表示单元温度信息。实现代码如下：

```
volScalarField T
(
    IOobject
    (
        "T",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);
```

接着自定义一标量场 `latentFactor`，其作用是液固相线温度范围内的单元返回 1，高于液相线温度或者低于固相线温度的单元返回 0。实现代码如下：

```
volScalarField latentFactor
(
    IOobject
    (
        "latentFactor",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::READ_IF_PRESENT
    ),
```

```
pos((liquidtemp-T)/(liquidtemp-solidtemp)-2*(pos(solidtemp-T))*(liquidtemp-T)
/(liquidtemp-solidtemp))
);
```

其中, $liquidtemp$ 为液相线温度; $solidtemp$ 为固相线温度; pos 用于判断正负数(当参数大于等于 0 时返回 1, 否则返回 0)。

然后自定义标量场 DT , 其代表式(2-39)中的 k/c_e 。实现代码如下:

```
volScalarField DT
(
    IOobject
    (
        "DT",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::READ_IF_PRESENT
    ),
    phase1alpha*hc1/(sh1+latentFactor*latentHeat/(liquidtemp-solidtemp))+(1.0-phase1alpha)*hc2/sh2
);
```

其中, $phase1alpha$ 为金属相体积比; $hc1$ 和 $hc2$ 分别为金属相和空气的导热系数; $sh1$ 和 $sh2$ 分别为金属相和空气的比热容; $latentFactor$ 为潜热。

2) 新建 TEqn.H 文件

OpenFOAM 中的 H 文件相当于 C++ 中的源文件。新建 TEqn.H 文件的作用是定义温度控制方程和求解操作。实现代码如下:

```
fvScalarMatrix TEqn
(
    fvm::ddt(rho,T)
    + fvm::div(rhoPhi,T)
    - fvm::laplacian(DT,T)
    ==
    fvOptions(rho,T)
);
```

```
);
TEqn.relax();
fvOptions.constrain(TEqn);
TEqn.solve();
fvOptions.correct(T);
#include "correctTbylatentHeat.H"
```

其中, $ddt(\rho, T)$ 代表式(2-39)中的 $\frac{\partial \rho T}{\partial t}$; $div(\rho \Phi, T)$ 代表式(2-39)中的 $\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} T)$;

$laplacian(DT, T)$ 代表式(2-39)中的 $\nabla \cdot \left(\frac{k}{c_e} \nabla T \right)$; `#include "correctTbylatentHeat.H"`表示

温度校正操作。

3) 修改 T Foam.C 文件

OpenFOAM 中的 C 文件相当于 C++ 中的 main 文件。首先将原有的 interFoam.C 重新命名为 T Foam.C, 然后在迭代求解代码中添加 “`#include "TEqn.H"`” 即可。后续重新编译代码, 即可获得温度求解器 T Foam。

(2) 自定义对流换热边界条件

如上所述, OpenFOAM 中自定义边界条件与自定义控制方程是完全独立开来的, 即自定义的边界条件并不针对特定的物理量。事实上, 自定义边界条件的结果文件的后缀为 so, 计算具体问题, 需要在 controlDict 文件中引用此 so 文件。一般而言, 自定义边界条件首先需要在 OpenFOAM 中找出已有的相近的边界条件, 不建议在基本边界条件类型上做修改, 如 fixedValue、zeroGradient、fixedGradient 等, 因为这类边界条件既可针对标量, 也可针对矢量, 其源代码中往往采用泛指的 Type 类型, 不方便修改。

所需自定义的边界条件为:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla T = \frac{(\alpha_1 h_1 + \alpha_2 h_2)(T_a - T)}{\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2} \quad (2-40)$$

下面对自定义对流换热边界条件的主要步骤进行介绍。需要说明的是, 此自定义操作是在 fixedFluxPressure 边界条件的基础上进行的。

1) 修改 createFields.H 文件和 alphaEqnSubCycle.H 文件

这里需要先对上述 T Foam 求解器进行修改, 其原因是, 式(2-40)所需要的额外信

息($\alpha_1, \alpha_2, k_1, k_2$)与温度求解器相关。在 `createFields.H` 中, 添加标量场 `Mixedhc` 和 `phase1alpha` 分别代表 $\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2$ 和 α_1 。

`alphaEqnSubCycle.H` 文件的作用是修正相场分布, 以及更新各物理场。更新标量场 `Mixedhc` 和 `phase1alpha` 的代码如下:

```
phase1alpha == max(0.0, min(1.0, alpha1));  
Mixedhc == phase1alpha*hc1 + (1.0-phase1alpha)*hc2;
```

2) 修改 `convectiveFvPatchScalarField.H` 文件

定义边界条件时的 H 文件与 C++ 中的头文件类似。新建五个变量 `MixedhcName_`、`phase1alpha_`、`alpha1convective_`、`alpha2convective_` 和 `outsidetemperature_` 分别与式 (2-40) 中的 $\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2$, α_1, h_1, h_2, T_a 相对应。

3) 修改 `convectiveFvPatchScalarField.C` 文件

定义边界条件时的 C 文件与 C++ 中的源文件类似。在 `updateCoeffs` 函数中添加梯度求解式。实现代码如下:

```
scalar i_alpha1, i_alpha2;  
i_alpha1=phase1alphap[facei];  
i_alpha2=1.0-i_alpha1;  
gradient()[facei]=((i_alpha1*alpha1convective()+i_alpha2*alpha2convective())  
*(outsidetemperature()-Tin[facei]))/Mixedhcp[facei];
```

其中, `gradient()[facei]` 代表式 (2-40) 中的 $\mathbf{n} \cdot \nabla T$; `alpha1convective()` 和 `alpha2convective()` 分别代表式 (2-40) 中的 h_1, h_2 ; `Tin[facei]` 代表式 (2-40) 中的 T 。

后续进行代码编译工作, 即可获得所需的对流换热边界条件文件。

2.4.4 数值计算流程

完成所需的自定义控制方程和边界条件之后, 即可获得本文铸造充型过程流动场求解器。后续计算过程中, 直接调用相应的求解器命令即可进行求解操作。图 2-7 为数值求解流程图。

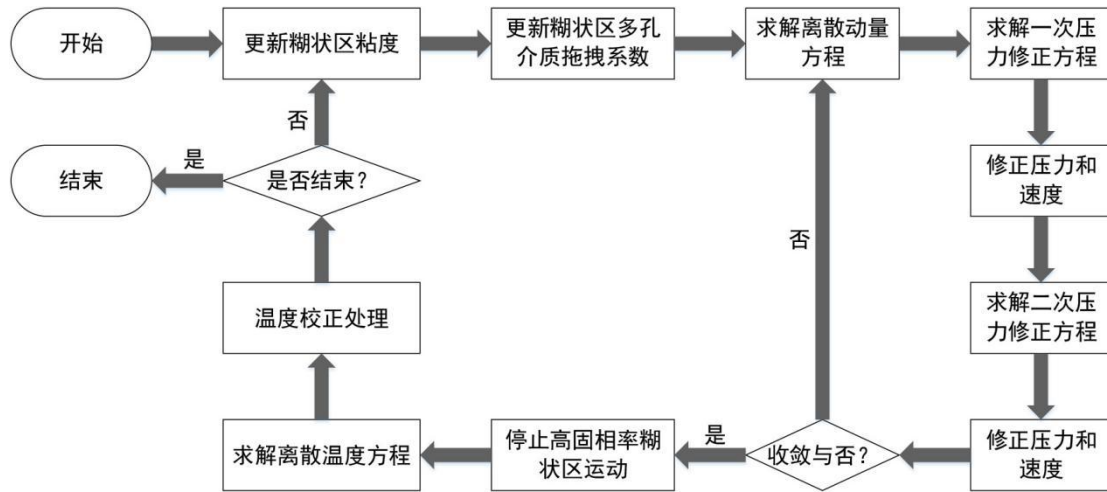


图 2-7 铸造充型过程流动场求解器的计算流程图

Fig. 2-7 Calculation flow chart of flow field solver in casting filling process

2.5 铸造充型过程流动数学模型实验验证

本章所建立的铸造充型过程流动数学模型涵盖了基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型、界面前沿追踪、表面张力计算和气液固多相流模型。易知，此流动模型是本文后续研究工作(铸造充型过程中成形类缺陷预测)的基础，即只有在获得准确的铸造充型过程的基础上，各类缺陷(浇不足、卷气、冷隔和氧化夹渣)才能得以准确地预测。因此，本小节将对已建立的流动数学模型的准确性和合理性进行实验验证。具体包括：① 通过计算 S 型模具水模拟充型过程，并对比实验结果，验证本文气液(空气-水)两相流模型的准确性；② 通过计算铝合金基准件充型过程，并对比实验结果，验证本文气液(空气-铝合金金属液)两相流模型的准确性；③ 通过计算和对比不同糊状区流动模型下一底注式铸造工艺的计算结果，验证本文糊状区流动行为计算模型的合理性。需要说明的是，本文所采用的前处理网格划分工具为 ICEM CFD^[148]，后处理工具采用开源后处理软件 ParaView^[149]。

2.5.1 S 型模具水模拟充型过程实验验证

此水模拟实验^[49]在冷室高压铸造模具中进行，内腔为 S 型的通道，通道水平放置。S 型通道的几何尺寸如图 2-8 所示，内腔的厚度为 2 mm，且在通道远端设有排气孔，排气孔特意被设计地较小，目的是为了观察到水流冲入内腔过程中的卷气现象。在

此水模拟实验过程中，Schmid^[49]将水流以较高的速度压入内腔，进口端速度设计为 8.7 m/s。表 2-4 为计算过程中所需设置的参数。

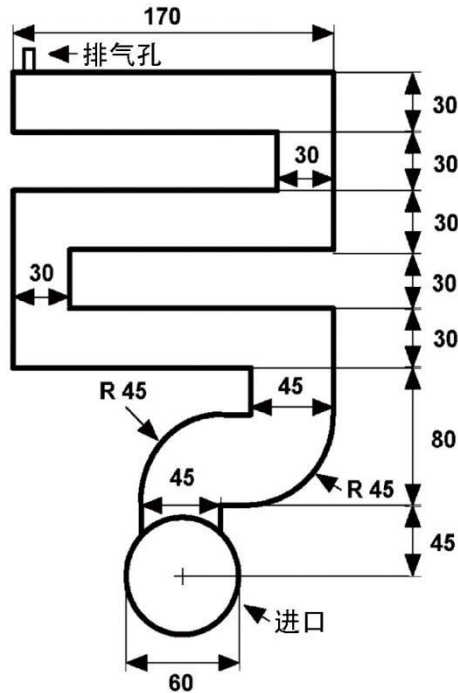


图 2-8 S 型通道的几何尺寸(单位: mm)

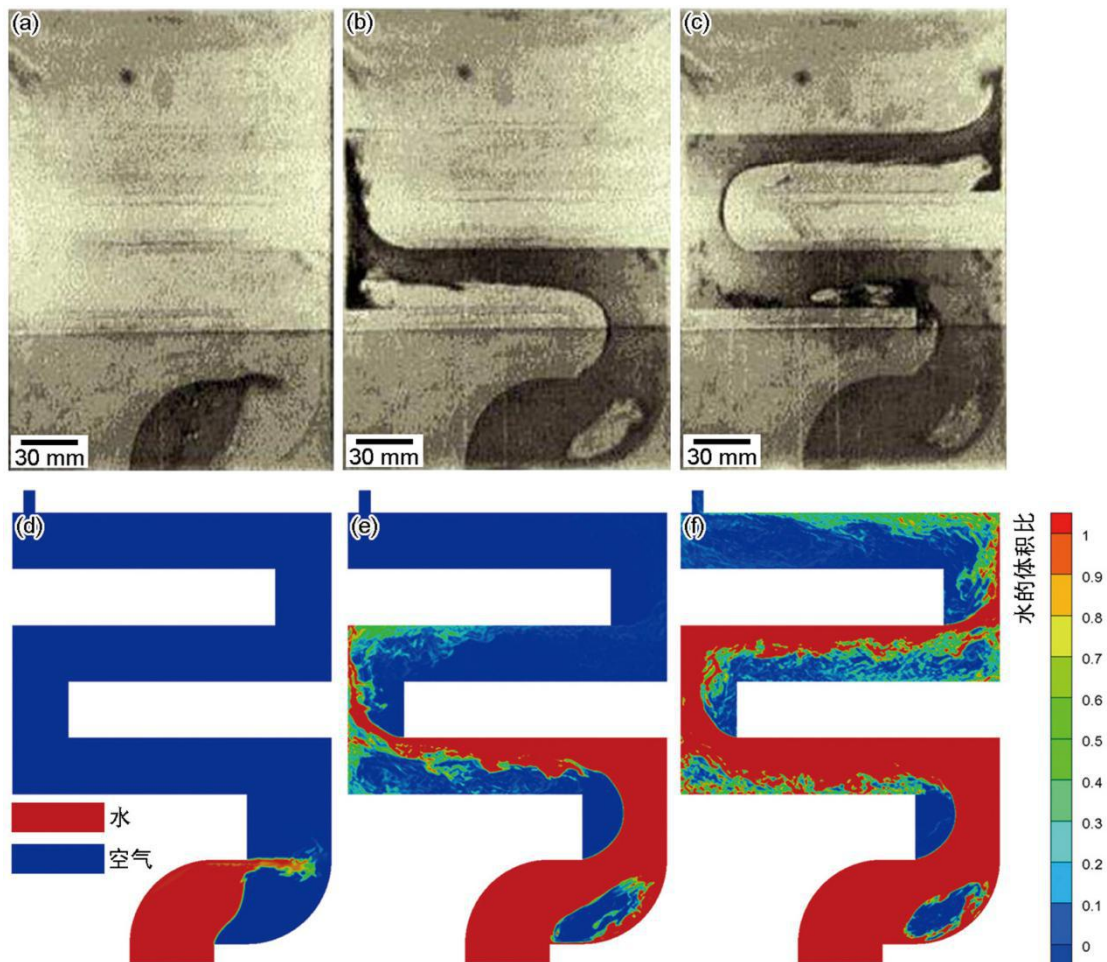
Fig. 2-8 S-shaped channel geometry (unit: mm)

表 2-4 计算过程中所需设置的参数

Tab. 2-4 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
水的密度	1000	kg/m ³
空气的密度	1	kg/m ³
水的动力粘度	1e-3	Pa·s
空气的动力粘度	1e-5	Pa·s
空气-水的表面张力系数	0.07275	N/m
重力加速度	{0, 0, -9.8}	m/s ²
进口速度	{0, 8.7, 0}	m/s
出口压力	0	Pa

图 2-9 为该 S 型铸型实验与水的体积比和气液两相速度的模拟结果的对比。可以看出，在 7.15 ms 时，实验中水流受到弯曲通道的影响呈现喷射的形态，模拟结果与之很好地对应(图 2-9a, d, g)。在 25.03 ms 时，实验和模拟结果中都在右下端管道处形成较大气泡(图 2-9b, e, h)。在 39.34 ms 时，实验中水流开始接触到右上端的壁面，模拟结果也较好地对应，而且模拟结果也反映出右下端气泡变小(图 2-9c, f, i)。另外，从速度分布结果可以看出，充型过程中水流对空气有明显推动作用(图 2-9g~i)。因此，在不考虑液固转变过程时，本文采用的物理模型及求解方法适用于准确计算气液(空气-水)两相高速充型过程。



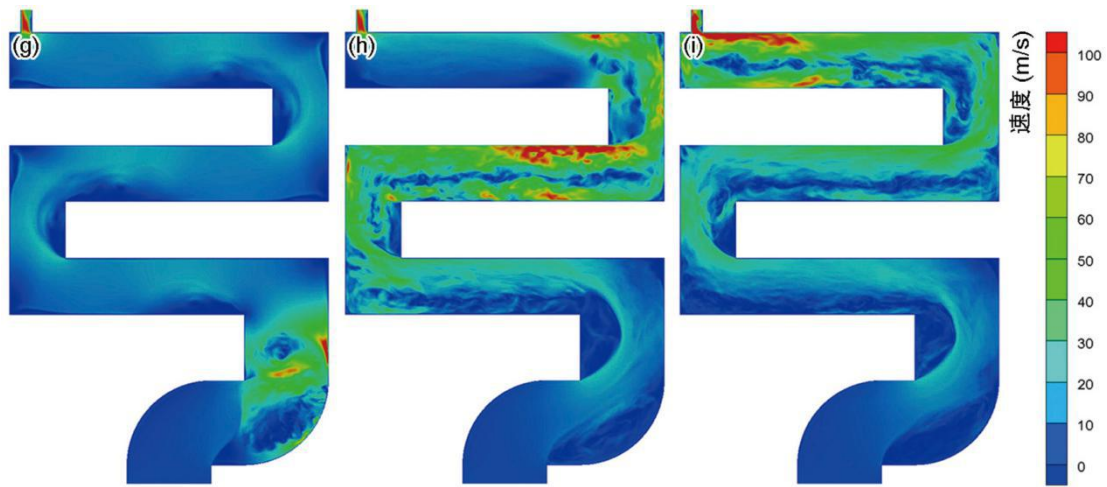


图 2-9 不同时刻(7.15 ms(a, d, g)、25.03 ms(b, e, h)和 39.34 ms(c, f, i))下 S 型铸型水模拟实验与水的体积比和气液两相速度的模拟结果的对比: (a~c) 实验结果; (d~f) 水的体积比模拟结果; (g~i) 气液两相速度的模拟结果

Fig. 2-9 The comparison between the experimental results and the simulative results of S-shaped channel filling at different times (7.15 ms(a, d, g), 25.03 ms(b, e, h), and 39.34 ms(c, f, i)): (a~c) experimental results; (d~f) simulative results of water volume ratio; (g~i) simulative results of gas-liquid two-phase velocity

2.5.2 铝合金基准件充型过程实验验证

此铝合金基准件实验^[150]是由伯明翰大学 Campbell 完成,铸件本体为一平板,其几何尺寸为: 200 mm×100 mm×10 mm。铸造工艺采用底注式不封闭浇注系统,铸型材料为树脂砂,铸件及浇注系统的几何形状及尺寸如图 2-10 所示。实验过程中,采用 X 射线成像技术记录金属液自由表面形貌随时间的变化。浇注合金采用纯度为 99.999%的纯铝,计算过程中所需设置的参数见表 2-5。需要说明的是,考虑到充型过程持续时间短,即使充型过程中发生了糊状区转变,温度变化对热物性参数(如密度、导热系数和比热容等)影响不大,因此,为了保证计算效率,本文的模拟计算尽量采用恒定物性参数。

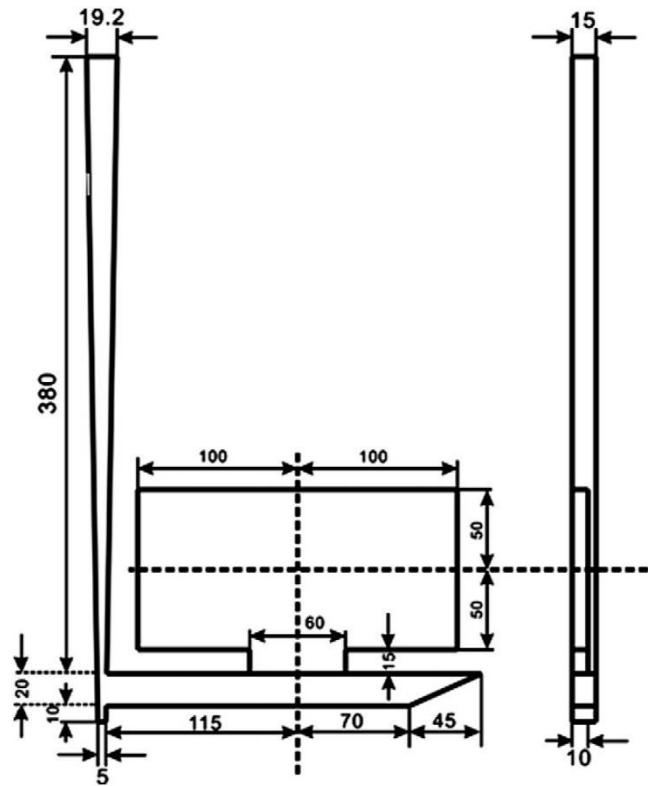


图 2-10 铸件及浇注系统的几何形状及尺寸(单位: mm)

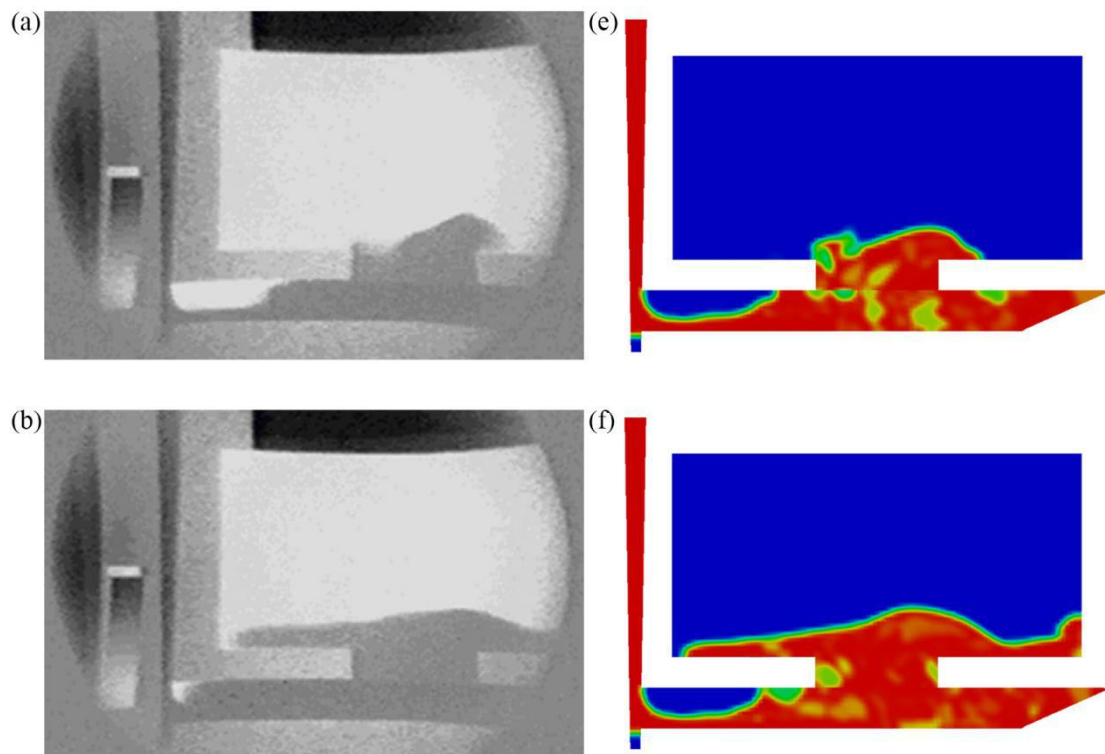
Fig. 2-10 Casting and gating system geometry and dimensions (unit: mm)

表 2-5 计算过程中所需设置的参数

Tab. 2-5 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
铝合金金属液的密度	2385	kg/m ³
空气的密度	1	kg/m ³
铝合金金属液的动力粘度	3.1e-3	Pa·s
空气的动力粘度	1e-5	Pa·s
空气-铝合金金属液的表面张力系数	0.871	N/m
重力加速度	{0, -9.8, 0}	m/s ²
进口速度	{0, -0.31, 0}	m/s
浇注温度	720	°C

图 2-11 为充型过程中不同时刻的金属液形貌的实验结果和模拟结果。从对比结果可以看出，充型至 1.55 s(图 2-11a, e)时，铝液流至内浇口，且右端前沿界面明显较高，同时在横浇道左端形成较大的封闭空气团，实验结果与模拟结果吻合很好。充型至 1.75 s(图 2-11b, f)时，铝液基本在平板底端面铺开，且在中部偏右位置形成波峰。模拟结果中横浇道左端仍存在较大的封闭空气团，而实验结果中只具有少量空气，其原因可能是计算过程中未考虑气体进入砂型，以及由于砂型表面较为粗糙，实际充型过程中，气体会在金属液作用下贴着砂型表面排出。充型至 2.45 s(图 2-11c, g)和 3.20 s(图 2-11d, h)时，实验结果和模拟结果中铝液充型高度基本相同。整体上而言，实验结果和模拟结果吻合较好，因此，对比结果可以较好地证明本文所采用的物理模型及求解方法在计算气液(空气-金属液)两相充型过程的准确性。



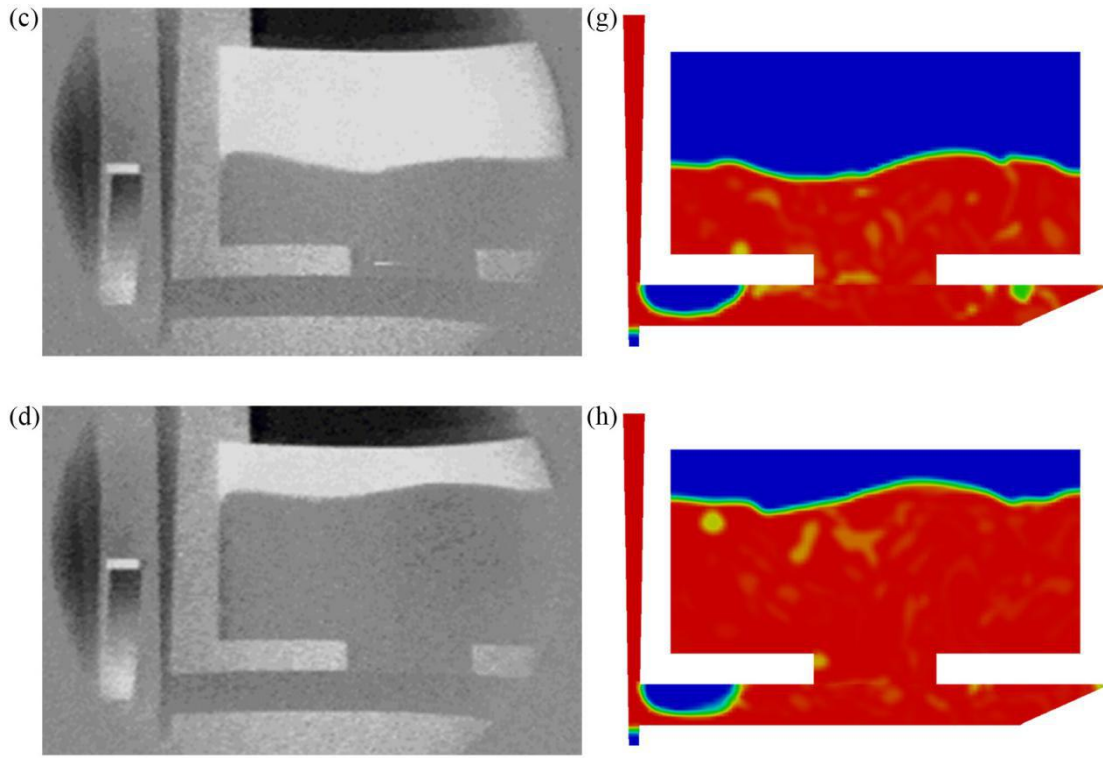


图 2-11 不同时刻的铝合金基准件充型过程实验结果(左)和模拟结果(右): (a, e) 1.55 s; (b, f) 1.75 s; (c, g) 2.45 s; (d, h) 3.20 s

Fig. 2-11 Interface shape of the benchmark test in the experimental results (left) and simulation results (right) at different times: (a, e) 1.55 s; (b, f) 1.75 s; (c, g) 2.45 s; (d, h) 3.20 s

2.5.3 不同糊状区流动模型下底注式铸造工艺计算结果对比及分析

为了说明不同糊状区处理方法之间的区别,首先分别单独采用停止流动的临界固相率方法、变黏度模型和多孔介质拖拽模型计算底注式铸造充型过程,通过采用不同的控制参数,对比说明不同处理方法的效果。接着采用基于固相率变化的糊状区流动行为模型进行计算,证明此处理方法的合理性。

(1) 底注式铸造工艺及参数设置

为了有效地说明不同糊状区处理方法之间的区别,避免计算过程中其它因素的影响,采用简单形状的底注式铸造工艺,图 2-12 为此铸造工艺的几何及网格模型。铸件的整体尺寸为: 80 mm×380 mm×430 mm。铸件合金采用铝合金,模拟计算过程中所设置的参数如表 2-6 所示,为了更为有效地对比不同糊状区处理方法之间的区别,

本计算采用恒定物性参数。需要说明的是，本计算将下表面与铸型间换热系数设置地很大，以使下表面较快地进入液固转变阶段。

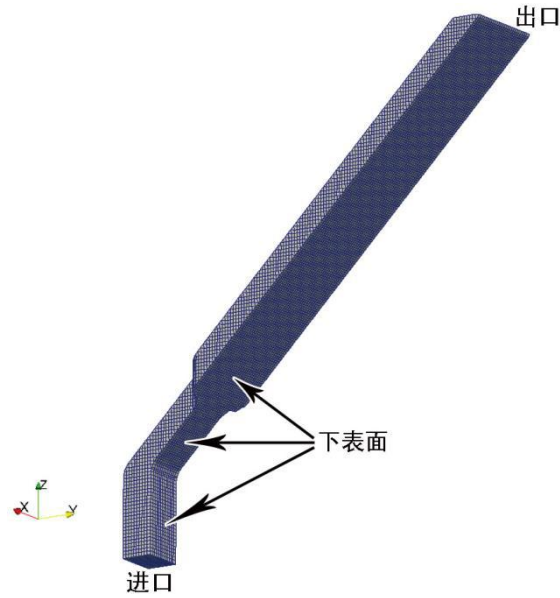


图 2-12 底注式铸造工艺的几何及网格模型

Fig. 2-12 Bottom-injection casting process geometry and mesh model

表 2-6 模拟计算过程中所设参数

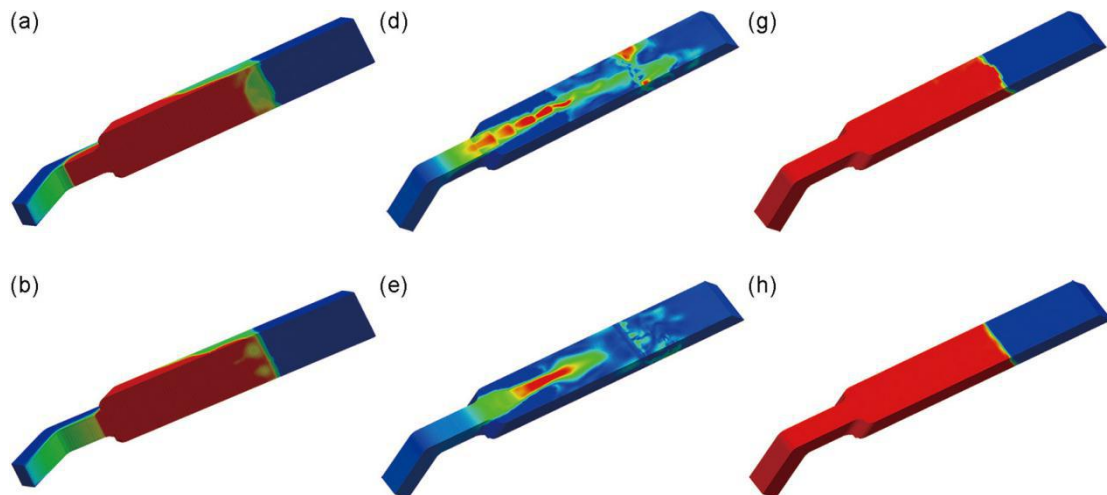
Tab. 2-6 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
铝合金金属液的密度	2385	kg/m^3
空气的密度	1	kg/m^3
铝合金金属液的动力粘度	$3\text{e-}3$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
空气的动力粘度	$1\text{e-}5$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
空气-铝合金金属液的表面张力系数	0.871	N/m
重力加速度	$\{0, 0, -9.8\}$	m/s^2
进口速度	$\{0, 0, 0.1\}$	m/s
出口压力	0	Pa
铝合金的液相线温度	660	$^\circ\text{C}$

铝合金的固相线温度	560	°C
铝合金的潜热	300	J/g
浇注温度	670	°C
铸型温度	30	°C
铸件下表面与铸型的对流换热系数	6000	W/(m ² ·K)
铸件其他表面与铸型的对流换热系数	100	W/(m ² ·K)

(2) 临界固相率方法计算分析

只采用停止流动的临界固相率方法来处理糊状区运动,表明固相率高于临界值时单元停止流动,低于临界值时单元作为液相处理。本计算采用不同的临界固相率计算底注式铸造充型过程,图 2-13 为计算第 5 s 时不同方案之间的结果对比。从铝相固相率对比结果(图 2-13a~c)可以看出,临界固相率较小时,糊状区会更早地进入流动停止阶段,流动停止的区域较多。从两相(金属相和空气)速度对比结果(图 2-13d~f)可以看出,随着流动停止区域的增加,在进口速度一定的情况下,上表面液相区域速度越大。从铝相体积比(图 2-13g~i)对比结果可以看出,由于进口速度一定,铝相分布基本一致。一般认为铸造充型过程中,只有高固相率区域速度为零,因此,临界固相率方法适用于具有高固相率的糊状区。



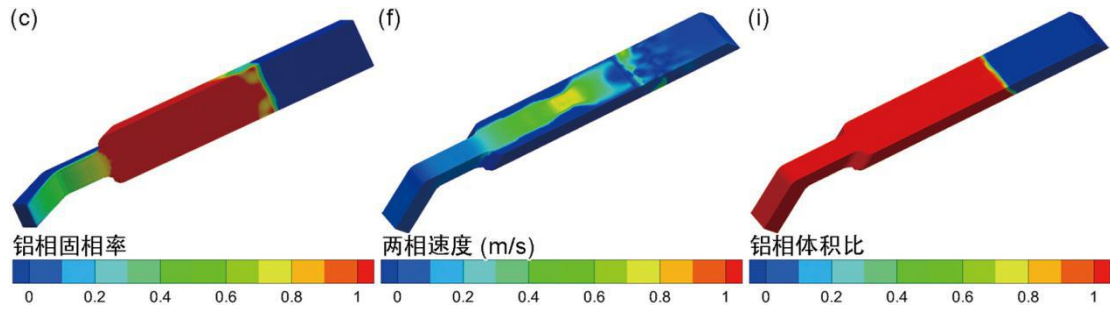
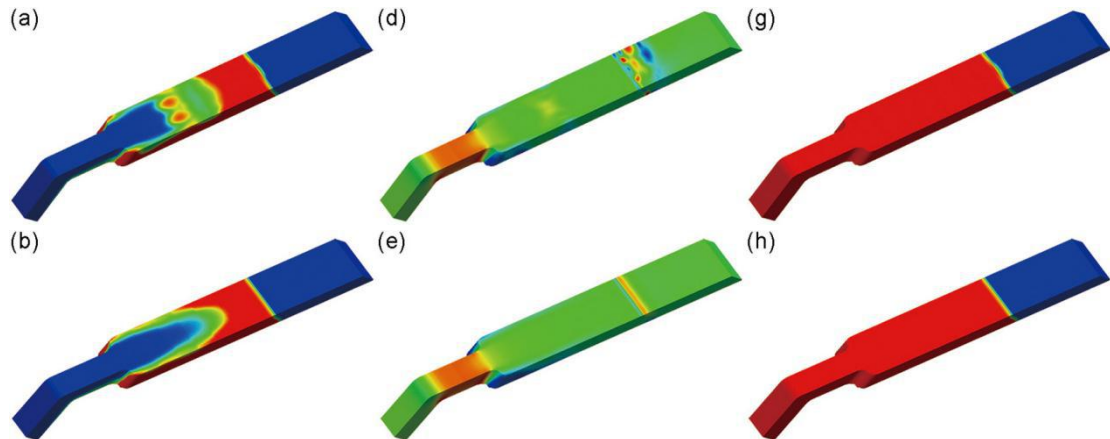


图 2-13 计算第 5 s 时不同临界固相率(0.5(a, d, g)、0.75(b, e, h)和 0.95(c, f, i))下铝相固相率、两相速度和铝相体积比的模拟结果对比: (a~c) 铝相固相率; (d~f) 两相速度; (g~i) 铝相体积比

Fig. 2-13 Comparisons of simulated results of solid-fraction of aluminum phase (a~c), velocity of liquid-gas phase (d~f) and volume fraction of aluminum phase (g~i) under critical solid-fractions of 0.5 (a, d, g), 0.75 (b, e, h) and 0.95 (c, f, i) at 5 s

(3) 变黏度模型计算分析

只采用变黏度模型来处理糊状区运动,表明随着固相率增加,糊状区单元只会增加黏度。采用不同的固相黏度计算底注式铸造充型过程,倍数表示与液相相比固相黏度值的倍数,图 2-14 为计算第 5 s 时不同方案之间的结果对比。从铝相固相率对比结果(图 2-14a~c)可以看出,随着固相黏度的增加,糊状区单元间黏性力加大,糊状区流动紊乱程度明显降低,当固相黏度增加过大时,会形成“牙膏”状流动。从两相(金属相和空气)速度对比结果(图 2-14d~f)可以看出,随着固相黏度的增加,糊状区流动趋于平稳,使得与铝相接触的空气区域流动同样趋于平稳。从铝相体积比对比结果(图 2-14g~i)可以看出,由于进口速度一定,铝相分布基本相同。考虑到铸造充型过程中糊状区基本不会形成“牙膏”状流动,因此,变黏度模型适用于具有低固相率的糊状区。



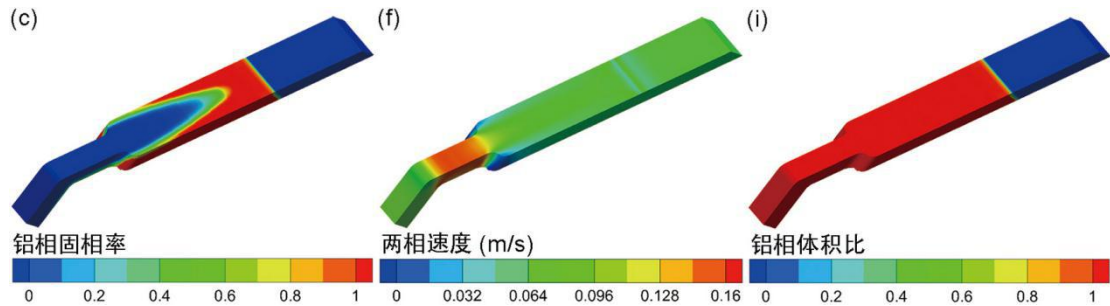
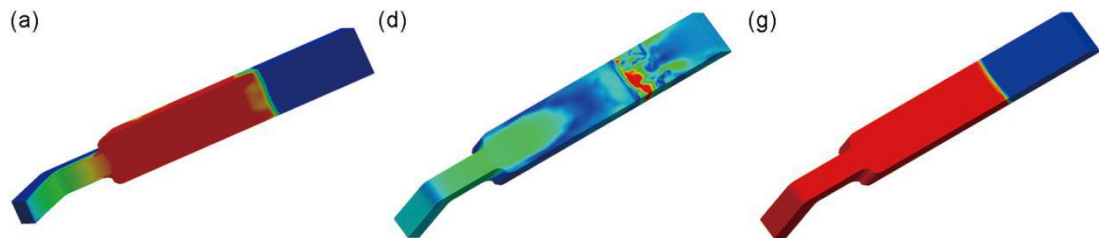


图 2-14 计算第 5 s 时不同固相黏度(倍数为 1(a, d, g)、10(b, e, h)和 100(c, f, i))下铝相固相率、两相速度和铝相体积比的模拟结果对比: (a~c) 铝相固相率; (d~f) 两相速度; (g~i) 铝相体积比

Fig. 2-14 Comparisons of simulated results of solid-fraction of aluminum phase (a~c), velocity of liquid-gas phase (d~f) and volume fraction of aluminum phase (g~i) with incremental multiples as 1 (a, d, g), 10 (b, e, h) and 100 (c, f, i) at 5 s

(4) 多孔介质拖拽模型计算分析

只采用多孔介质拖拽模型来处理糊状区运动,即认为随着固相率增加,糊状区单元受到的速度反方向拖拽力加大。采用不同的多孔介质拖拽参数,即式(2-5)中的参数 D_{drag} , 计算此底注式铸造充型过程,图 2-15 为计算第 5 s 时不同方案之间的结果对比。从铝相固相率对比结果(图 2-15a~c)可以看出,加大多孔介质拖拽系数,糊状区单元受到的拖拽力增大,使得下表面前端的高固相率区域增加。从两相(金属相和空气)速度对比结果(图 2-15d~f)可以看出,加大多孔介质拖拽系数,糊状区运动速度减小,使得上表面液相区域速度变大。从铝相体积比(图 2-15g~i)对比结果可以看出,由于进口速度一定,铝相分布基本相同。考虑到铸造充型过程中一般认为中等固相率区域才可等效为多孔介质,因此,多孔介质拖拽模型适用于具有中等固相率的糊状区。



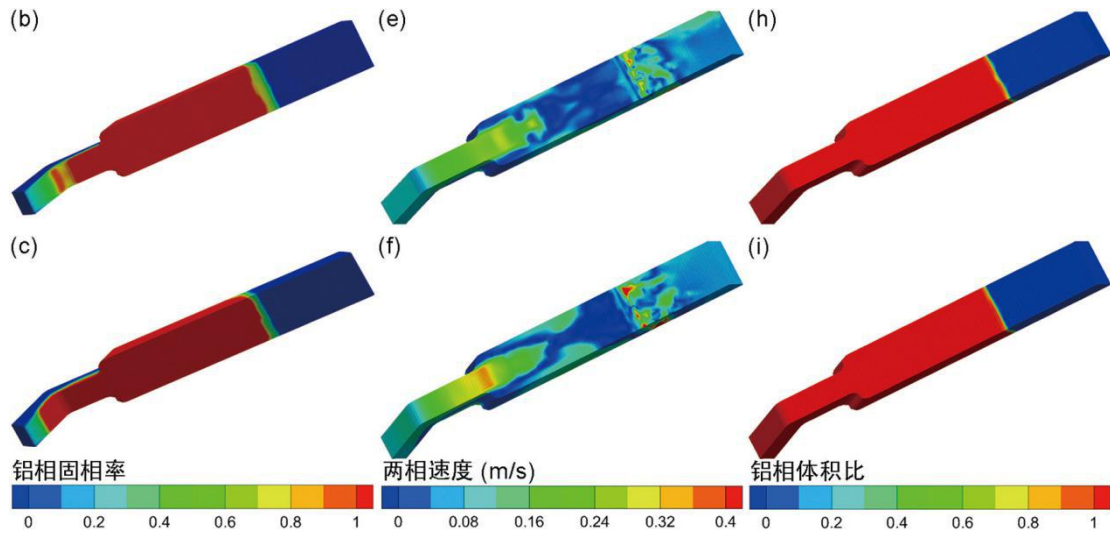
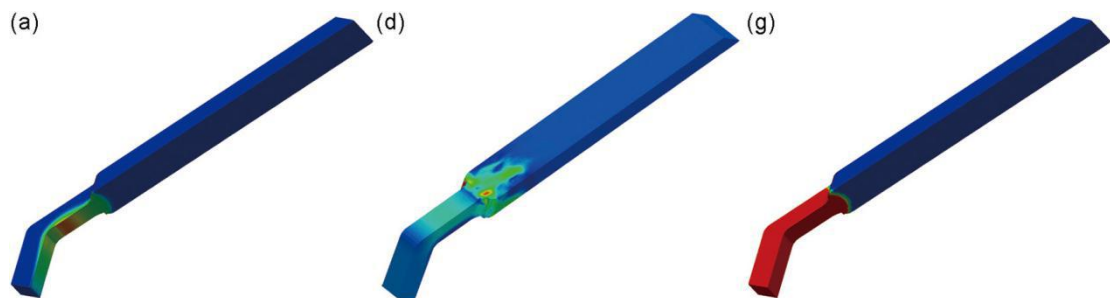


图 2-15 计算第 5 s 时不同多孔介质拖拽系数(1(a, d, g)、10(b, e, h)和 100(c, f, i))下铝相固相率、两相速度和铝相体积比的模拟结果对比：(a~c) 铝相固相率；(d~f) 两相速度；(g~i) 铝相体积比

Fig. 2-15 Comparisons of simulated results of solid-fraction of aluminum phase (a~c), velocity of liquid-gas phase (d~f) and volume fraction of aluminum phase (g~i) with porous medium drag coefficients of 1 (a, d, g), 10 (b, e, h) and 100 (c, f, i) at 5 s

(5) 基于固相率变化的糊状区流动行为模型计算分析

采用综合处理方法计算底注式铸造充型过程。其中，采用式(2-1)进行变黏度计算，设 S_{down} 为 0.15，设 S_{up} 为 0.67；采用式(2-2)计算多孔介质拖拽系数， D_{drag} 取 10。需要说明的是，采用基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型处理实际铸造充型过程前，需结合实际实验确定相关参数，如 D_{drag} 、 S_{down} 和 S_{up} 。图 2-16 为不同时刻的模拟计算结果。从计算结果可以看出，与上表面流体相比，由于下表面与铸型换热较快，下表面糊状区受到较大拖拽力，进而固相率超过临界值，停止运动；随着下表面高固相率糊状区逐渐累积，上表面液相区因流动通道变窄而加速流动。



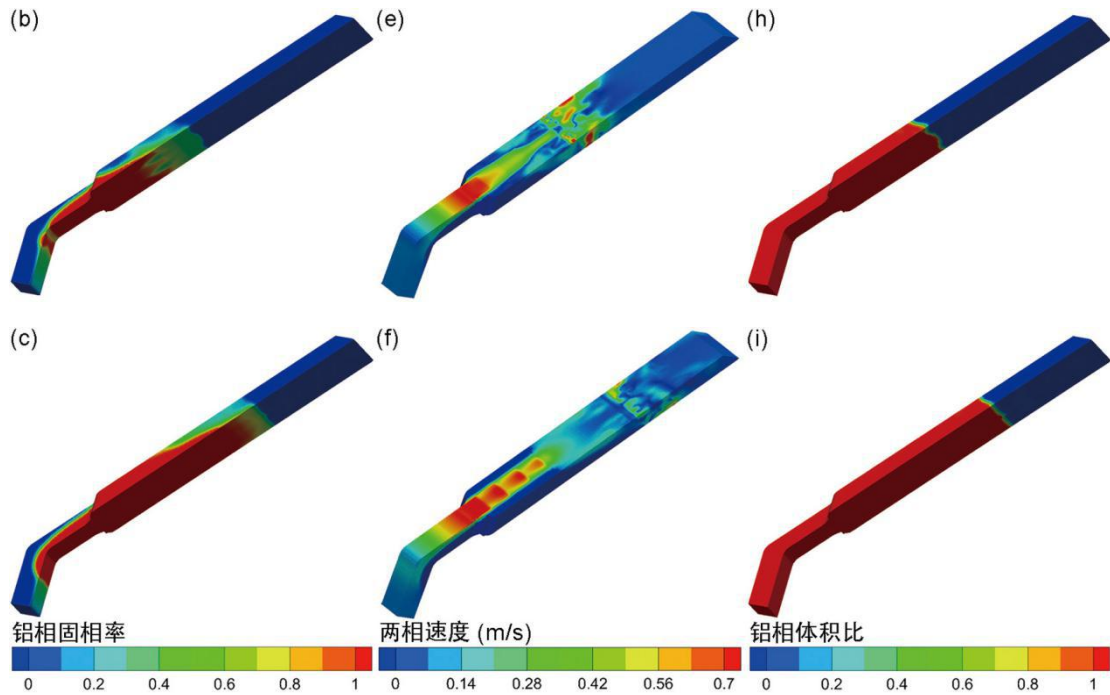


图 2-16 采用基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型时不同时刻(1.5 s(a, d, g)、3 s(b, e, h)和 5 s(c, f, i))的铝相固相率、两相速度和铝相体积比的模拟结果：(a~c) 铝相固相率；(d~f) 两相速度；(g~i) 铝相体积比

Fig. 2-16 Simulated results of solid-fraction of aluminum phase (a~c), velocity of liquid-gas phase (d~f) and volume fraction of aluminum phase (g~i) at different times of 1.5 s (a, d, g), 3 s (b, e, h) and 5 s (c, f, i) by using the calculation model for mushy region flow behavior through measurement of solid-fraction

通过上述采用不同糊状区处理方法的计算对比结果可知，临界固相率方法适用于高固相率单元，变黏度方法适用于低固相率单元，多孔介质拖拽模型适用于中等固相率单元，因此，采用基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型处理铸造充型过程中糊状区流动是合理的。

2.6 本章小结

(1) 提出了一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型，即高固相率糊状区采用临界固相率方法，低固相率糊状区采用变黏度模型，中等固相率糊状区采用多孔介质拖拽模型，有效地处理了液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。

(2) 建立了气液固多相流模型，计算充型过程中“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合流动过程。其中，VOF-PLIC 算法用于追踪界面前沿，CSF 模型用于计算表面张力，等效比热法和温度校正法相结合共同处理潜热。

(3) 以 CFD 开源代码 OpenFOAM 中的 interFoam 求解器为基础框架，开发了本文铸造充型过程求解器。开发过程的主要工作为自定义控制方程和边界条件。

(4) 计算了两个充型基准实验(S 型模具水模拟实验和铝合金基准件充型实验)，并与实验结果相对比，验证了本文流动场模型基础算法(气液两相流计算)的准确性。

(5) 计算和对比了不同糊状区流动模型下一底注式铸造工艺的计算结果，验证了本文所提出的糊状区流动行为计算模型的合理性。

第3章 冷隔缺陷演化机理及预测模型

3.1 引言

冷隔是铸造生产中相当普遍的缺陷,在很多情况下,这类缺陷在完全报废铸件中占据首位。冷隔是指在两股金属汇聚处,因其未能完全熔合而明显存在的不连续性缺陷,这类缺陷铸件的外观常呈现为带有光滑圆边的裂纹或皱纹^[15]。由于目前实验手段只能对铸件最终的冷隔缺陷进行分析,难以直接观测冷隔缺陷的形成和演变过程,所以在实际铸造生产过程中,往往只能依靠经验来控制铸件冷隔缺陷,以致于更换铸件后需要耗费较大的人力物力,来重新摸索一套成熟的工艺。因此,进行针对冷隔缺陷的数值模拟研究具有重要的价值。

冷隔缺陷是在铸造充型过程中金属液相互汇聚造成的,所以界面前沿的判断是预测冷隔缺陷的关键之一。本文第2章已说明了铸造充型过程流动数学模型中的界面前沿追踪算法,即VOF-PLIC算法。然而,预测冷隔缺陷所需的界面前沿与VOF-PLIC算法得到的界面前沿存在一定差异,其原因在于:预测冷隔缺陷所需的界面前沿应当是明确且清晰的,而VOF-PLIC算法得到的界面前沿是具有一定厚度的(VOF-PLIC算法本质上属于连续性算法)。另外,由于金属液相互汇聚必定带来金属液前沿的碰撞,所以界面前沿碰撞的判断也是预测冷隔缺陷的关键之一。因此,在已有的界面前沿信息的基础上寻求适用于预测冷隔缺陷的界面前沿,以及提出判断界面前沿碰撞的算法,是冷隔缺陷数值模拟研究的前提。

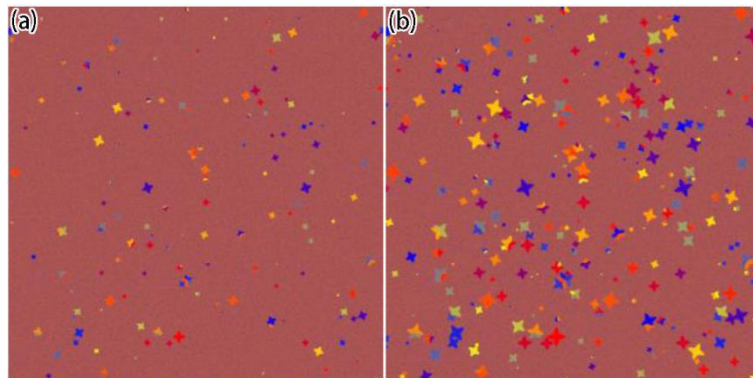
冷隔缺陷数值模拟的目的是能够数字化分析冷隔形成和演变过程,即量化地给出不同时间、不同部位的冷隔分布,而不仅仅是获得产生冷隔缺陷的趋势。量化预测冷隔缺陷的重点是提出冷隔缺陷生成模型,即在深入认识冷隔缺陷演化机理的基础上,提取出影响冷隔的因素,并提出相应的数学模型用于表征不同因素的影响。因此,提出冷隔缺陷生成模型是量化预测冷隔缺陷的关键所在。由于本文第2章已建立了铸造充型过程流动数学模型,并考虑了液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为,所以冷隔缺陷数值模拟工作可在第2章研究基础上进行。在已开发的铸造充型过程求解器的基础上,通过自定义界面前沿及其碰撞功能和冷隔缺陷生成及其追踪模型,开发铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器。

因此，为了定量化预测铸造充型过程中冷隔缺陷的演化过程，本文在第 2 章已开发的铸造充型过程求解器的基础上，进行铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器的开发。为了描述铸造充型过程中金属液的汇聚，寻求适用于预测冷隔缺陷的界面前沿判断算法，以及提出判断界面前沿碰撞的算法。为了定量化预测冷隔缺陷，在深入认识冷隔缺陷演化机理的基础上，提出相应的冷隔缺陷生成模型。

3.2 冷隔缺陷演化机理

铸造充型过程中，由于浇注温度低、铸型激冷过度、浇注系统不合理等原因，使得两股金属液交汇时，其中一股液面前沿已部分凝固，最终该部位金属熔合不充分，形成冷隔，进而严重影响铸件的表面质量和力学性能。冷隔缺陷一方面严重影响铸件表面形态，另一方面造成不连续的铸件组织结构，使得铸件在使用过程中，极易在冷隔缺陷位置出现应力集中，并形成裂纹源。可知，冷隔缺陷本质上是由充型流动和枝晶生长耦合影响的，下面将分别从微观和宏观角度来分析冷隔缺陷演化机理。

从微观层面来分析，之所以两股金属液交汇时有可能产生冷隔缺陷，是由于其中一股液面前沿已部分凝固，故冷隔的产生涉及到晶粒的生长过程。一般而言，金属的液固转变是晶粒的形核与长大过程。结晶时首先在液体中形成具有某一临界尺寸的晶核，然后这些晶核再不断凝聚液体中的原子继续长大。随着时间的推移，已形成的晶核不断长大，与此同时，液态金属中又产生下一批晶核。以此类推，液态金属中晶粒不断形核、不断长大，使液态金属越来越少，直到各个晶粒相互接触，液态金属耗尽，结晶过程便告结束。图 3-1 为晶粒形核和长大过程的示意图^[152]。



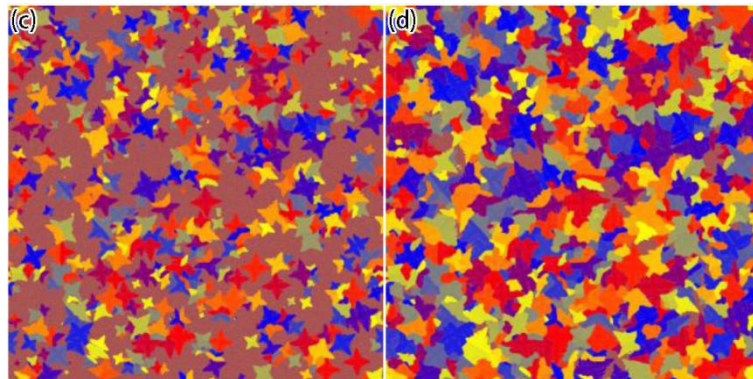


图 3-1 晶粒的形核和长大过程^[152]: (a) 初步形成晶核; (b) 晶粒开始长大; (c) 晶粒逐步长大; (d) 晶粒相互接触形成晶界

Fig. 3-1 Grain nucleation and growth process^[152]: (a) initial formation of crystal nucleus; (b) grains begin to grow; (c) grains grow gradually; (d) grains contact each other to form grain boundaries

由此可见，金属液之所以熔合充分，是由于原子在晶粒形核和长大过程中具有较好的扩散和运动能力，使得最终晶粒之间虽然取向不同，但在原子尺度形成了牢固的连接。而冷隔形成过程中，由于其中一股液面前沿已部分凝固，即其中一股液面处的晶粒已生长较为充分，原子的扩散和运动能力较差，无法与其他液面处的晶粒在原子尺度上形成牢固的连接，这也是冷隔缺陷位置极易出现应力集中，并形成裂纹源的原因所在。

从宏观层面来分析，冷隔缺陷由金属间熔合不充分造成，即晶粒未在原子尺度形成牢固的连接，表现为带有光滑圆边的裂纹或皱纹。冷隔缺陷的形成不仅仅与界面前沿的凝固状态有关，也与界面前沿的汇聚情况有关，图 3-2 为界面前沿交汇示意图。结合上述分析可知，影响冷隔缺陷的主要因素分为如下三个方面：

(1) 界面前沿凝固状态：所谓的界面前沿凝固状态，代表界面前沿金属内部的枝晶生长情况。当界面前沿凝固程度越高，表示界面前沿交汇之后越难形成有效的熔合，冷隔缺陷的倾向越大。

(2) 界面前沿碰撞剧烈程度：所谓的界面前沿碰撞剧烈程度，代表界面前沿金属相互混合的程度。当界面前沿碰撞越剧烈，表示界面前沿交汇的混合程度越高，越不利于形成有效的熔合，冷隔缺陷的倾向越大。

(3) 界面前沿汇聚程度：所谓的界面前沿汇聚程度，代表界面前沿金属交汇的多少。当界面前沿汇聚程度越高，表示参与界面前沿交汇的金属量越多，冷隔缺陷的倾向越大。

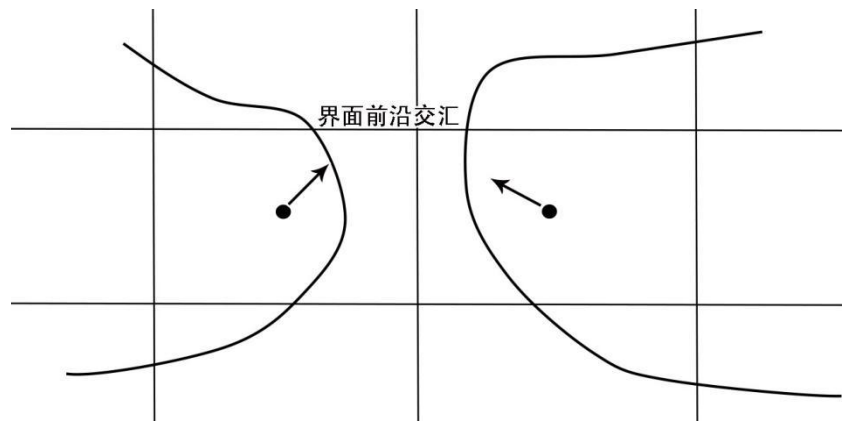


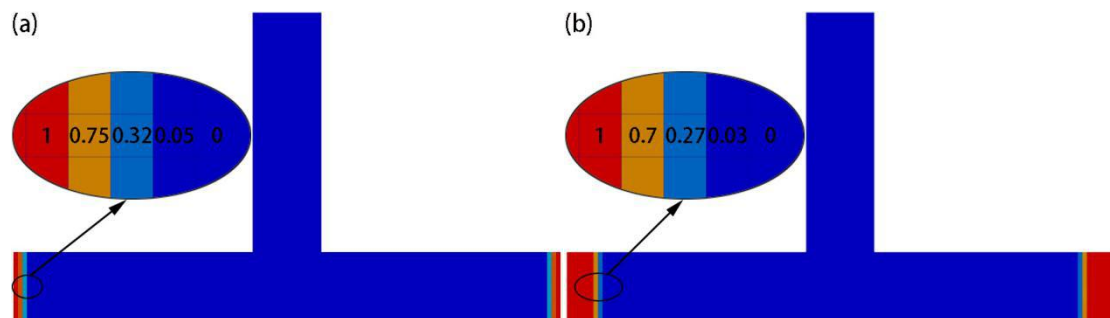
图 3-2 界面前沿交汇示意图

Fig. 3-2 Frontal interface intersection diagram

3.3 流动界面前沿及其碰撞判断

判断界面前沿及其碰撞是预测冷隔缺陷的基础所在。如第 2 章所述，本文的流动数学模型采用隐式界面追踪算法，即根据相体积比的变化来表征界面，易于处理复杂界面的几何拓扑变化以及考虑表面张力的影响。但隐式界面追踪算法本质上属于连续性模型，求解过程中不可避免地会出现界面扩散现象。虽然本文采用的 VOF-PLIC 算法能够在一定程度上控制界面扩散，但并不能得到类似于显式界面追踪算法中的明锐界面前沿。

图 3-3 为采用 VOF-PLIC 算法计算简单充型算例的气液两相分布模拟结果，其中，左右两个端面为进水口，上端面为出气口。从模拟结果可以看出，即使只是计算简单的液面前沿推进情形，VOF-PLIC 算法也只能得到具有一定宽度的界面前沿。然而，冷隔缺陷预测需要明确的界面前沿，才能进行后续界面前沿碰撞判断，以及确定生成冷隔缺陷的具体位置。



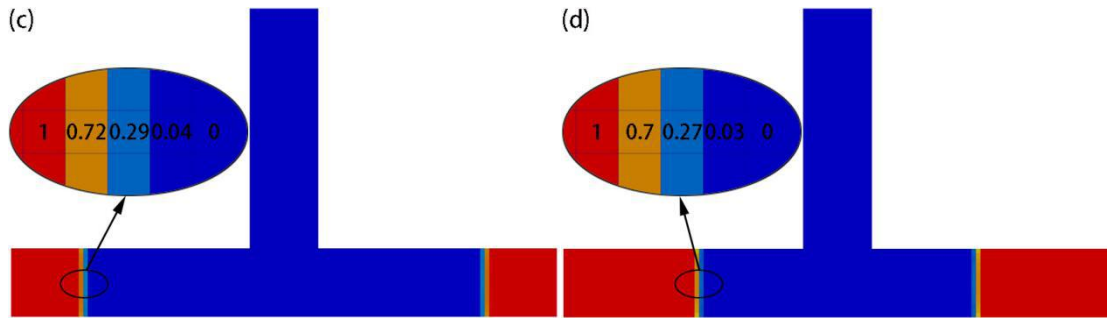


图 3-3 不同时刻下 VOF-PLIC 算法获得的界面前沿(图中数字代表液相体积比): (a) 0.06 s; (b) 0.2 s; (c) 0.46 s; (d) 0.86 s

Fig. 3-3 Interface fronts obtained by VOF-PLIC algorithm at different times (The numbers in the figures represent the liquid volume ratio): (a) 0.06 s; (b) 0.2 s; (c) 0.46 s; (d) 0.86 s

结合上述分析内容可知, 本文第 2 章中铸造充型过程数值模拟所得到的界面前沿并不能直接用于冷隔缺陷预测, 且流场基础算法需维持不变, 因此, 需要在已有的界面前沿信息的基础上, 结合冷隔缺陷演化机理, 提出适用于冷隔缺陷预测的界面前沿判断算法。另外, 考虑到界面前沿碰撞也是冷隔缺陷预测的基础工作之一, 因此, 在获得适用于冷隔缺陷预测的界面前沿后, 需要提出相关算法, 用于表征界面前沿碰撞。下面将从界面前沿判断和界面前沿碰撞判断两个方面进行说明。

(1) 界面前沿判断

冷隔缺陷预测所需的界面前沿仍然依据单元的相体积比 α 来判断。如果认为 α 值在 0 和 1 之间的所有单元均为界面前沿, 将获得十分粗糙的界面前沿。考虑到冷隔缺陷预测所需的界面前沿是明锐的, 结合图 3-3 所示的扩散型界面前沿, 并通过大量的计算测试, 本文提出的界面前沿判断策略为: 首先, 对每个单元自身的 α 值进行判断, α 值需在 0.1 和 0.9 之间; 然后, 对该单元的所有相邻单元的 α 值进行判断, 需存在有两个相邻单元的 α 值分别高于 0.7 和低于 0.3; 最后, 同时满足上述两个条件的单元即为界面前沿单元。因此, 可得判断界面前沿的方法为:

$$0.1 < \alpha_p < 0.9 \ \&\& \ \alpha_{A1} > 0.7 \ \&\& \ \alpha_{A2} < 0.3 \quad (3-1)$$

式中, α_p 为单元自身的 α 值; α_{A1} 为某相邻单元 1 的 α 值; α_{A2} 为某相邻单元 2 的 α 值。

图 3-4 为针对简单充型算例, 采用式(3-1)所判断的界面前沿结果。从判断结果可

以看出，所寻找出的界面前沿为单层界面(图 3-4d~f)，且较好地对应了 α 值分布结果(图 3-4a~c)，适用于后续冷隔缺陷预测的研究工作。因此，可认为本文所提出的界面前沿判断方法是有效的。

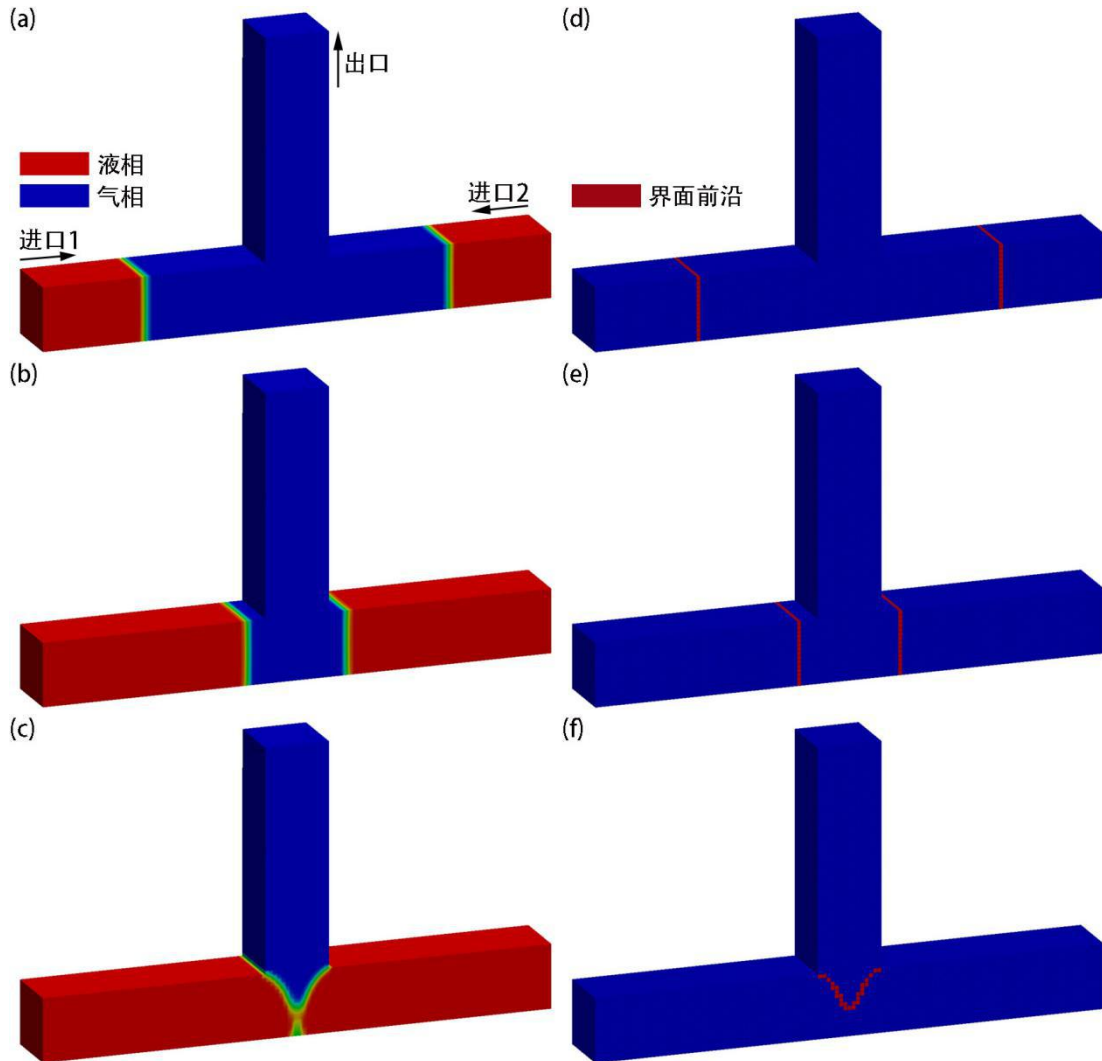


图 3-4 针对简单充型算例所判断的不同时刻(0.68 s(a, d)、1.38 s(b, e)和 1.66 s(c, f))下界面前沿结果：(a~c) 两相体积比；(d~f) 界面前沿

Fig. 3-4 The interface front results at different times (0.68 s(a, d), 1.38 s(b, e), and 1.66 s(c, f)) determined for the simple filling example: (a~c) two-phase volume ratio; (d~f) interface fronts

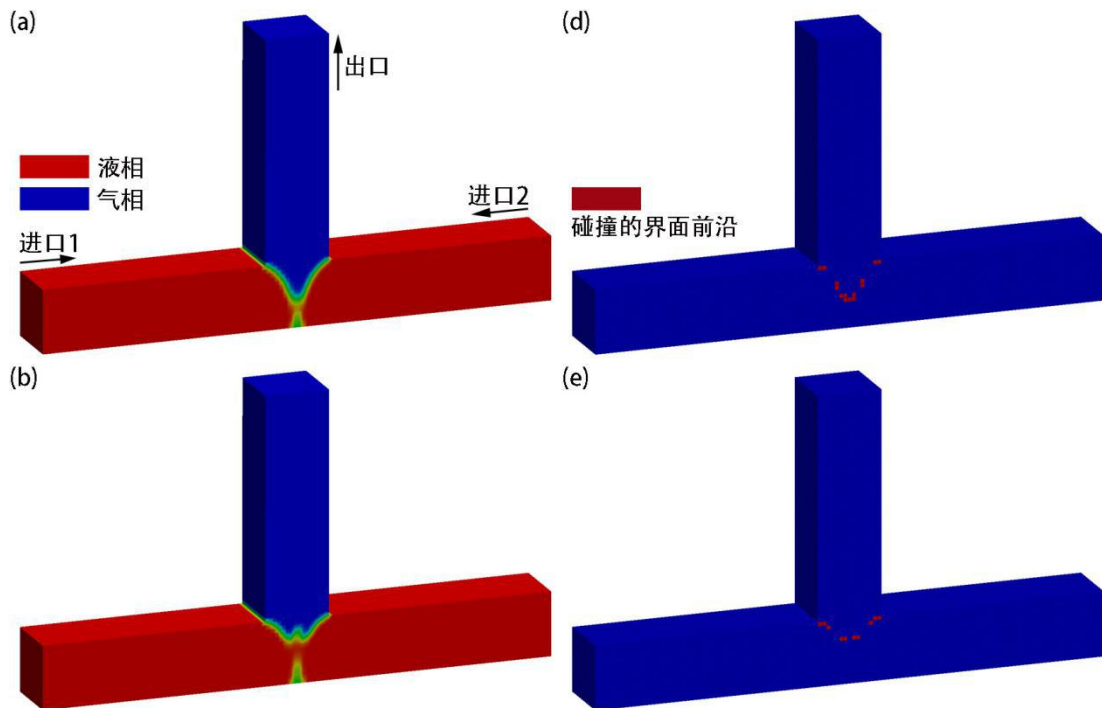
(2) 界面前沿碰撞判断

由于冷隔缺陷是金属液界面前沿交汇产生的，在判断出界面前沿之后，需判断界面前沿之间的碰撞，即寻找出哪些界面前沿单元即将发生碰撞。参照拉格朗日粒子追踪的思想^[153]，即在较短的时间步长内，粒子下一时刻的位置由粒子当前的位置和

速度所决定，本文认为当两个界面前沿单元下一时刻所在位置发生重叠时，这两个单元即为碰撞的界面前沿单元。另外，考虑到数值求解过程中，可以控制界面前沿每个时间步长内最多向前推进一个网格步长，故本文认为界面前沿碰撞只会发生在两相邻界面前沿单元之间。

因此，本文所提出的判断界面前沿碰撞的策略为：首先，自身单元以及至少存在一个相邻单元均为界面前沿单元；其次，自身单元和此相邻单元的速度均需通过接触面(即两者下一时刻所在位置发生重叠)。具体而言，当自身单元和一相邻单元均为界面前沿单元时，在如下三种情形下可认为这两个单元即将发生碰撞：① 自身单元速度为 0 或平行接触面，相邻单元速度通过接触面；② 自身单元速度通过接触面，相邻单元速度为 0 或平行接触面；③ 自身单元速度通过接触面，相邻单元速度通过接触面。

图 3-5 为针对简单充型算例，采用此碰撞判断方法得到的碰撞的前沿单元。从判断结果可以看出，此算法较好地判断出由界面前沿碰撞所带来的前沿接触单元，所寻找出的碰撞的前沿单元结果(图 3-5d~f)较好地对应了 α 值分布结果(图 3-5a~c)。因此，可以认为本文所提出的界面前沿碰撞判断方法是可行的。



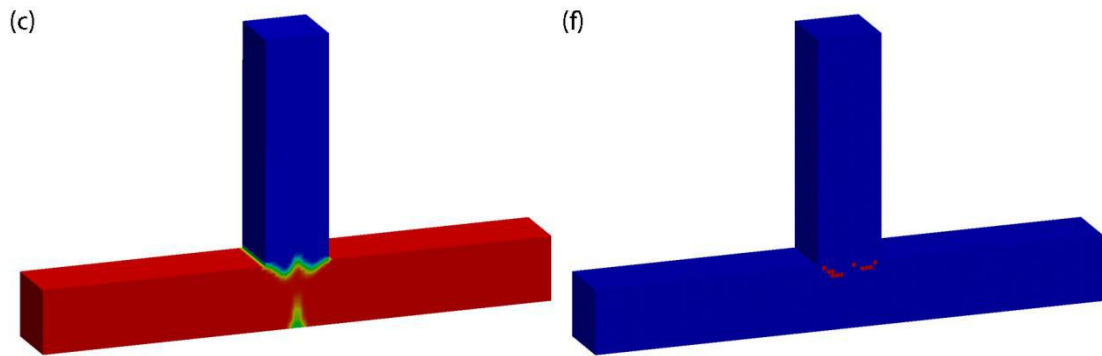


图 3-5 针对简单充型算例所判断的不同时刻(1.66 s(a, d)、1.68 s(b, e)和 1.70 s(c, f))下碰撞的界面前沿结果：(a~c) 两相体积比；(d~f) 碰撞的界面前沿

Fig. 3-5 The collision front results at different times (1.66 s(a, d), 1.68 s(b, e), and 1.70 s(c, f)) determined for the simple filling example: (a~c) two-phase volume ratio; (d~f) collision fronts

3.4 冷隔缺陷生成模型

如上所述，影响冷隔缺陷的主要因素为界面前沿的凝固状态、碰撞剧烈程度以及汇聚程度。从数值计算的角度而言，影响因素只有等效为对应的物理量计算表达式，才能在求解过程中得以体现。考虑到 OpenFOAM 中内部的物理场信息均保存在单元体心，本文采用单元固相率 ϕ 来表征界面前沿的凝固状态，采用单元速度 U 来表征界面前沿的碰撞剧烈程度，采用单元金属相体积比 α 来表征界面前沿的汇聚程度。图 3-6 为冷隔缺陷影响因素的示意图，图中 P 代表自身单元， A 代表相邻单元。

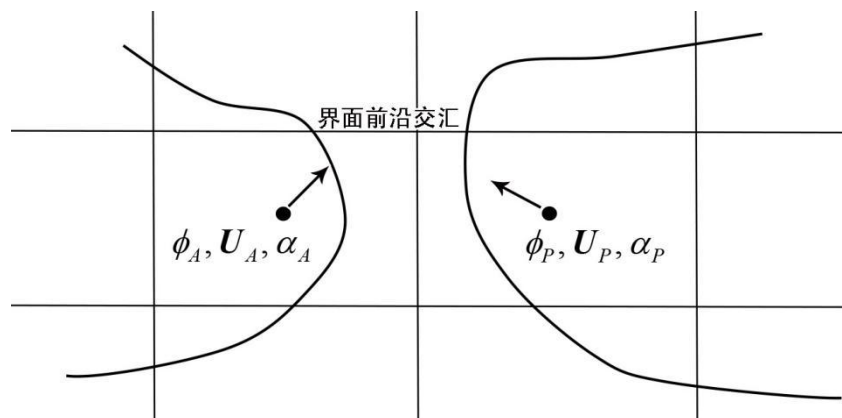


图 3-6 冷隔缺陷影响因素示意图

Fig. 3-6 Schematic of influencing factors to cold shut defect

因此，冷隔缺陷生成模型需要综合考虑单元固相率 ϕ 、单元速度 U 和单元金属相体积比 α ，下面分别对这三个影响因素进行分析。

(1) 固相率影响因子

考虑到两股金属液交汇，只有当其中一股液面前沿已部分凝固时，才有可能产生冷隔缺陷。本文认为只有当固相率 ϕ 高于0.1时，才会对冷隔形成产生影响，可得此条件表达式为：

$$C_{\phi 1} = \text{sgn}(\max(\phi - 0.1, 0.0)) \quad (3-2)$$

式中， sgn 为符号函数(数据值大于0时返回1，等于0时返回0，小于0时返回-1)； \max 为较大值函数(返回较大的数据值)。

考虑到界面前沿越接近固相，冷隔越明显，且当固相率较大时，冷隔缺陷明显增加。所以本文提出的影响因子表达式为：

$$C_{\phi 2} = \frac{0.1}{1.1 - \phi} - 0.1 \quad (3-3)$$

将式(3-2)和式(3-3)综合起来，可得固相率影响因子 β_{ϕ} 为：

$$\beta_{\phi} = C_{\phi 1} \cdot C_{\phi 2} = \left(\frac{0.1}{1.1 - \phi} - 0.1 \right) \cdot \text{sgn}(\max(\phi - 0.1, 0.0)) \quad (3-4)$$

图3-7为固相率影响因子变化曲线。从图中可以看出，当固相率低于0.1时，影响因子为0，即不会产生冷隔缺陷。当固相率处于较低水平时，影响因子随固相率的增大而缓慢增加，即较低固相率下的冷隔生成量较小。当固相率处于较高水平时，影响因子随固相率的增大而快速增加(固相率为1时的影响因子是固相率为0.5时的13.5倍)，即较高固相率下的冷隔生成量较大。

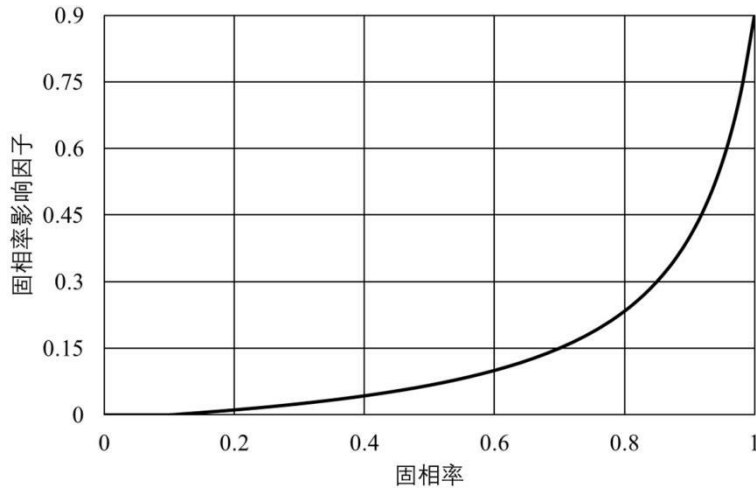


图 3-7 固相率影响因子变化曲线

Fig. 3-7 Change curve of solid phase rate influence factor

(2) 速度影响因子

速度 U 可用于表征界面前沿碰撞的剧烈程度, 准确而言, 认为单元速度在接触面法向的分量代表碰撞的剧烈程度。考虑到可能存在多个相邻的碰撞前沿单元, 所以需要针对所有对应的接触面进行计算。因此, 本文提出的速度影响因子 β_U 为:

$$\beta_U = \sum_{i=1}^N (\mathbf{U}_P \cdot \mathbf{n}_i) \quad (3-5)$$

式中, N 为相邻的碰撞前沿单元的个数; \mathbf{U}_P 为自身单元的速度, m/s; \mathbf{n}_i 为与相邻的碰撞前沿单元相对应的接触面外法向单位向量。

(3) 金属相体积比影响因子

金属相体积比 α 代表碰撞前沿单元的金属相的多少, 本文认为冷隔的生成量与金属相的多少呈线性关系。因此, 本文所提出的金属相体积比影响因子 β_α 为:

$$\beta_\alpha = \alpha \quad (3-6)$$

将上述不同因素的影响因子(式(3-4)、式(3-5)和式(3-6))综合起来, 可得冷隔缺陷生成模型为:

$$\beta_g = A_\beta \beta_\phi \beta_U \beta_\alpha = A_\beta \cdot \left(\frac{0.1}{1.1 - \phi} - 0.1 \right) \cdot \text{sgn}(\max(\phi - 0.1, 0.0)) \cdot \left[\sum_{i=1}^N (\mathbf{U}_P \cdot \mathbf{n}_i) \right] \cdot \alpha \quad (3-7)$$

式中， β_g 为冷隔缺陷生成量(本文采用无量纲标量来表征冷隔缺陷)； A_β 为冷隔缺陷生成常量，需结合实际生产确定。

获得冷隔缺陷生成模型(式(3-7))后，本文采用输运方程对铸造充型过程中的冷隔缺陷运动进行追踪：

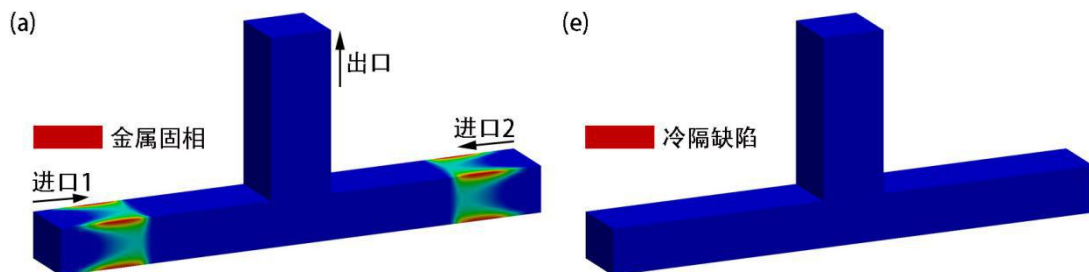
$$\frac{\partial \beta_b}{\partial t} + \nabla \cdot (U\beta_b) = 0 \quad (3-8)$$

式中， β_b 为金属相内部之前累积的冷隔缺陷。

由式(3-7)和式(3-8)，可得当前的冷隔缺陷含量 β_c 为：

$$\beta_c = \beta_b + \beta_g \quad (3-9)$$

采用本文所提出的冷隔缺陷生成模型，对上述简单充型算例进行冷隔缺陷计算，图 3-8 为不同时刻下的金属相固相率和冷隔缺陷分布。需要说明的是，在此计算算例中，特意将壁面处对流换热系数设置很大，目的是使得壁面处金属相快速凝固。由计算结果可以看出，充型初期只有少部分金属相发生液固转变，且固相率较低，基本上无冷隔缺陷产生(图 3-8a, e)。当金属相继续向前推进时，由于部分金属相固相率较高，高固相率单元与其他单元发生碰撞，生成了少量冷隔缺陷。需注意的是，此时的冷隔缺陷是同一液面前沿上的相邻单元发生碰撞所产生的(图 3-8b, f)。当两液面前沿发生碰撞时，冷隔缺陷明显增加(图 3-8c, g)。随着充型过程继续进行，冷隔缺陷会随着金属相发生运动(图 3-8d, h)。通过上述分析可知，针对此算例的冷隔缺陷预测结果满足基本的冷隔缺陷演化机理。因此，可以初步地认为本文提出的冷隔缺陷预测模型是可行的。



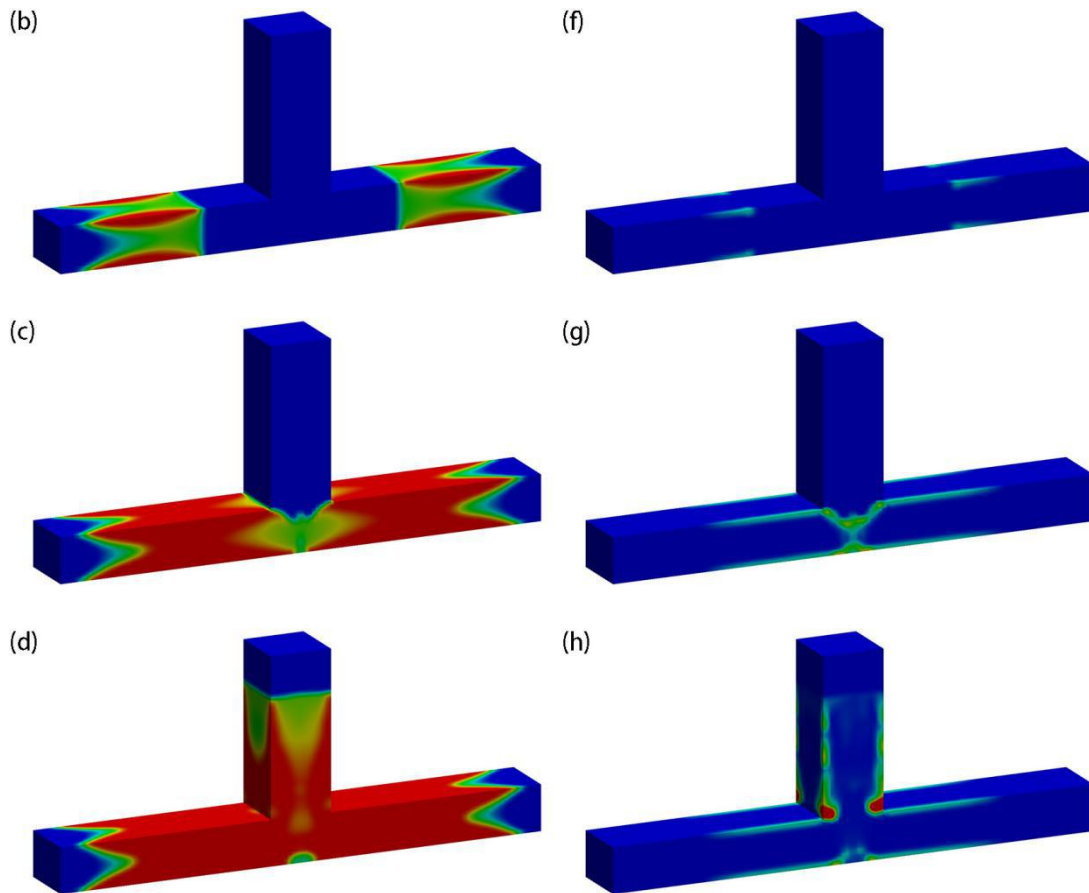


图 3-8 针对简单充型算例所计算的不同时刻(0.62 s(a, e)、1.02 s(b, f)、1.7 s(c, g)和 2.3 s(d, h))下的冷隔缺陷分布: (a~d) 金属相固相率; (e~h) 冷隔缺陷

Fig. 3-8 The cold shut distributions at different times (0.62 s(a, e), 1.02 s(b, f), 1.7 s(c, g), and 2.3 s(d, h)) determined for the simple filling example: (a~d) metal phase solid fraction; (e~h) cold shut defect

3.5 冷隔缺陷数值计算方法

得到上述冷隔缺陷生成模型和流动界面前沿及其碰撞判断算法后,本文在已开发的铸造充型过程求解器的基础上,完成铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器的开发工作。下面将从自定义求解器和数值求解流程两个方面进行说明。冷隔缺陷预测求解器仍然是基于开源代码 OpenFOAM 的框架,因此,自定义此求解器的主要工作是添加相关的功能(寻找界面前沿和判断界面前沿碰撞)、计算冷隔缺陷的生成量和自定义冷隔缺陷控制方程。

3.5.1 自定义求解器

(1) 寻找界面前沿

在 createFields.H 文件中添加标量场 *intersection*，用于记录界面前沿单元(1 代表为界面前沿单元，0 代表不为界面前沿单元)。

新建文件 intersectionEqn.H，结合式(3-1)，完成寻找界面前沿的功能。实现代码如下：

```
forAll (intersection, celli)
{
    if(phase1alpha[celli]>0.1 && phase1alpha[celli]<0.9)
    {
        labelList adjacent=mesh.cellCells()[celli];bool i_a=false; bool i_b=false;
        for(int j=0; j<adjacent.size(); j++)
        {
            if(phase1alpha[adjacent[j]]>0.7){i_a=true;}
            if(phase1alpha[adjacent[j]]<0.3){i_b=true;}
        }
        if(true==i_a && true==i_b){intersection[celli]=1.0;}
        else{intersection[celli]=0.0;}
    }
    else{intersection[celli]=0.0;}
}
```

(2) 判断界面前沿碰撞

在 createFields.H 文件中添加标量场 *currentIntersection*，用于记录碰撞的界面前沿单元(1 代表为碰撞的界面前沿单元，0 代表不为碰撞的界面前沿单元)。

参照上述界面前沿碰撞判断的算法，需要判断单元速度是否通过接触面，判断公式为：

$$\psi = \frac{\mathbf{n}_c \cdot (\mathbf{C}_c - \mathbf{C}_p)}{\mathbf{n}_c \cdot \mathbf{U}_p} \quad (3-10)$$

式中， \mathbf{n}_c 为接触面法向单位向量； \mathbf{C}_c 为相邻单元的体心坐标； \mathbf{C}_p 为自身单元的体心坐标； \mathbf{U}_p 为自身单元的体心速度； $\psi > 0$ 表示单元速度通过接触面。

实际数值求解过程中，为了明显区分单元速度是否通过接触面，本文认为单元速度与接触面法向之间的夹角小于 70° 时才为通过。在文件 `intersectionEqn.H` 中，完成判断界面前沿碰撞的功能。实现代码如下：

```
scalar i_a=0.0; scalar i_b=0.0; scalar i_c=0.0; scalar i_d=0.0;
if(mag(velocity_a)<1e-10){i_a=0.0;}
else{velocity_a /= mag(velocity_a); i_a=velocity_a & faceVector;}
if(mag(velocity_b)<1e-10){i_b=0.0;}
else{velocity_b /= mag(velocity_b); i_b=velocity_b & faceVector;}
if((i_a>-0.342 && i_a<0.342) && (i_b>-0.342 && i_b<0.342)){break;}
if((i_a<=-0.342 || i_a>=0.342) && (i_b<=-0.342 || i_b>=0.342))
{
    i_c=((faceCenter & faceVector)-(center_a & faceVector))/i_a;
    i_d=((faceCenter & faceVector)-(center_b & faceVector))/i_b;
    if(i_c>0.0 && i_d>0.0)
{currentIntersection[celli]=1.0; currentIntersection[adjacent[j]]=1.0; break;}
}
if((i_a>-0.342 && i_a<0.342) && (i_b<=-0.342 || i_b>=0.342))
{
    i_d=((faceCenter & faceVector)-(center_b & faceVector))/i_b;
    if(i_d>0.0)
{currentIntersection[celli]=1.0; currentIntersection[adjacent[j]]=1.0; break;}
}
if((i_a<=-0.342 || i_a>=0.342) && (i_b>-0.342 && i_b<0.342))
{
    i_c=((faceCenter & faceVector)-(center_a & faceVector))/i_a;
    if(i_c>0.0)
{currentIntersection[celli]=1.0; currentIntersection[adjacent[j]]=1.0; break;}
```

```
}
```

(3) 计算冷隔的生成及运动

在 createFields.H 文件中添加标量场 *coldShut*, 用于记录冷隔缺陷分布。定义物性参数 *coldShutConstant*, 用于代表冷隔缺陷生成常量。实现代码为:

```
dimensionedScalar coldShutConstant  
(transportProperties.lookup("coldShutConstant"));
```

新建文件 *coldShutEqn.H*, 完成计算冷隔缺陷的生成和自定义冷隔缺陷控制方程。计算冷隔缺陷生成量的实现代码如下:

```
volScalarField i_currentRatio("i_currentRatio", currentIntersection);  
forAll(currentIntersection, celli)  
{ if(1.0==currentIntersection[celli])  
  { scalar i_fractionFactor=0.0;  
    if(Sfraction[celli]>=0.1)  
      {i_fractionFactor=(0.1/(1.1-Sfraction[celli]))-0.1;}  
    scalar i_velocityFactor=0.0;labelList adjacent=mesh.cellCells()[celli];  
    const cell& c_a = meshCells[celli];  
    for(int j=0; j<adjacent.size(); j++)  
      { if(0.0==currentIntersection[adjacent[j]]){continue;}  
        vector faceVector(0.0,0.0,0.0);  
        const cell& c_b = meshCells[adjacent[j]];bool i_judge=false;  
        forAll (c_a, k)  
          { forAll (c_b, m)  
            { if(Cf[c_a[k]]==Cf[c_b[m]])  
              { faceVector=Sf[c_a[k]]; faceVector /= mag(faceVector);  
                i_judge=true;break;}}  
            if(true==i_judge){break;}}  
        vector velocity_a=U[celli];scalar i_a=0.0;  
        if(mag(velocity_a)>=1e-10)  
          {velocity_a /= mag(velocity_a);i_a=velocity_a & faceVector;}  
        if(i_a>-0.342 && i_a<0.342){continue;}
```

```

else{
i_velocityFactor += mag(((U[celli] & faceVector)/magSqr(faceVector))*faceVector);
}}
i_currentRatio[celli]=coldShutConstant.value()*i_fractionFactor*i_velocityFactor;
}else{i_currentRatio[celli]=0.0;}
}i_currentRatio.correctBoundaryConditions();
自定义冷隔缺陷控制方程的实现代码如下:
fvScalarMatrix coldShutEqn
(fvm::ddt(coldShut)+ fvm::div(phi,coldShut)==fvOptions(coldShut));
coldShutEqn.relax();fvOptions.constrain(coldShutEqn);
coldShutEqn.solve();fvOptions.correct(coldShut);
forAll(coldShut, celli)
{if(coldShut[celli]<0.0){coldShut[celli]=0.0;}}
coldShut == coldShut+i_currentRatio;
    
```

3.5.2 数值求解流程

结合上述冷隔缺陷数值模型以及自定义求解器过程可知，相比于铸造充型过程计算流程而言，冷隔缺陷预测的计算流程增加了两个计算步骤(界面前沿及其碰撞判断和冷隔缺陷生成及追踪)。图 3-9 为铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器的计算流程图。

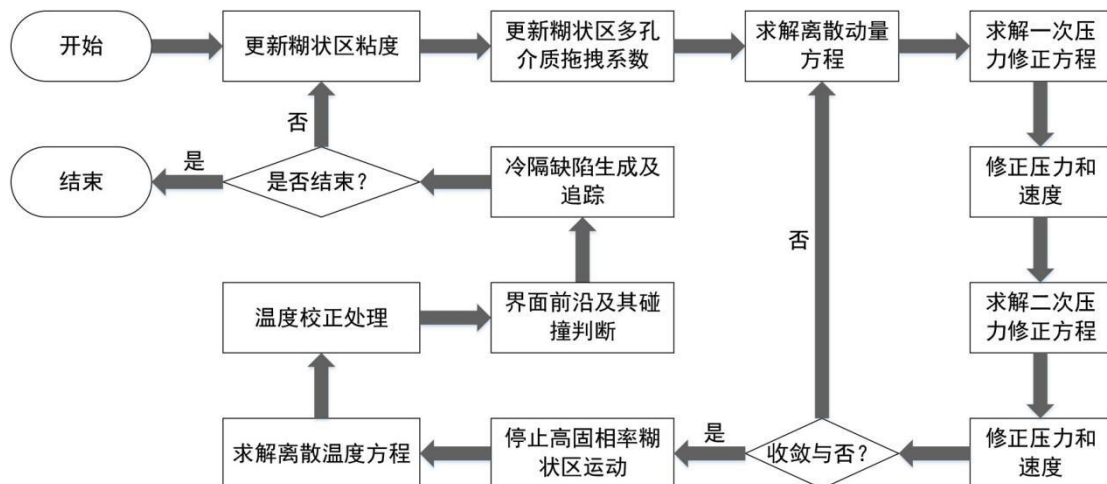


图 3-9 铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器的计算流程图

Fig. 3-9 Calculation flow chart of cold shut prediction solver in casting filling process

3.6 本章小结

(1) 微观尺度上,冷隔缺陷形成的原因是金属液面熔合过程中,某一液面处的晶粒已生长较为充分,原子的扩散和运动能力较差,无法与其他晶粒形成牢固的连接。影响冷隔的主要因素为界面前沿的凝固状态、碰撞剧烈程度和汇聚程度。

(2) 考虑到 VOF 算法只能得到扩散型界面前沿,在已有的界面前沿信息的基础上,提出了适用于冷隔缺陷预测的界面前沿判断算法。

(3) 考虑到冷隔缺陷是由金属液界面前沿交汇产生的,参照拉格朗日粒子追踪的思想,提出了适用于冷隔缺陷预测的判断界面前沿碰撞的算法。

(4) 结合冷隔缺陷演化机理,提出了一考虑金属相固相率、速度及金属相体积比的冷隔缺陷生成模型,并在铸造充型过程求解器的基础上,开发了铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器。

第 4 章 氧化夹渣缺陷演化机理及预测模型

4.1 引言

氧化夹渣是铸件生产(尤其是有色合金铸件)中常见的缺陷。依据氧化夹渣缺陷特征和产生的部位,可以分为初次夹渣(熔炼过程中形成的)和二次夹渣(浇注时产生的)。大量生产试验表明,大部分的铸件氧化夹渣缺陷是由于二次夹渣(多数还伴随卷入空气而呈圆形蜂窝状)不能有效地截留在浇道中,而带入铸型所造成的^[154]。由此可见,氧化夹渣缺陷的产生是一复杂的物理化学变化过程,并处于气液固多相耦合流动状态。实际铸件生产中,主要从熔炼合金保护和优化浇注系统两方面来控制氧化夹渣缺陷,但往往只能依靠生产经验进行摸索,缺乏系统化分析手段^[155]。由于目前实验手段只能对铸件最终的氧化夹渣缺陷进行分析,难以直接观测氧化夹渣缺陷的形成和演变过程。因此,进行针对氧化夹渣缺陷的数值模拟研究具有重要的理论和实用价值。

考虑到大部分氧化夹渣缺陷为二次夹渣,所以氧化夹渣缺陷预测的关键之一是计算氧化夹渣缺陷的生成量,这也是相关数值计算的前提所在。虽然目前针对氧化夹渣缺陷预测,已提出多种数值计算模型(判据模型^[124]、标量模型^[125]和欧拉-拉格朗日模型^[129]),但相关模型只能定性地判断氧化夹渣缺陷的形成与否(如认为铝合金金属液自由表面流速超过 0.5 m/s 时,将产生紊态自由表面,进而生成氧化夹渣^[124]),或者简单地采用颗粒相来描述氧化夹渣缺陷的形态和运动过程(颗粒相与氧化夹渣形态并无明确对应关系)。因此,有必要结合氧化夹渣缺陷演化机理,提出全面合理的氧化夹渣缺陷生成速率计算模型。

实际铸造充型过程(尤其是金属型铸造)中,液面前沿的氧化夹渣易粘附在铸型内腔壁面上,甚至会不断累积。当取出铸件后,在原先氧化夹渣粘附和累积的部位会出现表面氧化夹渣层,如果浇道未能有效地集渣,铸件本体的表面质量将受到严重影响(实际生产中称铸件比较“脏”)。而目前关于氧化夹渣缺陷预测的研究工作中,并未考虑氧化夹渣缺陷的粘附和累积效应。因此,有必要结合氧化夹渣缺陷演化机理,提出合理的氧化夹渣缺陷壁面粘附模型。

为了定量化预测铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的演化过程,本文在已开发的铸造

充型过程求解器的基础上,进行铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的开发。为了定量化预测氧化夹渣缺陷,提出相应的氧化夹渣缺陷生成速率计算模型。为了描述铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的粘附和累积效应,提出相应的氧化夹渣缺陷壁面粘附模型。

4.2 氧化夹渣缺陷演化机理

除少数特殊铸造工艺(如真空铸造等)以外,在绝大部分铸造充型过程中,与氧亲和力和较强的活泼金属元素(如 Al、Cu、Mn、Fe 和 Ni 等)都不可避免地会与空气接触,生成各式各样的氧化物(如 Al_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 ZnO 和 SiO_2 等)。这些氧化物将以夹渣的形式存在于整个铸造充型过程中(因此而称为氧化夹渣),一方面影响金属相的充型流动过程,另一方面影响凝固过程中的枝晶生长,且最终作为夹渣物,将严重影响铸件组织的连续性。

图 4-1 为通过实验手段观察到的孔松和裂纹处的氧化夹渣。由图 4-1a 可以明显看出,在铸件内部孔松处,二次枝晶周围覆盖有氧化夹渣。其原因是,当已产生的氧化夹渣以某种方式被卷入到金属液内部后,随着铸件逐渐凝固(枝晶逐渐长大),氧化夹渣会逐渐与枝晶接触,阻碍了枝晶的进一步长大,进而形成孔松缺陷(当然,孔松缺陷的形成原因多种多样,这里只是重点说明了氧化夹渣对孔松的影响)。由图 4-1b~d 可以明显看出,某些铸件的断裂现象完全是由氧化夹渣所引起的。一般而言,当铸件内部含有大面积的氧化夹渣时,可以视为一裂纹源。当铸件受力时,在氧化夹渣周围产生应力集中,造成裂纹面扩展,进而导致断裂。因此,当浇注系统布置不合理或充型过程过于紊乱时,所形成的氧化夹渣不能有效地截留在浇注系统中,进而严重影响铸件表面质量和力学性能。

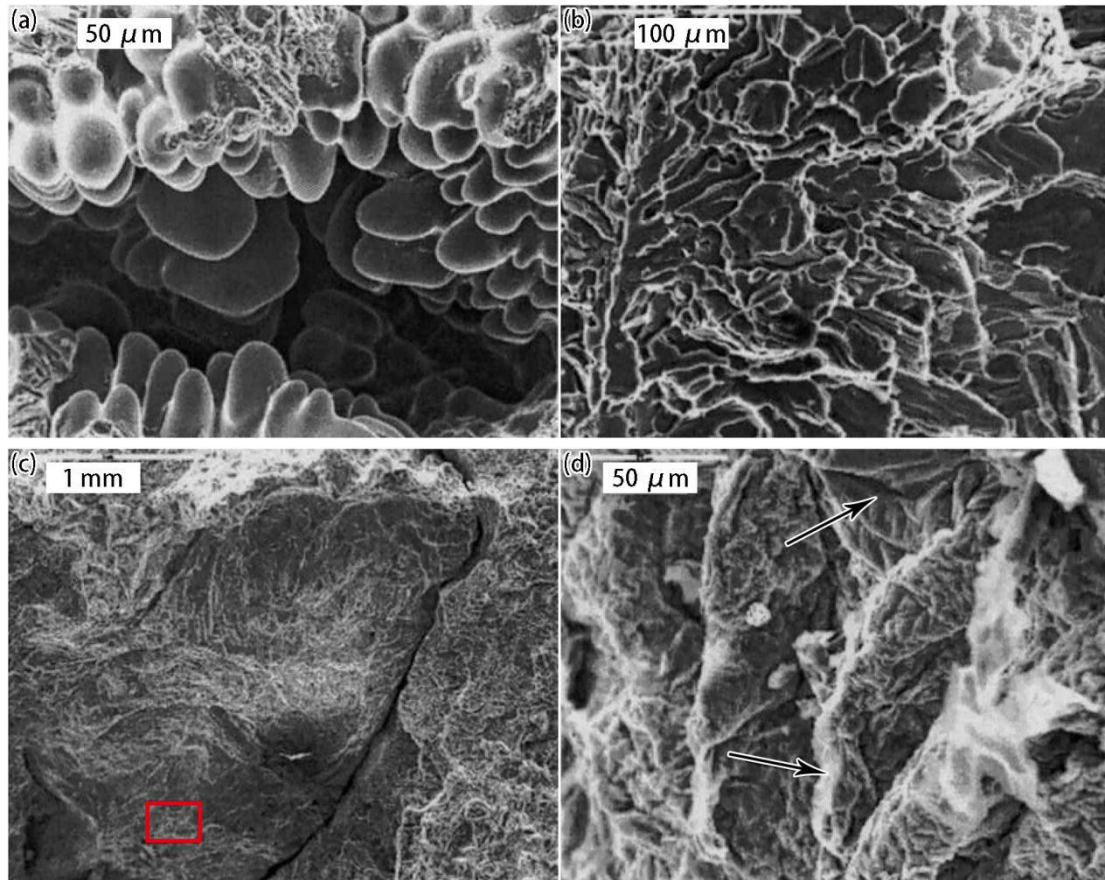


图 4-1 孔松和裂纹处的氧化夹渣^[115]: (a) 孔松处二次枝晶覆盖有氧化夹渣; (b, c) 断裂面的表面形貌(覆盖有氧化夹渣); (d) 断裂面部位的放大图(c 中红框部位)

Fig. 4-1 Oxide inclusion at shrinkage and cracks^[115]: (a) secondary dendrites covered with oxide inclusion at shrinkage; (b, c) surface morphology of fracture surface (covered with oxide inclusion); (d) an enlarged view of the fracture surface (red frame in figure c)

接着对氧化夹渣缺陷的形成和演变过程进行描述: 在充型过程初始阶段, 由于金属液易被空气氧化, 液面前沿会立即生成一层极薄的氧化膜, 并不断加厚。对于充型较为平稳的流动过程而言, 当液面前沿积累了一定的氧化夹渣后, 由于金属液与空气被已产生的氧化夹渣膜所隔绝, 两者之间的氧化反应将会停止。对于充型较为紊乱的流动过程而言, 由于液面前沿波动较大, 已产生的氧化夹渣一部分与铸型壁面发生碰撞而粘附在铸型壁面之上, 其他部分被卷入到金属液内部并跟随流体运动。另一方面, 对于充型较为紊乱的流动过程而言(图 4-2), 空气易被卷入到金属液内部, 使得在金属液内部产生氧化夹渣。

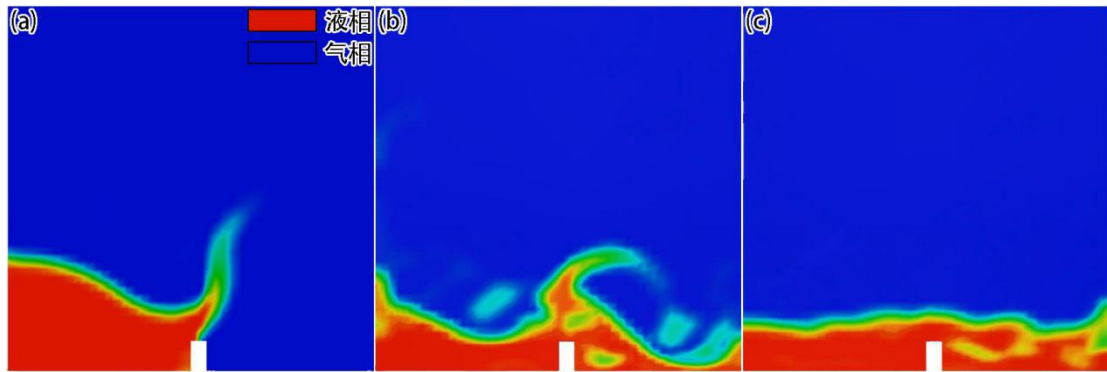


图 4-2 紊乱流动过程中的卷气现象：(a) 0.3 s；(b) 1.2 s；(c) 3.1 s

通过上述分析可知，氧化夹渣缺陷的产生是一复杂的物理化学变化过程，铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的影响因素主要包括：金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣。

(1) 金属液-空气接触程度：所谓的金属液-空气接触程度，代表金属液与空气的接触面积。一般而言，金属液与空气的接触面积越大，氧化反应越剧烈，氧化夹渣生成量越大。针对轻合金铸造过程氧化夹渣缺陷的形成，充型过程中由于自由表面的翻卷折叠而产生瞬态自由表面与平稳充型时的自由表面面积之差，即“过剩”自由表面面积，可作为氧化夹渣卷入的判据。

(2) 金属液温度：氧化夹渣的产生本质上是一化学反应过程，金属液温度的高低决定了此反应过程的剧烈程度。一般而言，金属液温度越高，氧化反应越剧烈，氧化夹渣生成量越大。

(3) 已产生的氧化夹渣：当液面前沿上的氧化夹渣累积到一定程度之后，将会阻碍金属液与空气间的氧化反应，即可以认为当某个部位的氧化夹渣达到一定程度之后，该部位的氧化反应会停止。

4.3 氧化夹渣缺陷生成速率计算模型

如上所述，铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的主要影响因素为金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣。从数值计算的角度而言，影响因素只有等效为对应的物理量计算表达式，才能在求解过程中得以体现。由于铸造充型过程中液面前沿变化剧烈，加上本文计算得到的界面为扩散型界面，使得难以实时计算金属液与空气之间的接触面积。考虑到氧化夹渣缺陷生成速率的计算是针对单元而言的，

于是本文采用金属相体积比 α 用于表征金属液-空气接触程度。金属液温度和已产生的氧化夹渣的影响分别由温度 T 和当前氧化夹渣密度 $\chi_{current}$ 来表征。因此，氧化夹渣缺陷生成速率模型需要综合考虑单元金属相体积比 α 、单元温度 T 和单元当前氧化夹渣密度 $\chi_{current}$ ，下面分别对这三个影响因素进行分析。

(1) 金属相体积比影响因子

氧化夹渣的产生本质上是一氧化反应，而所有化学反应速率的快慢与组分含量密切相关。开源代码 OpenFOAM 中的化学燃烧求解器 reactingFoam 所采用的燃烧速率计算公式^[156]为：

$$\dot{\omega}_{fuel} = -L\bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\tilde{Y}_{fuel}, \frac{\tilde{Y}_{ox}}{M}\right) \quad (4-1)$$

式中， $\dot{\omega}_{fuel}$ 为燃烧速率, kg/m³/s； L 为模型常数； $\bar{\rho}$ 为单元平均密度, kg/m³； k 为湍流脉动动能, m²/s²； ε 为湍流脉动动能的耗散率, m²/s³； \tilde{Y}_{fuel} 和 \tilde{Y}_{ox} 分别为单元内燃料和氧气的体积比； M 为燃烧所需的氧气与燃料的化学计量比。

由式(4-1)可知，当单元内化学反应组分均充足时，反应速率最大。与此类似，本文认为金属相体积比 α 代表参加氧化反应的金属相的多少， $1-\alpha$ 代表参加氧化反应的空气的多少。当单元内全为金属液或空气时，认为此单元内的氧化夹渣生成速率为 0。因此，本文提出的金属相体积比影响因子 S_α 为：

$$S_\alpha = \alpha(1-\alpha) \quad (4-2)$$

图 4-3 是由式(4-2)得到的金属相体积比影响因子 S_α 变化曲线。从图中可以看出，当单元内金属相和空气均充足时，氧化反应速率最大，即氧化夹渣生成量最多。需要说明的是，绝大部分的两组分化学反应并不是当组分含量(体积分数)完全一致时，反应速率最大。而本文之所以认为 $\alpha = 0.5$ 时氧化反应速率最大，是因为实际的氧化夹渣生成是由多个氧化反应共同参与的，难以明确组分之间的化学计量比。

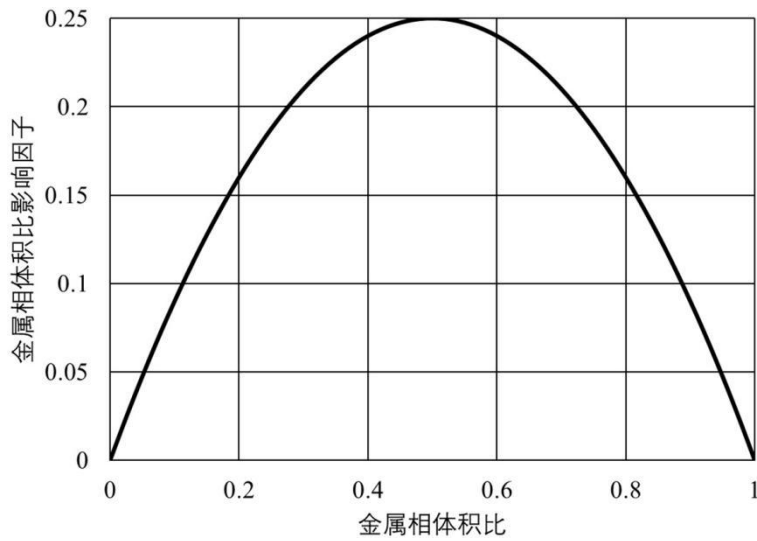


图 4-3 金属相体积比影响因子变化曲线

Fig. 4-3 Change curve of metal phase volume ratio influence factor

(2) 温度影响因子

温度几乎是所有化学反应的关键影响因素，一般而言，温度越高，化学反应越剧烈。在型芯发气的数值模拟研究中，需要计算不同温度下的树脂分解速率^[157]，树脂分解过程是一化学反应过程，相关研究采用阿伦尼乌斯公式^[158]计算型芯发气速率：

$$K = Ae^{-E/RT} \quad (4-3)$$

式中， K 为型芯发气速率； A 为指前因子； E 为表观活化能； R 为摩尔气体常数， $J/(mol \cdot K)$ 。

由式(4-3)可知，型芯发气速率与温度成指数关系。本文认为当金属液完全凝固后，氧化反应停止。因此，本文提出的温度影响因子 S_T 为：

$$S_T = e^{\frac{1}{\max\left(\frac{T-T_{solid}}{T_{liquid}-T_{solid}}, 10^{-6}\right)}} \quad (4-4)$$

式中， T_{solid} 和 T_{liquid} 分别为合金的固相线和液相线温度， $^{\circ}C$ 。

图 4-4 为由式(4-4)得到的不同合金的温度影响因子变化曲线。其中，图 4-4a 为铜合金的温度影响因子变化曲线(液相线温度为 $921.4^{\circ}C$ ，固相线温度为 $890^{\circ}C$)，图 4-4b 为铝合金的温度影响因子变化曲线(液相线温度为 $611^{\circ}C$ ，固相线温度为 $550^{\circ}C$)。从图中可以看出，不同合金的温度影响因子有细微差别，但整体趋势是一致的。温度低于合金固相线温度时，影响因子为 0。随着温度的增加，影响因子基本呈线性增大，

且分布曲线呈现上凸趋势。

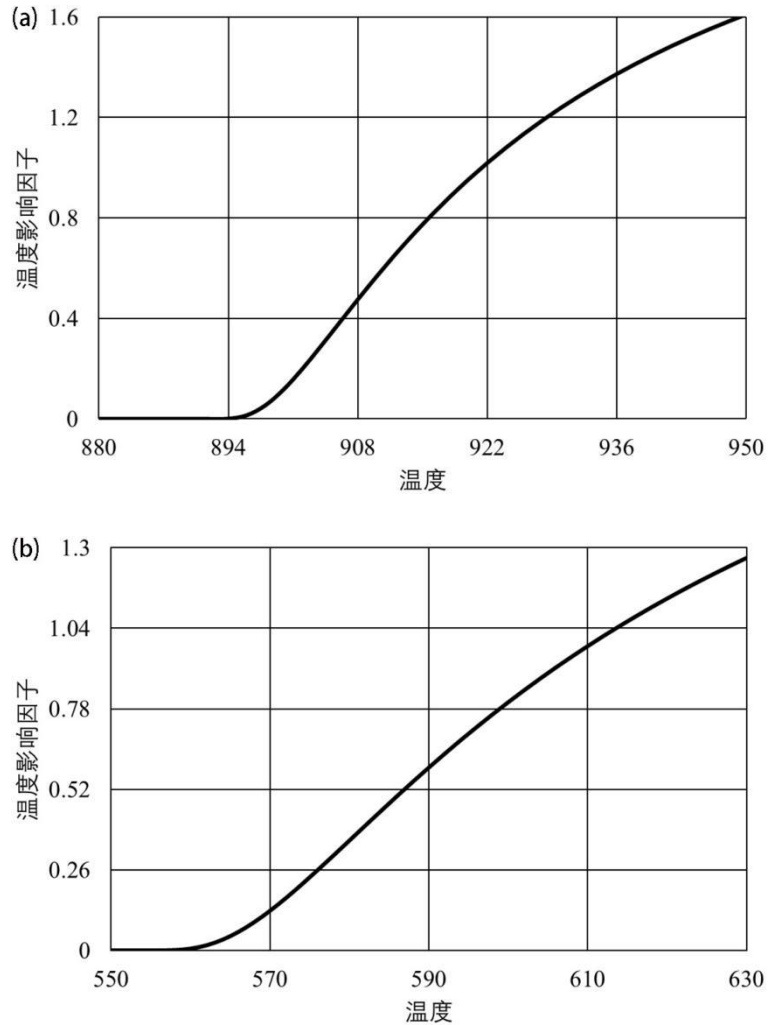


图 4-4 温度影响因子变化曲线: (a) 铜合金(液相线温度为 921.4℃, 固相线温度为 890℃); (b) 铝合金(液相线温度为 611℃, 固相线温度为 550℃)

Fig. 4-4 Change curve of temperature influence factor: (a) copper alloy (liquidus temperature is 921.4℃, and solidus temperature is 890℃); (b) aluminum alloy (liquidus temperature is 611℃, and solidus temperature is 550℃)

(3) 当前氧化夹渣密度影响因子

本文认为随着氧化夹渣逐渐累积, 氧化反应速率逐渐减小。当氧化夹渣达到某一临界值后, 氧化反应停止。因此, 本文提出的当前氧化夹渣密度影响因子 $S_{\chi_{current}}$ 为:

$$S_{\chi_{current}} = \max\left(\frac{\chi_{critical} - \chi_{current}}{\chi_{critical}}, 0\right) \quad (4-5)$$

式中， $\chi_{current}$ 为单元当前氧化夹渣密度， kg/m^3 ； $\chi_{critical}$ 为单元临界氧化夹渣密度，需结合实际生产确定， kg/m^3 。

将上述不同因素的影响因子(式(4-2)、式(4-4)和式(4-5))综合起来，可得氧化夹渣缺陷生成速率模型为：

$$\begin{aligned} S_{\chi} &= A_{\chi} S_{\alpha} S_T S_{\chi_{current}} \\ &= A_{\chi} \alpha (1 - \alpha) e^{\frac{1}{\max\left(\frac{T - T_{solid}}{T_{liquid} - T_{solid}}, 10^{-6}\right)}} \max\left(\frac{\chi_{critical} - \chi_{current}}{\chi_{critical}}, 0\right) \end{aligned} \quad (4-6)$$

式中， S_{χ} 为单元氧化夹渣缺陷生成速率， $\text{kg/m}^3/\text{s}$ ； A_{χ} 为氧化夹渣生成速率常量，需结合实际生产确定， $\text{kg/m}^3/\text{s}$ 。

为了初步说明本文提出的氧化夹渣缺陷生成速率计算模型的可行性。针对图 4-5 所示的简单充型算例，采用式(4-6)计算其氧化夹渣缺陷演变过程。设计此算例的原因为充型过程中金属液会产生剧烈的振荡，便于分析氧化夹渣的卷入和运输过程。计算过程中，进口速度为 0.4 m/s ，壁面设置对流换热边界(对流换热系数为 $1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ ，铸型温度为 30°C)，单元临界氧化夹渣密度 $\chi_{critical}$ 为 1 kg/m^3 ，氧化夹渣生成速率常量 A_{χ} 为 $10 \text{ kg/m}^3/\text{s}$ 。

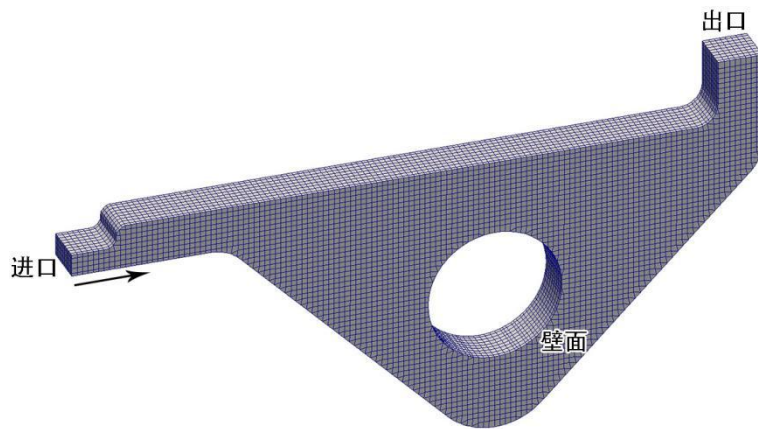


图 4-5 简单充型算例的几何模型和边界

Fig. 4-5 Geometric model and boundaries of the simple filling example

图 4-6 为计算得到的不同时刻下金属相体积比和氧化夹渣缺陷模拟结果。从图中可以看出，充型初始阶段，液面前沿生成了一定量的氧化夹渣(图 4-6a, e)。随着金属液前沿发生翻卷，氧化夹渣被卷入到金属液内部(图 4-6b, f)。当金属液面逐渐上升时，氧化夹渣会跟随金属液运动(图 4-6c, g)。最后当充型过程较为平稳时，氧化夹渣集中分布在金属液上部区域(图 4-6d, h)。通过上述分析可知，本文所提出的氧化夹渣缺陷生成速率计算模型较好地考虑了金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣对氧化夹渣生成的影响，可以初步认为具有一定的可行性。

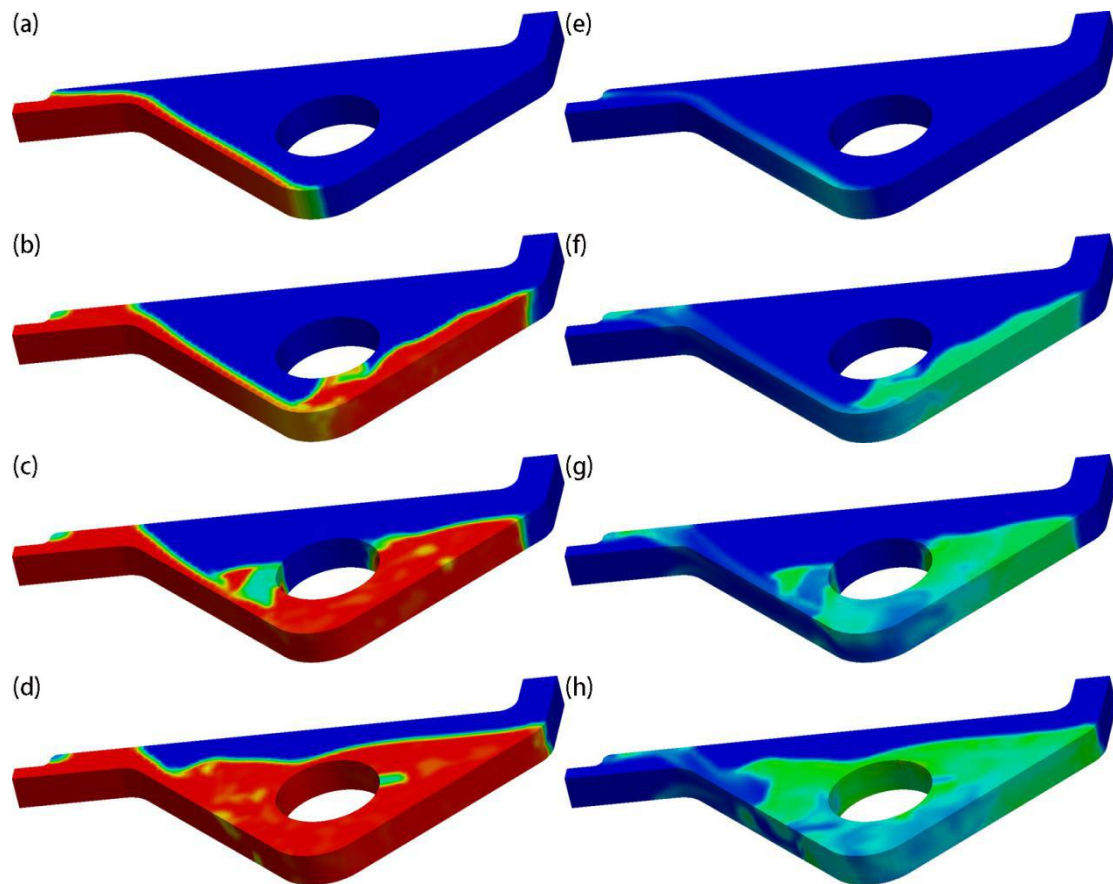


图 4-6 针对简单充型算例所计算的不同时刻(0.225 s(a, e)、0.550 s(b, f)、0.975 s(c, g)和 1.475 s(d, h))

下的氧化夹渣缺陷分布：(a~d) 金属相体积比；(e~h) 氧化夹渣缺陷(取值范围为 0~1 kg/m³)

Fig. 4-6 The oxide inclusion distributions at different times (0.225 s(a, e), 0.550 s(b, f), 0.975 s(c, g), and 1.475 s(d, h)) determined for the simple filling example: (a~d) metal phase volume ratio; (e~h)

oxide inclusion defect (the range of values is: 0~1 kg/m³)

4.4 氧化夹渣缺陷壁面粘附模型

在金属液充型过程中，当氧化夹渣碰到铸型壁面时，就会粘附到壁面上，而且已粘附的氧化夹渣对后续累积过产生影响。图 4-7 为壁面上氧化夹渣粘附和累积过程的示意图。因此，计算过程中需单独处理壁面氧化夹渣的粘附和累积过程。从数值模拟的角度分析，壁面相邻单元的氧化夹渣会逐步粘附到壁面上，一旦壁面氧化夹渣密度超过一定临界值，壁面便无法继续积累氧化夹渣。本文采用下式控制壁面氧化夹渣分布：

$$\chi_{wallNext} = \chi_{wallCurrent} + \chi_{wallCell} \cdot \max\left(\frac{\chi_{wallCritical} - \chi_{wallCurrent}}{\chi_{wallCritical}}, 0\right) \quad (4-7)$$

式中， $\chi_{wallNext}$ 为下一时刻的壁面氧化夹渣密度， kg/m^3 ； $\chi_{wallCurrent}$ 为当前时刻的壁面氧化夹渣密度， kg/m^3 ； $\chi_{wallCell}$ 为当前时刻的壁面相邻单元氧化夹渣密度， kg/m^3 ； $\chi_{wallCritical}$ 为壁面临界氧化夹渣密度，代表壁面粘附氧化夹渣的能力，需结合实际生产确定， kg/m^3 。

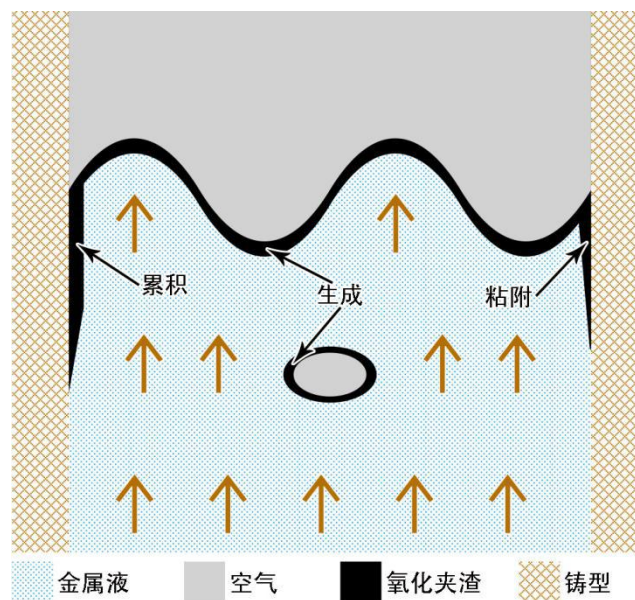


图 4-7 壁面上氧化膜粘附和累积过程示意图

Fig. 4-7 Oxide film adhesion and accumulation process on the wall

为了说明壁面粘附处理的效果，针对上述简单充型算例，结合式(4-6)和式(4-7)计算其氧化夹渣的生成和演变过程。图 4-8 为计算得到的不同时刻下金属相体积比和氧化夹渣缺陷模拟结果。从计算结果可以看出，充型初始阶段，液面前沿生成了一定量的氧化夹渣(图 4-8a, e)。随着金属液前沿发生翻卷，壁面上已粘附的氧化夹渣并不随着金属液运动，而是逐渐累积(图 4-8b, f 和图 4-8c, g)。从最终的壁面氧化夹渣分布(图 4-8d, h)可看出，氧化夹渣最严重的壁面区域为与金属液内部氧化夹渣接触最多的区域，最终的壁面氧化夹渣明显集中分布在铸件下部。

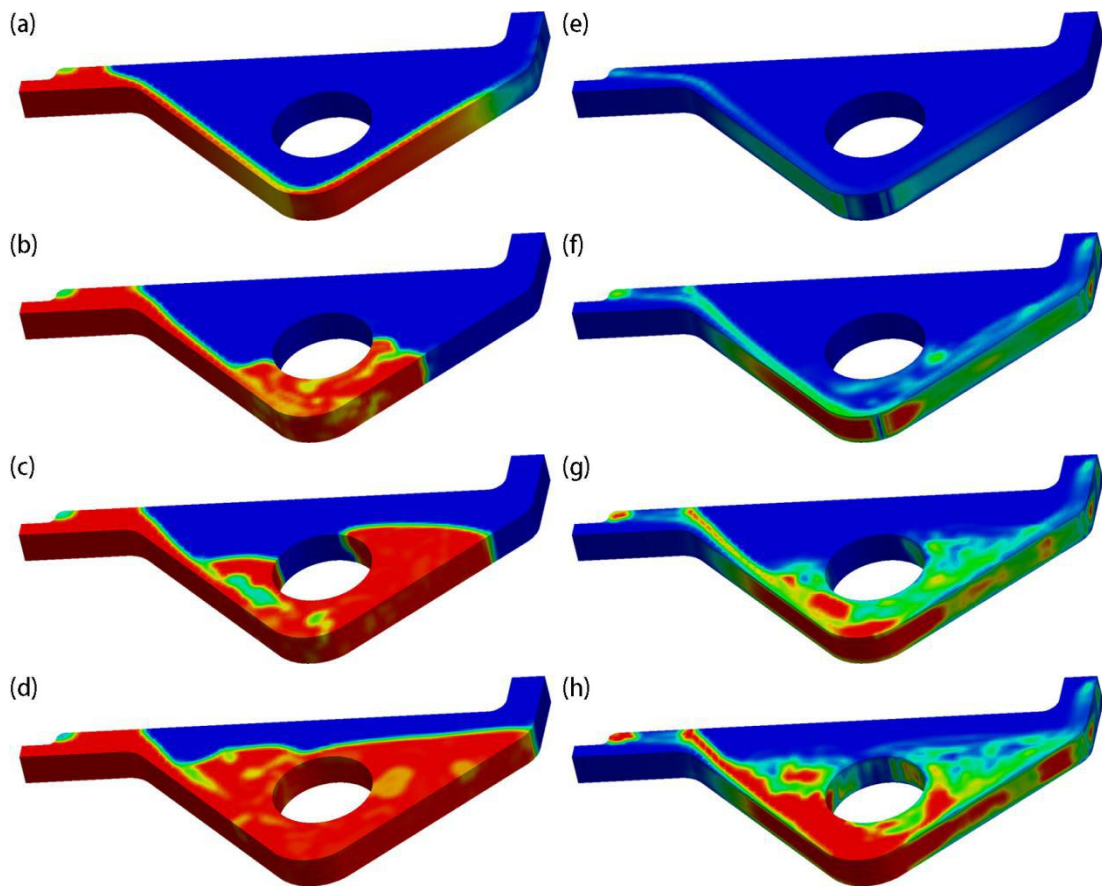


图 4-8 针对简单充型算例所计算的不同时刻(0.300 s(a, e)、0.625 s(b, f)、1.025 s(c, g)和 1.475 s(d, h))下的氧化夹渣缺陷分布：(a~d) 金属相体积比；(e~h) 氧化夹渣缺陷(取值范围为 0~2 kg/m³)
Fig. 4-8 The oxide inclusion distributions at different times (0.300 s(a, e), 0.625 s(b, f), 1.025 s(c, g), and 1.475 s(d, h)) determined for the simple filling example: (a~d) metal phase volume ratio; (e~h) oxide inclusion defect (the range of values is: 0~2 kg/m³)

为了直接对比不考虑壁面粘附和考虑壁面粘附之间的区别，将上述计算结果中 1.475 s 时铸件中截面的氧化夹渣缺陷分布进行对比(图 4-9)。从对比结果可以看出，

未考虑壁面粘附时，氧化夹渣只能跟随金属液运动，最终氧化夹渣主要集中在液面前沿附近(图 4-9a)。考虑壁面粘附时，氧化夹渣一方面跟随金属液运动，另一方面粘附在壁面之上。相比于不考虑壁面粘附的情形，此时金属液内部的氧化夹渣明显减少(图 4-9b)。通过以上对比可知，考虑壁面粘附时，计算结果明显更为合理，同时也初步验证了本文提出的氧化夹渣缺陷壁面粘附模型具有一定的可行性。

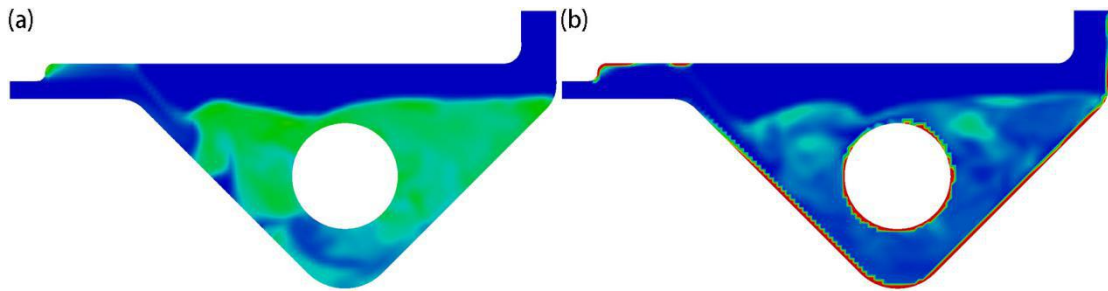


图 4-9 1.475 s 时不同壁面粘附处理情况下中截面的氧化夹渣缺陷分布(取值范围为 0~1 kg/m³): (a) 不考虑壁面粘附; (b) 考虑壁面粘附(壁面临界氧化夹渣密度为 2 kg/m³)

Fig. 4-9 Middle section oxide inclusion defect distributions under different wall adhesion treatments at 1.475s (the range of values is: 0~1 kg/m³): (a) does not considering wall adhesion; (b) considering wall adhesion (critical oxide inclusion density of wall is 2 kg/m³)

4.5 氧化夹渣缺陷数值计算方法

在对氧化夹渣运动追踪进行说明之前，需要对本文所做的一些模型假设进行申明：
 ① 对于指定了相同的壁面临界氧化夹渣密度值的壁面区域，认为其氧化夹渣粘附能力和极限是一致的；
 ② 对于液态金属内部的氧化夹渣，认为其跟随流体运动，且对流体运动不产生影响；
 ③ 认为当铸件从铸型中取出之后，充型过程中粘附在铸型壁面上的氧化夹渣，最终会全部粘在铸件表面。

在获得氧化夹渣缺陷生成速率计算模型(式(4-6))和壁面粘附模型(式(4-7))后，采用输运方程追踪铸造充型过程中氧化夹渣的运动：

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\chi) = A_{\chi} \alpha (1 - \alpha) e^{\frac{1}{\max\left(\frac{T - T_{solid}}{T_{liquid} - T_{solid}}, 10^{-6}\right)}} \max\left(\frac{\chi_{critical} - \chi_{current}}{\chi_{critical}}, 0\right) \quad (4-8)$$

式中， χ 为单元氧化夹渣密度，kg/m³； t 为时间，s； \mathbf{U} 为单元速度，m/s。通过定量

化指标 χ 即可直接得到铸件不同部位氧化夹渣缺陷的多少。

得到上述氧化夹渣缺陷预测模型后, 本文在已开发的铸造充型过程求解器的基础上, 完成铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的开发工作。下面将从自定义求解器和数值求解流程两个方面进行说明。氧化夹渣缺陷预测求解器仍然是基于开源代码 OpenFOAM 的框架, 因此自定义此求解器的主要工作是计算氧化夹渣缺陷的生成量、自定义氧化夹渣缺陷控制方程和壁面粘附处理。

4.5.1 自定义求解器

(1) 计算氧化夹渣的生成量

在 `createFields.H` 文件中添加标量场 `oxideInclusion`, 用于记录单元氧化夹渣密度。添加标量场 `sourceOxideInclusion`, 用于记录氧化夹渣生成速率 S_χ 。添加标量 `oxideInclusionConstant`, 表示氧化夹渣生成速率常量 A_χ 。添加标量 `oxideInclusionCritical`, 表示单元临界氧化夹渣密度 $\chi_{critical}$ 。

修改 `alphaEqnSubCycle.H` 文件, 更新 `sourceOxideInclusion`。实现代码为:

```
sourceOxideInclusion == oxideInclusionConstant*max(phase1alpha*(1.0-  
phase1alpha)*exp(1.0-1.0/max((T-solidtemp)/(liquidtemp-solidtemp), 1.0e-6))*  
max((oxideInclusionCritical-oxideInclusion)/oxideInclusionCritical, 0.0), 0.0);
```

(2) 追踪氧化夹渣的运动

新建 `oxideInclusionEqn.H` 文件, 用于自定义氧化夹渣缺陷控制方程(式(4-8))。实现代码为:

```
fvScalarMatrix oxideInclusionEqn  
(  
    fvm::ddt(oxideInclusion)  
    + fvm::div(phi,oxideInclusion)  
    ==  
    fvOptions(oxideInclusion) + sourceOxideInclusion  
);
```

```
oxideInclusionEqn.relax();
fvOptions.constrain(oxideInclusionEqn);
oxideInclusionEqn.solve();
fvOptions.correct(oxideInclusion);
```

(3) 壁面粘附处理

在对壁面粘附处理进行说明之前，需要指出的是，在 OpenFOAM 中自定义控制方程时无法单独修改边界面面心值，自定义边界面面心值的唯一方法是自定义相应的边界条件。因此，实现壁面粘附效果的方法是自定义壁面粘附边界条件。

本文在 OpenFOAM 中自带的边界条件 `totalPressure` 的基础上开发壁面粘附边界条件。添加参数 `criticalValue_`，表示壁面临界氧化夹渣密度 $\chi_{wallCritical}$ 。修改 `updateCoeffs` 函数，实现边界面面心氧化夹渣的更新。实现代码如下：

```
if (updated())
{
    return;
}
const scalarField oxideInclusionDensityIn(patchInternalField());
operator == (*this + oxideInclusionDensityIn*max((criticalValue() - *this)/
criticalValue(), 0.0));
fixedValueFvPatchScalarField::updateCoeffs();
```

在 `createFields.H` 文件中添加标量场 `oxideInclusionDensity`，用于记录壁面粘附处理之后的单元体心和壁面面心氧化夹渣值。壁面粘附模型(式(4-7))的实现代码如下：

```
forAll (oxideInclusionDensity, celli)
{
    oxideInclusionDensity[celli] = oxideInclusion[celli]*phase1alpha[celli];
}
volScalarField reduceRatio("reduceRatio", phase1alpha);
const fvPatchList& patcha = mesh.boundary();
forAll (patcha, patchi)
{
    const fvPatch& currPatch = patcha[patchi];
```

```
forAll (currPatch, facei)
{
    label faceCelli = currPatch.faceCells()[facei];
    reduceRatio[faceCelli] = max((oxideInclusionWallCritical.value()
    -oxideInclusionDensity.boundaryField()[patchi][facei])/oxideInclusion
    WallCritical.value(), 0.0);
}
}
oxideInclusionDensity.correctBoundaryConditions();
forAll (patcha, patchi)
{
    const fvPatch& currPatch = patcha[patchi];
    forAll (currPatch, facei)
    {
        label faceCelli = currPatch.faceCells()[facei];
        oxideInclusion[faceCelli] = oxideInclusion[faceCelli]*
        (1.0-reduceRatio[faceCelli]);
        oxideInclusionDensity[faceCelli] = oxideInclusionDensity[faceCelli]
        *(1.0-reduceRatio[faceCelli]);
    }
}
oxideInclusion.correctBoundaryConditions();
```

4.5.2 数值求解流程

结合上述氧化夹渣缺陷数值模型以及自定义求解器过程可知,相比于铸造充型过程计算流程而言,氧化夹渣缺陷预测的计算流程增加了两个计算步骤(氧化夹渣缺陷生成及追踪和壁面粘附处理)。图 4-10 为铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的计算流程图。

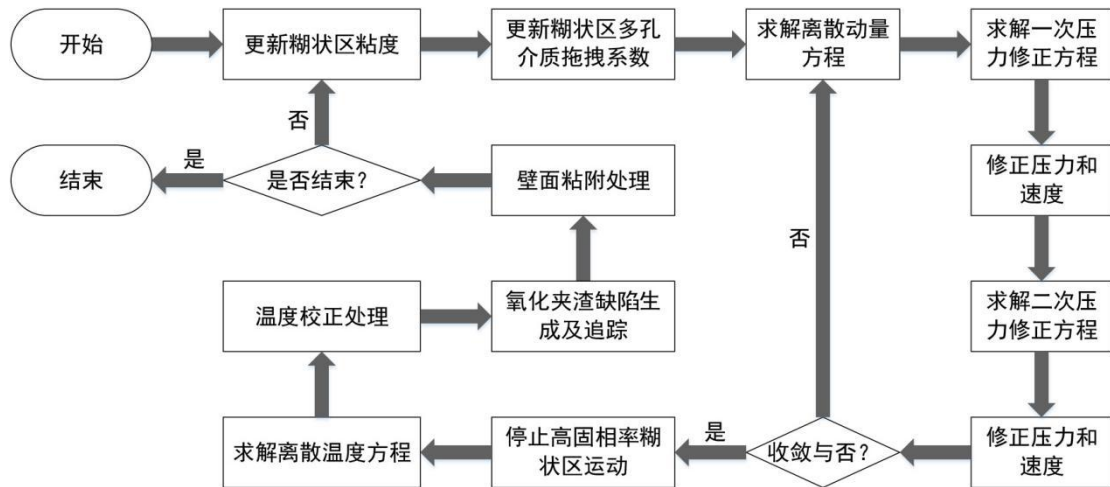


图 4-10 铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的计算流程图

Fig. 4-10 Calculation flow chart of oxide inclusion prediction solver in casting filling process

4.6 本章小结

(1) 氧化夹渣缺陷的产生是一复杂的物理化学变化过程，并处于气液固多相耦合流动状态。铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的影响因素主要包括：金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣。

(2) 结合已有的化学反应模型(化学燃烧速率计算模型和型芯发气速率计算模型)，提出了一考虑金属相体积比、温度及当前氧化夹渣密度的氧化夹渣生成速率计算模型。

(3) 考虑到充型过程中氧化夹渣会在铸型壁面上发生粘附和累积，提出了一氧化夹渣缺陷壁面粘附模型。

(4) 结合已提出的氧化夹渣缺陷预测模型，在已开发的铸造充型过程求解器的基础上，完成了铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的开发工作(自定义氧化夹渣缺陷控制方程和壁面粘附边界条件)。

第5章 成形类缺陷数值模拟的实验验证

5.1 引言

如上文所述，铸造过程十分复杂，所用到的数学模型只能考虑主要影响因素，并且在多种假设的前提下进行了适当的简化以适应于数值计算。事实上，数值计算中的参数与实际情况会有所偏差，数值方法本身也有一定误差，使得最终通过数值计算得到的结果与实际测量的结果基本不可能完全一致。因此，需要用物理规律明显的试件对数值模型进行校核，确认数值模型模拟分析得到的结果是否与理论上的分析和实际观测到的现象相符，趋势上是否一致，数值上是否接近。只有这些条件都达到之后，数值模型方能投入实际应用，为实际生产提供指导。本文作者于博士期间与路达(厦门)工业有限公司进行了长期的项目合作，期间针对成形类缺陷自主设计了多套验证实验，对铸造充型过程成形类缺陷形成和演化的理解，以及对相关模型的校核有重要意义。

在铸造充型过程成形类缺陷数值模型经过基准件的校核与实验验证后，即可推广应用到实际铸造生产中，分析实际铸造充型过程中成形类缺陷的产生与演化规律，预测可能发生的浇不足、卷气、冷隔和氧化夹渣等铸造缺陷和问题。工艺设计人员经过对数值模拟结果的分析，就可为原来的铸造工艺提出修正和优化的方案，避免相关缺陷的产生，提高实际铸造工艺的一次成功率。用铸造充型过程成形类缺陷数值模拟技术代替传统的试错法，可大大减少铸造工艺研发的时间和成本。

本文设计了一组多壁厚铜合金低压铸造工艺，获得不同壁厚下实际铸件的充型高度，并采用所开发的铸造充型过程求解器进行计算，验证所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性。设计了一组具有不同浇道的锌合金高压铸造工艺，并采用所开发的铸造充型过程求解器进行计算，对比分析卷气缺陷演变过程，验证所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性。设计了一组具有不同浇道的铜合金低压铸造工艺，并采用所开发的铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器进行计算，对比分析冷隔缺陷演变过程，验证所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。针对一典型铝合金铸造工艺和一实际铜合金低压铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器进行计算，对比分析氧化夹渣缺陷演变过程，

验证所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。

5.2 多壁厚低压铸造工艺浇不足缺陷实验验证

为了研究液固转变过程中金属相流动行为的变化对铸造充型过程的影响，本文设计了一组多壁厚铜合金低压铸造工艺，分析不同壁厚下的充型过程和铸件最终充型高度，通过对比模拟和实验结果来说明本文所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性。需要说明的是，本文所采用的前处理网格划分工具为 ICEM CFD，后处理工具采用开源后处理软件 ParaView。

5.2.1 实验方案及模拟参数设置

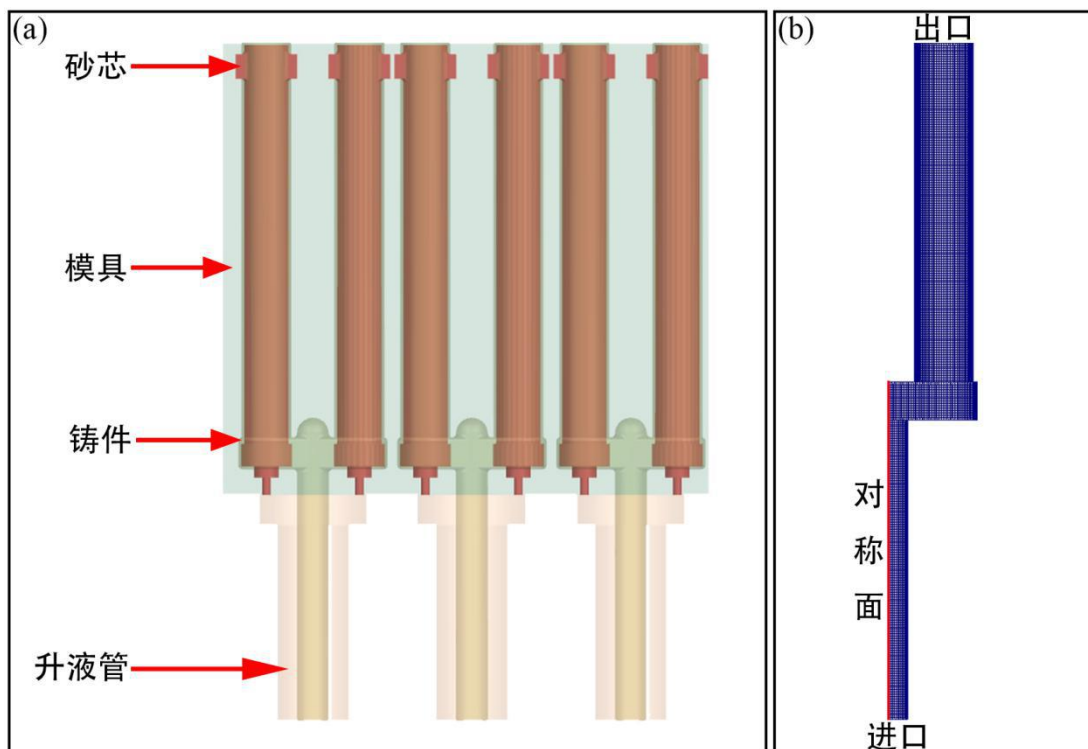


图 5-1 多壁厚铜合金低压铸造工艺：(a) 几何模型；(b) 网格模型

Fig. 5-1 Copper alloy low pressure casting processes with multi-wall thicknesses: (a) geometric model; (b) grid model

图 5-1 为多壁厚铜合金低压铸造工艺的几何及网格模型，其中，实验中为尽可能避免设备状况波动对充型结果的影响，采用了一模三腔工艺，而模拟计算中为了减

少计算量，采用了单个铸件的对称模型。此铸造工艺模型的整体尺寸为： $400 \times 555 \times 150$ mm。为了获得不同壁厚的铸件，实验中在模具内部放置不同直径的砂芯，得到的铸件壁厚尺寸分别为：2.3 mm、2.5 mm、2.8 mm、3.2 mm 和 3.5 mm。

图 5-2 为铜合金低压铸造实验中的模具和砂芯实物图。实验所采用的铜合金为 GKMS60，模拟过程中所设置的参数如表 5-1 所示。



图 5-2 铜合金低压铸造实验：(a) 模具；(b) 砂芯

Fig. 5-2 Copper alloy low pressure casting experiment: (a) mould; (b) sand core

表 5-1 模拟计算过程中所设参数

Tab. 5-1 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
铜合金的密度	7000	kg/m^3
空气的密度	1	kg/m^3
铜液的动力粘度	$3.22\text{e-}3$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
空气的动力粘度	$1\text{e-}5$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
铜液与空气间的表面张力系数	1.2	N/m
重力加速度	$\{0, 0, -9.8\}$	m/s^2
进口压力	$0 \text{ s } 0 \text{ bar}; 5 \text{ s } 0.5 \text{ bar}; 10 \text{ s } 0.5 \text{ bar}$	bar
出口压力	0	Pa
铜合金液相线温度	921.4	$^{\circ}\text{C}$
铜合金固相线温度	890	$^{\circ}\text{C}$

铜合金潜热	153	J/g
铜合金比热容	0.48	J/g/K
铜合金导热系数	120	W/m/K
进口温度	1015	°C
铸件-升液管间换热系数	500	W/m ² /K
铸件-模具间换热系数	2000	W/m ² /K
铸件-砂芯间换热系数	1000	W/m ² /K
下临界固相率 F_{down}	0.15	无
上临界固相率 F_{up}	0.67	无
D_{drag}	10	1/s

5.2.2 模拟与实验结果对比及分析

图 5-3 为不同壁厚铸造工艺模拟结果对比，包括最终铜相分布和最终速度分布。从最终铜相分布模拟结果可以看出，随着壁厚不断加大，铸件最终充型高度逐渐增加，其原因是壁厚越大，铸件内部降温越慢，使得液面前沿凝固较慢，从而使更多的铜液可以进入型腔。从最终速度分布模拟结果可以看出，当前沿完全凝固后，前沿速度降至零，使得液相无法继续进入型腔。图 5-4 为实验中不同壁厚铸造工艺的铸件最终形态。从实验结果中可以看出，实验中由于设备状况波动及其他因素的影响，同一模具中的三个试样充型高度并不一致，但随着壁厚不断加大，基本可以反映出铸件充型高度不断加大的趋势。

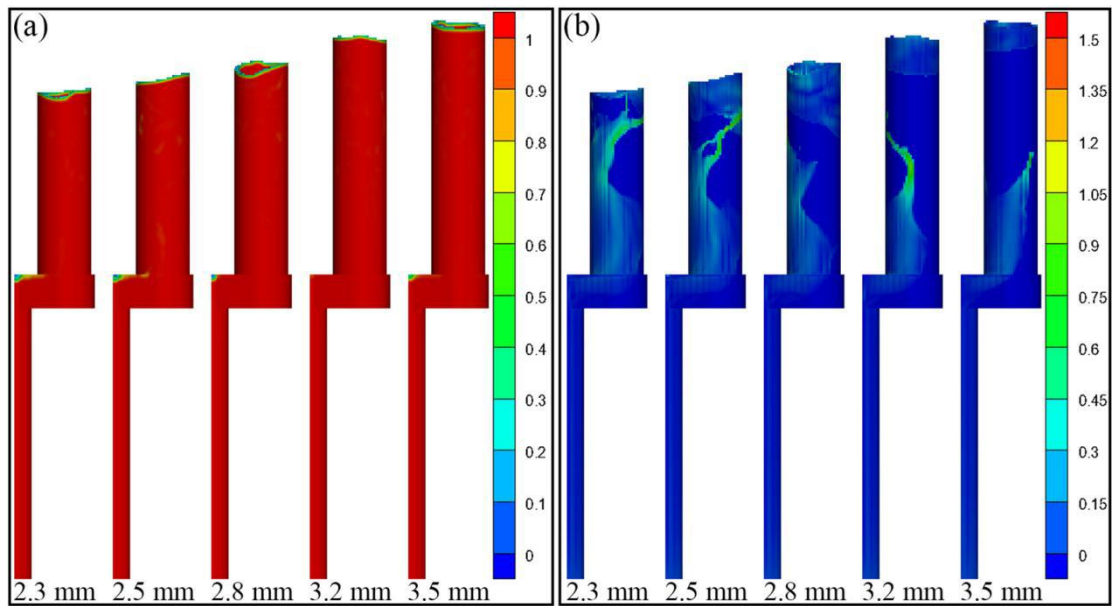


图 5-3 不同壁厚铸造工艺模拟结果: (a) 铜相最终分布; (b) 最终速度分布(单位: m/s)

Fig. 5-3 Simulated results of casting processes with multi-wall thicknesses: (a) final copper phase distributions; (b) final velocity distributions (unit: m/s)

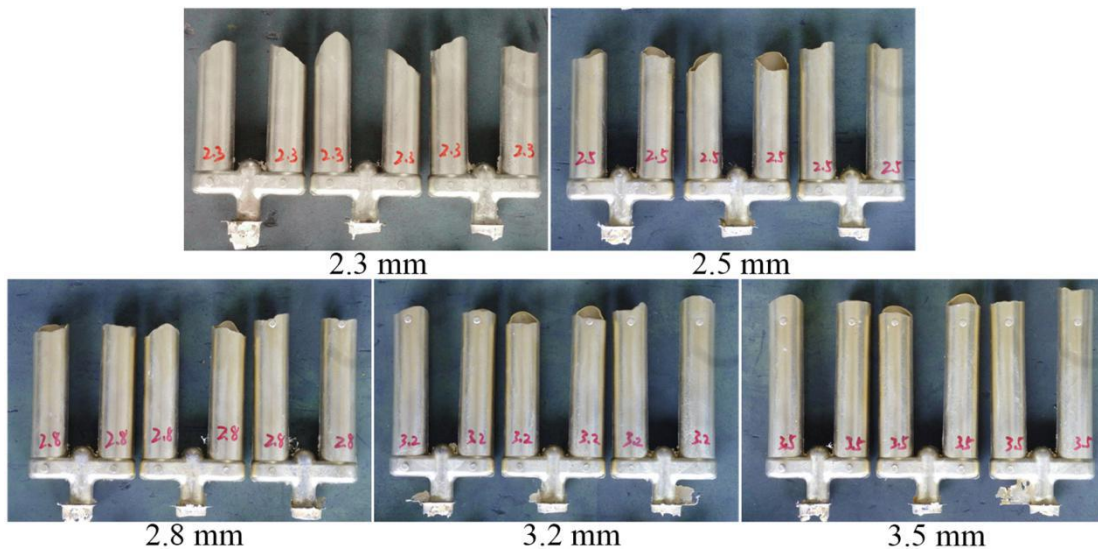


图 5-4 实验中不同壁厚铸造工艺的铸件最终形态

Fig. 5-4 Casting final shapes with different wall thicknesses in experiment

将实际铸件中的三个试样铸件充型高度进行平均, 图 5-5 为不同壁厚铸造工艺的模拟与实验充型高度对比。需要说明的是, 铸件充型高度指的是升液管上端面至铸件顶端的垂直距离。由对比结果可以看出, 模拟与实验充型高度基本一致, 高度值

有细微差别，最大高度差仅为 4.88 mm，可以认为模拟和实验结果对应较好。因此，可以认为本文所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性得以验证。

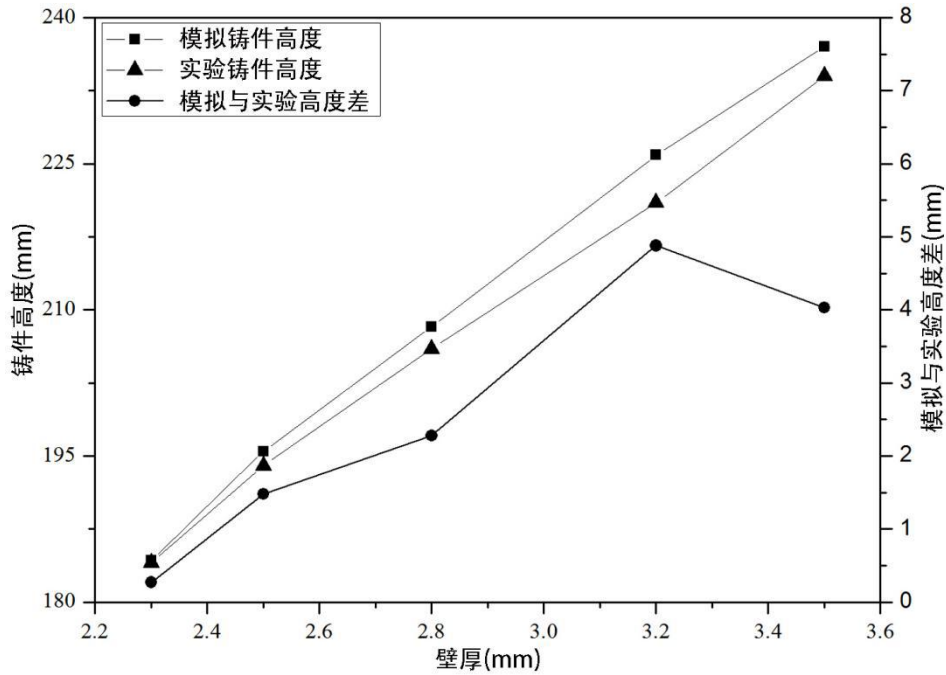


图 5-5 不同壁厚铸造工艺的模拟与实验充型高度对比

Fig. 5-5 Filling height comparison between simulation and experiment with different wall thicknesses

5.3 不同浇道下锌合金高压铸件卷气缺陷实验验证

为了研究气相对铸造充型过程的影响，本文设计了一组具有不同浇道的锌合金高压铸造工艺，分析不同浇道下的充型过程和铸件最终卷气缺陷分布，通过对比模拟和实验结果来说明本文所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性。

5.3.1 几何模型及参数设置

为了对锌合金高压铸造过程中卷气缺陷进行分析，本文针对一锌合金高压铸件设计了两个内浇道方案：方案 1 和方案 2。图 5-6 为方案 1 和 2 的几何及网格模型，进口和出口位置在图中已经被标识出来。其中，方案 1 采用单流道，且进口位于下端，方案 2 采用双流道，分别置于左右两侧。铸件的整体尺寸为：112×28×18 mm。

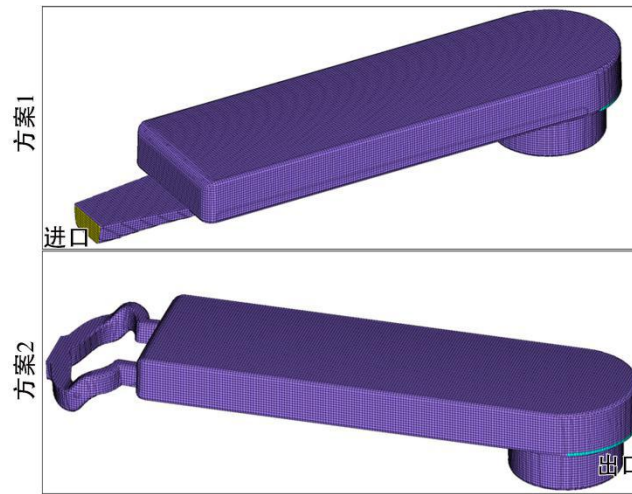


图 5-6 方案 1 和 2 的几何及网格模型

Fig. 5-6 Geometric and grid models of scheme 1 and 2

实验所采用的锌合金为 Zamak3，其合金成分(质量分数)为：95.87% Zn--4.00% Al--0.03% Mg--0.10% Cu。模拟计算过程中所设置的参数如表 5-2 所示。

表 5-2 模拟计算过程中所设参数

Tab. 5-2 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
锌合金的密度	6300	kg/m ³
空气的密度	1	kg/m ³
锌合金的动力粘度	0.05	Pa·s
空气的动力粘度	1e-5	Pa·s
锌合金与空气间的表面张力系数	0.0782	N/m
重力加速度	{0,0,-9.8}	m/s ²
进口速度	{3.5,0,0}	m/s
出口压力	0	Pa

5.3.2 压铸件卷气缺陷实验分析方法

在分析压铸件卷气缺陷之前，需要先介绍本文所采用的压铸件卷气缺陷实验分析方法。传统的压铸件无法进行热处理，其原因是加热后金属强度降低，而充型过程

中所卷入的气体受热膨胀，从而会导致铸件表面产生气泡。由于压铸件一般为薄壁铸件，因此，本文利用此原理对压铸后铸件进行加热处理，进而可以直观地观测到卷气的部位与多少。

相比于其他气孔类缺陷实验分析方法，如切割分析、CT 三维成像等，热处理方法不仅具有更好的操作性和实验效率，同时所需的实验费用更低。本文的热处理的具体工艺为：温度(350℃)、时间(3 小时，不含升温时间)。图 5-7 展示的是对锌合金压铸件进行加热处理的效果，其中红框内为受热膨胀的气泡。从实验结果可以看出，卷气部位出现明显的突起，并且可以通过突起的大小来判断卷气量的多少。



图 5-7 对锌合金压铸件进行加热处理的效果

Fig. 5-7 Effect of heat treatment on zinc alloy die castings

5.3.3 模拟与实验结果对比及分析

图 5-8 为充型 0.015 s 时方案 1 和方案 2 中锌液体积比和速度分布。从对比结果中可以看出，由于方案 1 的内浇道在下端，且内浇道横截面面积逐渐变小，使得进入型腔的液流速度较高，并且呈现明显的斜向上喷射状态，液流前沿接触上壁面之后会沿着上壁面前进。方案 2 中由于设有两个内浇道入口，且置于左右两侧，使得

液流在进入型腔时为水平向前喷射状态，从而使得型腔内气体在金属液的推动下，整体向出气口端运动。由于方案 1 中液流以斜向上状态进入型腔，会使得铸件左上方出现较大的封闭气泡区域，而方案 2 中气体整体向出气口端运动，并不会出现较大的封闭气泡区域。

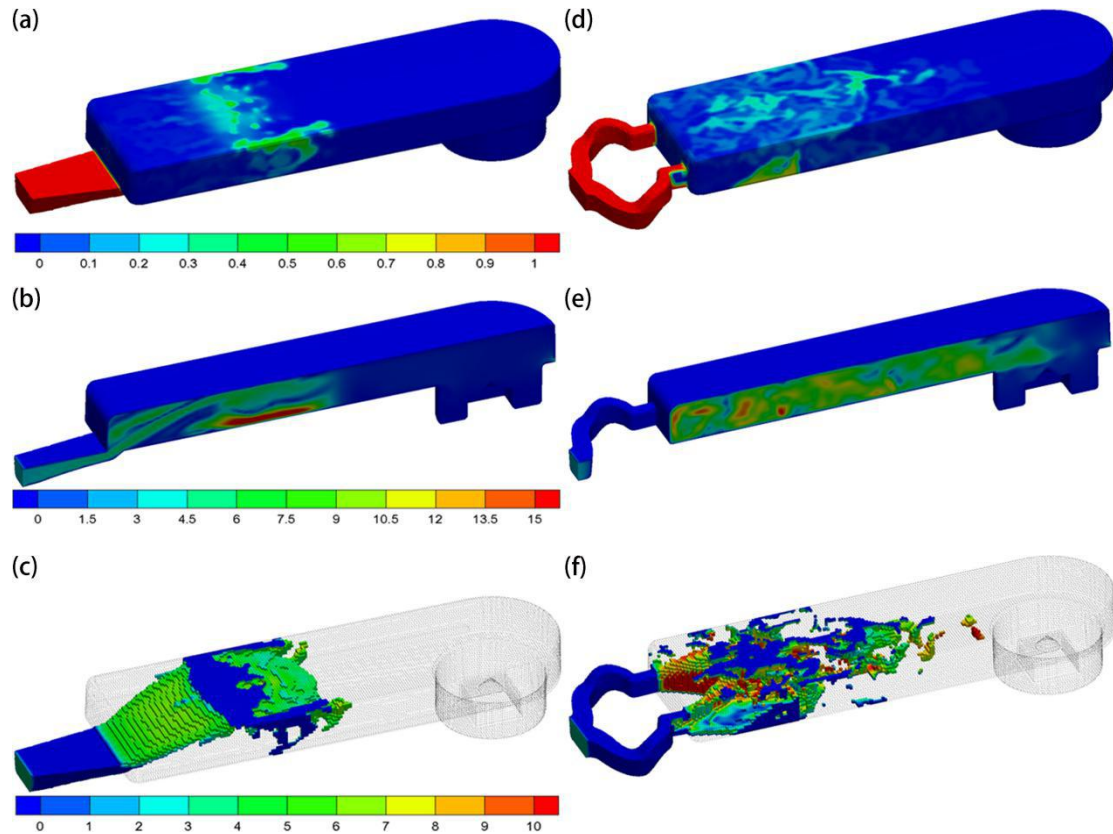


图 5-8 充型 0.015 s 时方案 1(a~c)和方案 2(d~f)中锌液体积比和速度分布：(a, d) 锌液体积比；(b, e) 中截面速度分布(单位：m/s)；(c, f) 锌液速度分布(单位：m/s)

Fig. 5-8 Zinc liquid volume ratio and density distributions of scheme 1 (a~c) and 2 (d~f) at 0.015 s: (a, d) zinc liquid volume ratio; (b, e) medium section velocity distribution (unit: m/s); (c, f) zinc liquid velocity distribution (unit: m/s)

图 5-9 为充型 0.055 s 时方案 1 和方案 2 中气相分布。由对比结果可以明显看出，充型过程中方案 1 会在左侧形成大量的卷气，虽然后续会逐步随液流向前运动，但极易形成微小的卷气缺陷，而方案 2 中气相会更多地向出口端运动，使得绝大部分气体可以较为顺畅地排外型腔，故不易形成卷气缺陷。

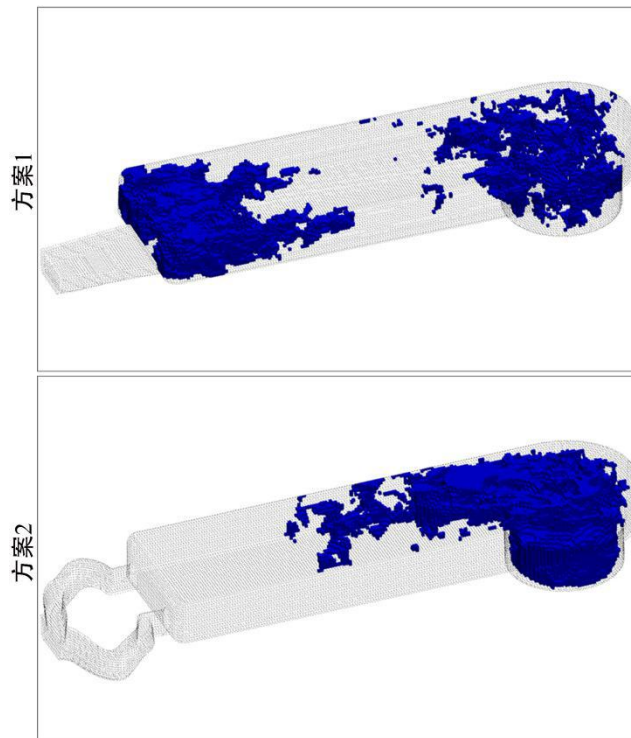
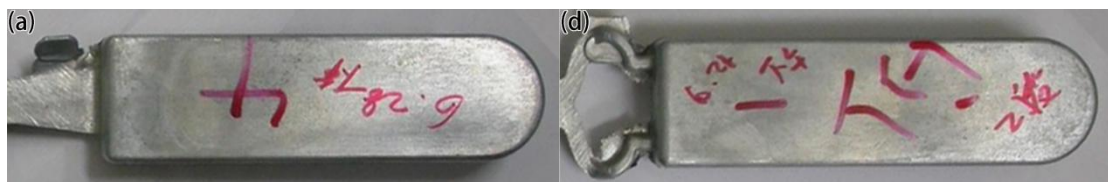


图 5-9 充型 0.055 s 时方案 1 和方案 2 中气相分布

Fig. 5-9 Gas distributions of scheme 1 and 2 at 0.055 s

图 5-10 为方案 1 和方案 2 的实验结果(锌合金压铸件及加热处理后的压铸件)与最终锌合金体积比分布模拟结果对比。从图 5-10 中的锌合金压铸件对比结果可以看出, 高压铸造产品的表面十分光滑, 基本无法肉眼看出可能的气泡缺陷; 从加热处理后的锌合金压铸件对比结果可以明显看出。方案 1 中铸件中部与出口端分布了较多的小气泡, 而方案 2 中只在出口端分布了少量的小气泡。从最终锌合金体积比分布模拟结果可以看出, 方案 1 中铸件中部与出口端的气相明显分布较多, 而方案 2 中气相基本少量地集中在出口端。综合而言, 卷气缺陷预测结果与实际铸件气孔分布对应良好, 因此, 验证了所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性, 从而有助于在高压铸造模拟中直接预测卷气缺陷。



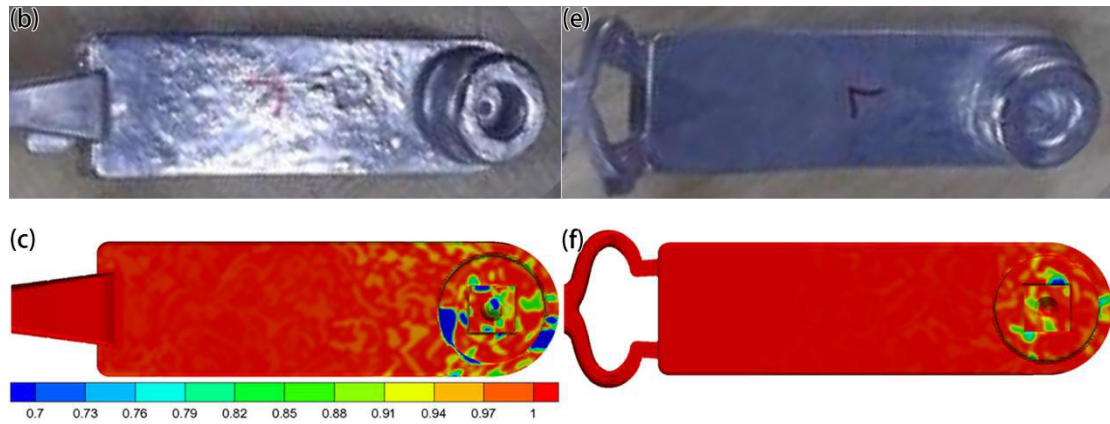


图 5-10 方案 1(a~c)和方案 2(d~f)的实验结果(锌合金压铸件及加热处理后的压铸件)与最终锌合金体积比分布模拟结果: (a, d) 压铸件(未热处理); (b, e) 压铸件(热处理后); (c, f) 最终锌合金体积比分布模拟结果

Fig. 5-10 Experiment results (zinc alloy die castings and heat treated die castings) and simulation results of final zinc alloy volume ratio distribution of scheme 1 (a~c) and 2 (d~f): (a, d) die castings (not heat treated); (b, e) die castings (after heat treated); (c, f) final zinc alloy volume distribution simulation results

5.4 不同浇道下铜合金低压铸件冷隔缺陷实验验证

为了验证本文所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。针对一组具有不同浇道的铜合金低压铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器进行计算，对比其充型及冷隔缺陷演变过程，并与实际铸件冷隔缺陷分布情况进行对比分析。

5.4.1 几何模型及参数设置

图 5-11 为所采用的两种低压铸造工艺方案(方案 1 和方案 2)的几何及网格模型，方案 1 和方案 2 的区别在于方案 2 中在铸件本体下端面设置了一内浇口(内浇口 B3)。铸件的整体尺寸为：174×41×552 mm，其中铸件本体为壁厚为 4 mm 的弯曲管状结构。

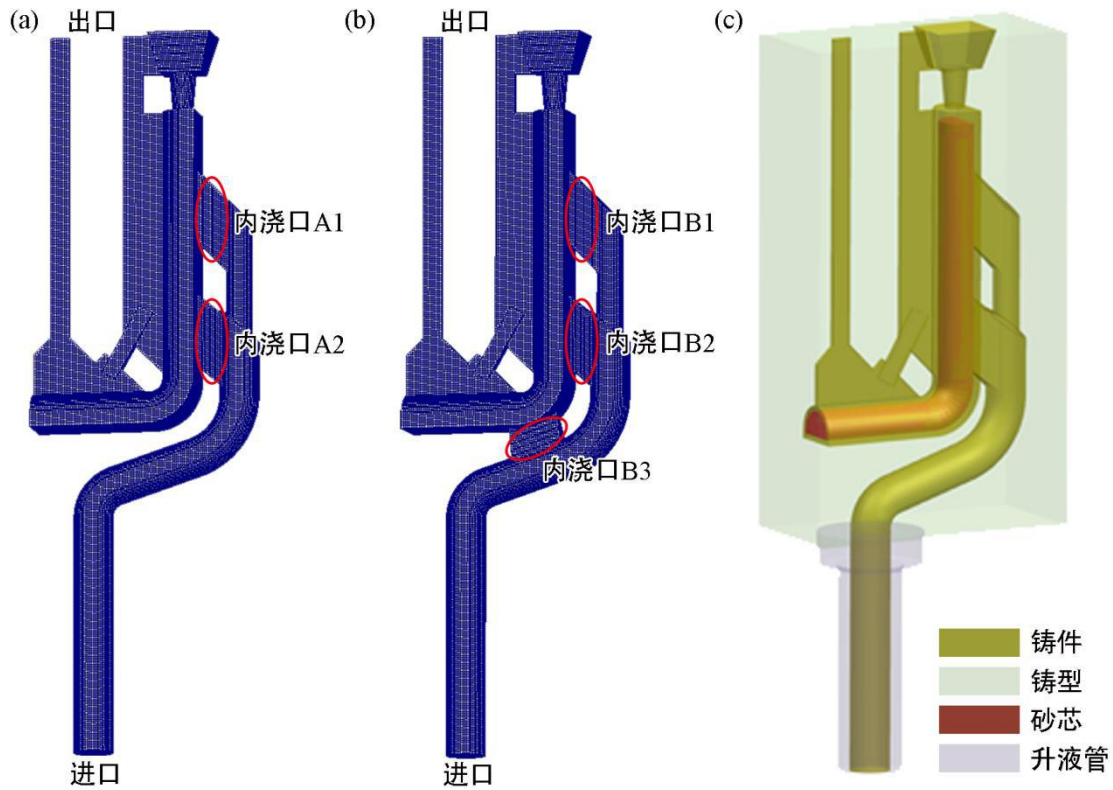


图 5-11 所采用的低压铸造工艺的几何及网格模型：(a) 方案 1；(b) 方案 2；(c) 方案 1 各部件
 Fig. 5-11 The geometry and mesh models of the low pressure casting processes: (a) scheme 1; (b) scheme 2; (c) components of scheme 1

实验所采用的铜合金牌号为 GKMS60，模拟过程中所设置的参数如表 5-3 所示，另外，各部件之间的接触关系可通过图 5-11c 获得。

表 5-3 计算过程中所需设置的参数

Tab. 5-3 The parameters required for the calculation

参数	数值	单位
铜合金的密度	7000	kg/m ³
空气的密度	1	kg/m ³
铜合金的动力粘度	3.22×10^{-3}	Pa·s
空气的动力粘度	1×10^{-5}	Pa·s
铜液与空气间的表面张力系数	1.2	N/m
铜合金的比热容	480	J/kg/K
铜合金的导热系数	120	W/m/K

铜合金的液相线温度	921.4	°C
铜合金的固相线温度	890	°C
铜合金的潜热	1.53×10^5	J/kg
重力加速度	{0, 0, -9.8}	m/s ²
进口压力	0(0 s); 0.38(5 s); 0.38(10 s)	bar
浇注温度	1010	°C
冷隔缺陷生成量	1	无
铸件-升液管换热系数	500	W/m ² /K
铸件-模具间换热系数	1500	W/m ² /K
铸件-砂芯间换热系数	500	W/m ² /K

5.4.2 模拟与实验结果对比及分析

图 5-12 为方案 1 充型过程中不同时刻的铜相分布。从模拟结果可以看出，铜液最先只能通过内浇口 A2 进入铸件本体(图 5-12a, b)，由于内浇口 A2 位置较铸件本体下端面高，使得铜液需由内浇口 A2 冲至下端面，而且由于重力的作用，使得铜液在下端面的流动较为紊乱(图 5-12c, d)。当铜液流至内浇口 A1 时，铜液经由内浇口 A1 和 A2 进入铸件本体，充型较为平稳(图 5-12e~h)。图 5-13 为方案 2 充型过程中不同时刻的铜相分布。从模拟结果可以看出，铜液最先通过内浇口 B3 进入铸件本体，由于内浇口 B3 位置较铸件本体下端面低，铜液可以较为平稳地流至下端面(图 5-13a~d)。当铜液流至内浇口 B2 和 B1 时，充型也较为平稳(图 5-13e~h)。

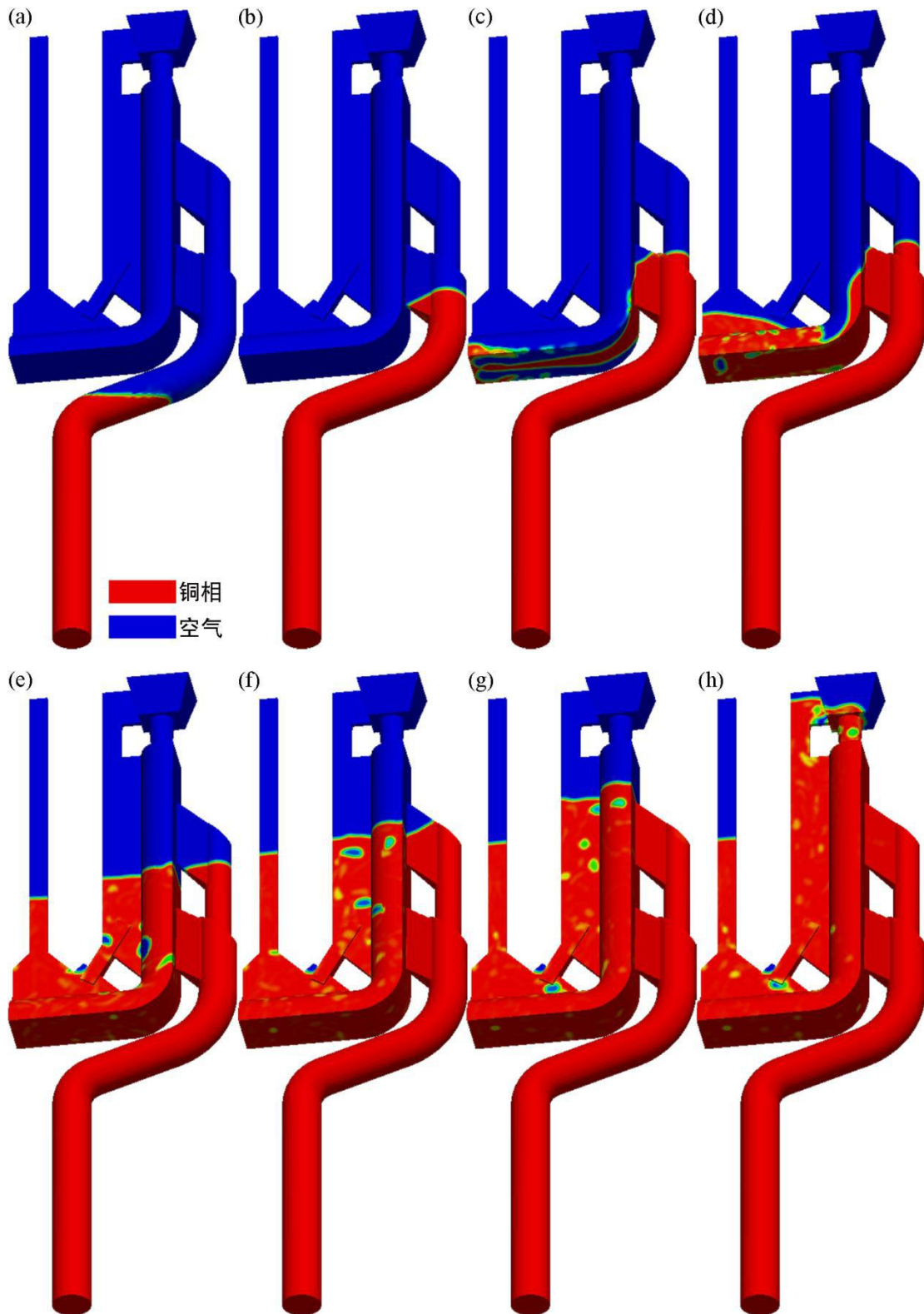


图 5-12 方案 1 充型过程中不同时刻的铜相分布: (a) 1.45 s; (b) 2.30 s; (c) 2.70 s; (d) 3.10 s; (e) 3.75 s; (f) 4.10 s; (g) 4.30 s; (h) 4.70 s

Fig. 5-12 Copper phase distributions at different times in scheme 1: (a) 1.45 s; (b) 2.30 s; (c) 2.70 s; (d) 3.10 s; (e) 3.75 s; (f) 4.10 s; (g) 4.30 s; (h) 4.70 s

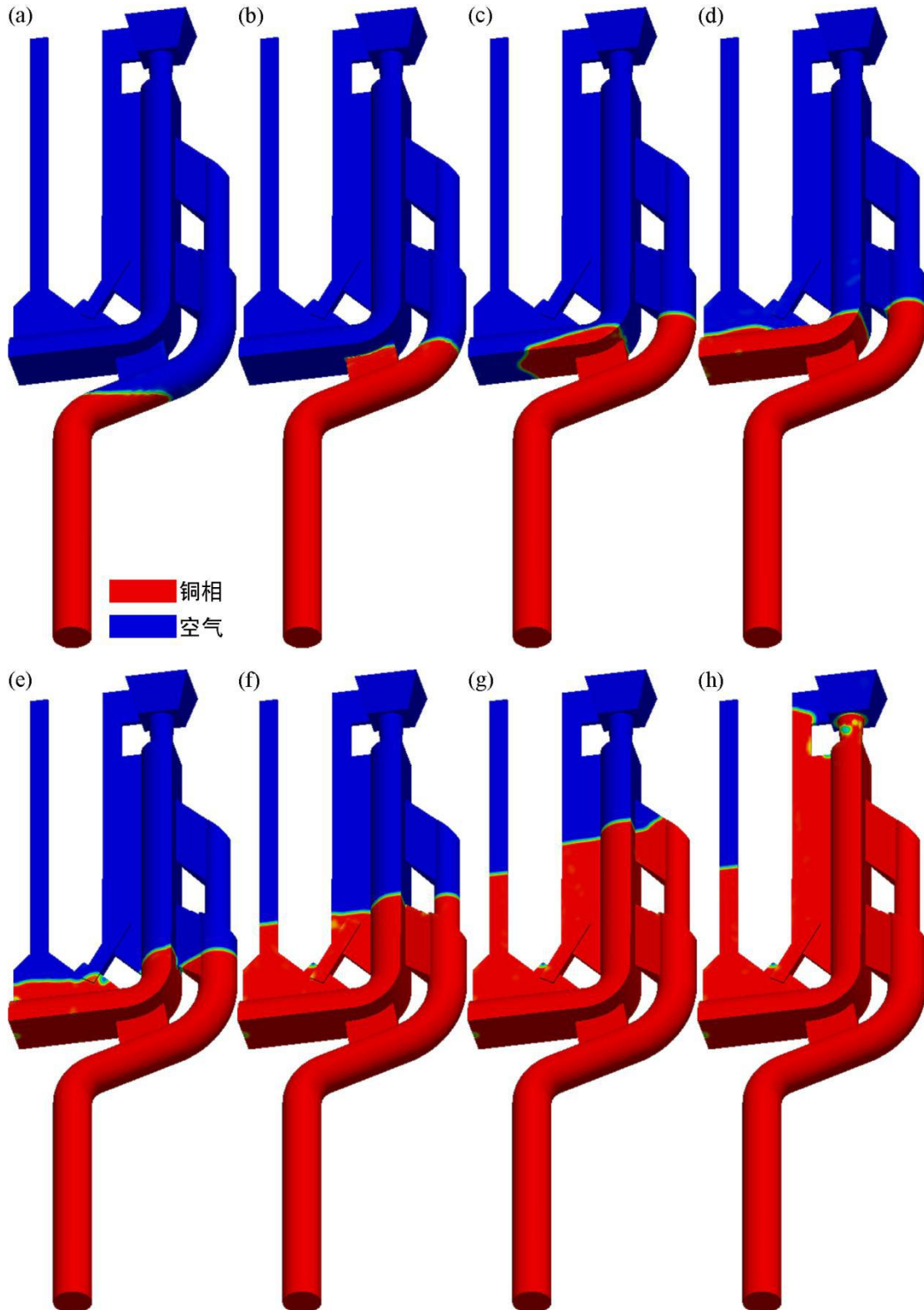


图 5-13 方案 2 充型过程中不同时刻的铜相分布: (a) 1.45 s; (b) 2.05 s; (c) 2.35 s; (d) 2.70 s; (e) 2.95 s; (f) 3.60 s; (g) 4.20 s; (h) 4.75 s

Fig. 5-13 Copper phase distributions at different times in Scheme 2: (a) 1.45 s; (b) 2.05 s; (c) 2.35 s; (d) 2.70 s; (e) 2.95 s; (f) 3.60 s; (g) 4.20 s; (h) 4.75 s

图 5-14 和图 5-15 分别是方案 1 和方案 2 充型过程中不同时刻的冷隔缺陷分布。从图 5-14 中的模拟结果可以看出, 由于铜液流至下端面时较为紊乱, 以及铸件本体降温较快, 使得铸件本体下部产生较多冷隔(图 5-14a~c)。由于铜液在铸件本体上部流动较为平稳, 以及内浇口 A1 具有保温作用, 从而铸件本体上部的冷隔较少(图 5-14d)。从图 5-15 中的模拟结果可以看出, 由于在整个充型过程中, 铜液流动较为平稳, 铸件本体上几乎没有冷隔。需要单独说明的是, 方案 1 和方案 2 中的铸件左上部位均产生了较多的冷隔, 其原因是该部位为排气片结构, 此处的铜液降温十分迅速, 因此, 冷隔较为明显, 但对铸件本体影响不大, 一般不予以考虑。

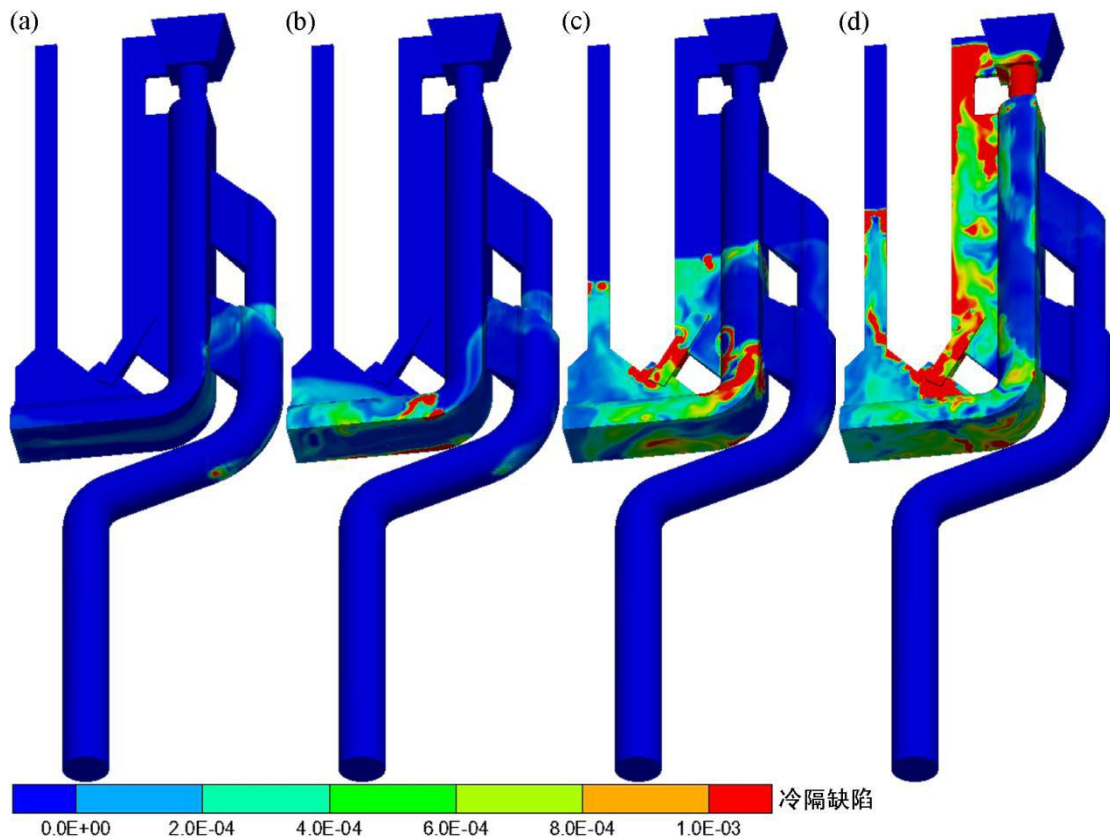


图 5-14 方案 1 充型过程中不同时刻的冷隔分布: (a) 2.70 s; (b) 3.10 s; (c) 3.75 s; (d) 4.70 s

Fig. 5-14 Cold shut distributions at different times in Scheme 1: (a) 2.70 s; (b) 3.10 s; (c) 3.75 s; (d) 4.70 s

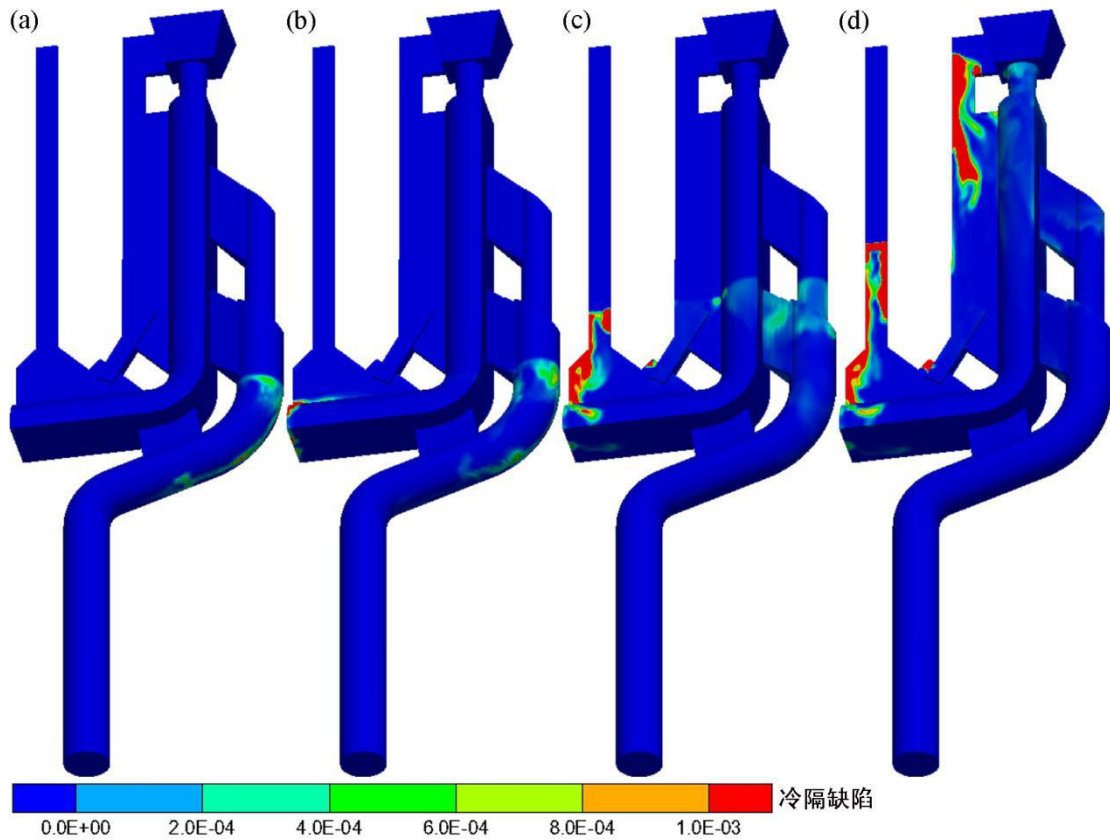


图 5-15 方案 2 充型过程中不同时刻的冷隔分布: (a) 2.35 s; (b) 2.70 s; (c) 3.60 s; (d) 4.75 s

Fig. 5-15 Cold shut distributions at different times in Scheme 2: (a) 2.35 s; (b) 2.70 s; (c) 3.60 s; (d)

4.75 s

为了定量化对比两个方案下的冷隔分布,考虑到两个方案之间冷隔差别最大的部位为下端面,因而,在下端面选取一段曲线(图 5-16a),沿着此曲线提取两种方案下的冷隔缺陷值(从位置 a 至位置 b),对比结果见图 5-16b。从对比结果可以明显看出,方案 1 中的冷隔远远高于方案 2,方案 2 只在下端面左端产生少量冷隔。

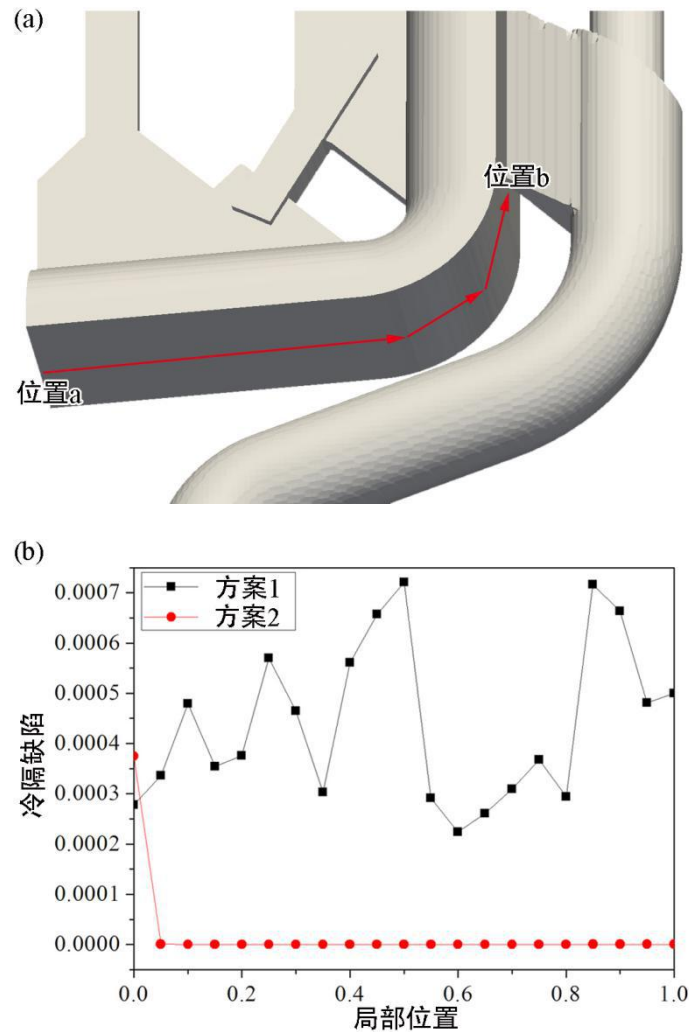


图 5-16 两种方案下铸件本体下端面的冷隔模拟结果对比：(a) 选取的位置；(b) 冷隔模拟结果对比

Fig. 5-16 Comparison of the simulation results of cold shut on the casting bottom in the two schemes:
(a) chosen curve; (b) comparison of cold shut simulation results

图 5-17 为方案 1 中实际铸件冷隔缺陷和模拟结果的对比，从对比结果可以看出，实际铸件本体的拐角处出现明显的冷隔(图 5-17a, b)，其原因是因为铜液在流至下端面的过程中降温较快，当液面前沿升至拐角处时，上下两股金属液交汇，其中一股液面前沿已部分凝固，使得该部位金属熔合不充分，形成冷隔。冷隔模拟结果中，铸件本体拐角处的冷隔也较为明显(图 5-17c, d)。实验和模拟结果中的冷隔缺陷位置并不完全对应，其原因是冷隔缺陷的形成与枝晶的生长过程相关，而本文的冷隔缺陷预测模型未考虑微观层面上的枝晶生长。但目前宏观模拟上无法考虑枝晶生长过

程，且实际冷隔缺陷基本处于缺陷预测值较大的区域，因此，验证了本文所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。

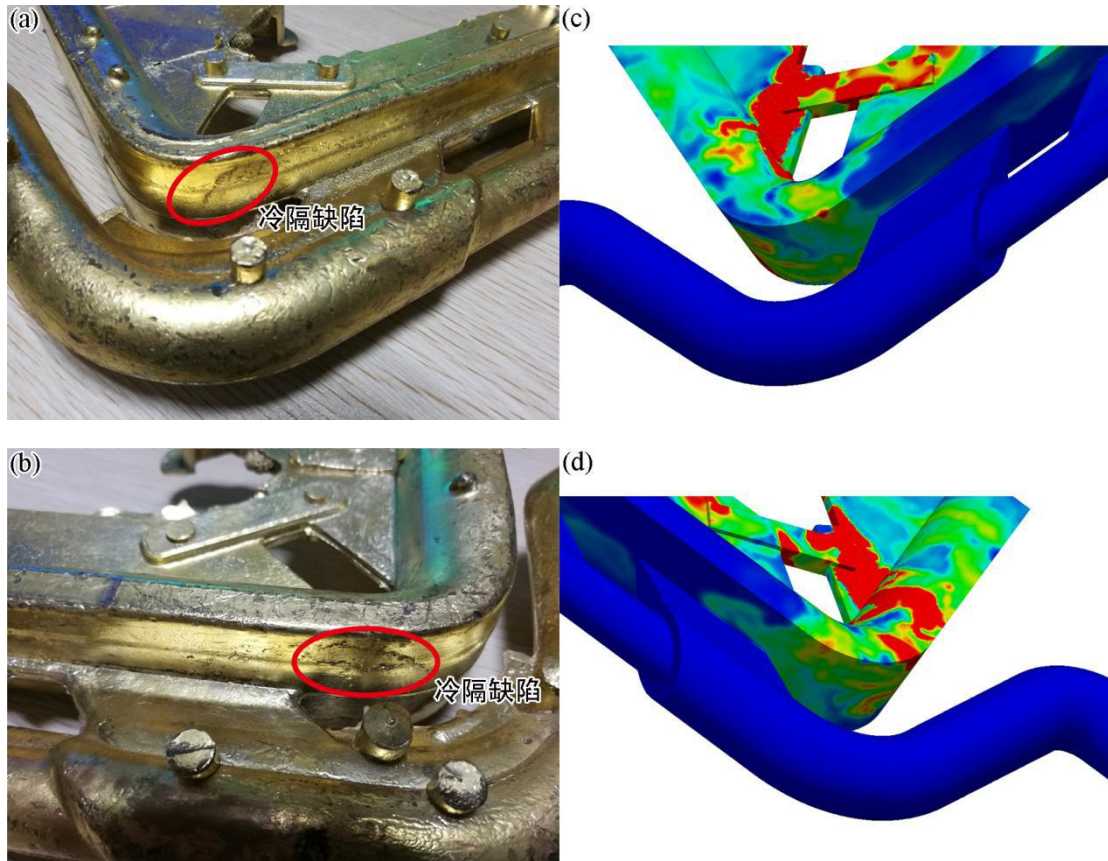


图 5-17 方案 1 中实际铸件冷隔缺陷与模拟结果对比：(a, b) 实际铸件冷隔缺陷；(c, d) 冷隔模拟结果

Fig. 5-17 Comparison between actual cold shut with the simulation results in scheme 1: (a, b) Actual cold shut; (c, d) simulation cold shut results

5.5 不同浇道下铝合金铸件氧化夹渣缺陷实验验证

为了验证本文所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的准确性。针对一典型铝合金铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器进行计算，分析不同浇道下铸件内部和壁面氧化夹渣缺陷分布，并与相关文献实验结果进行对比验证。

5.5.1 几何模型及参数设置

对于铝合金铸造而言，内浇道速度对液面前沿紊乱程度以及氧化夹渣卷入具有至关重要的影响。本文选取了一典型铝合金铸造工艺^[130]，如图 5-18 所示，包括浇注系统和铸件本体。为了获得不同的内浇道速度，采用了两种不同的浇注系统：矩形浇道（Rectangle Runner, RR）和涡流浇道（Vortex-flow Runner, VR）。相比于矩形浇道而言，涡流浇道通常能有效地避免液面前沿流动紊乱，保证内浇道速度低于铝合金铸造的临界速度 0.5 m/s^[122]。需要说明的是，所采用的两种浇道的唯一区别在于浇道横截面形状，而浇道横截面面积是一致的，因此，两种浇道可直接用于对比不同流动形态对氧化夹渣缺陷的影响。

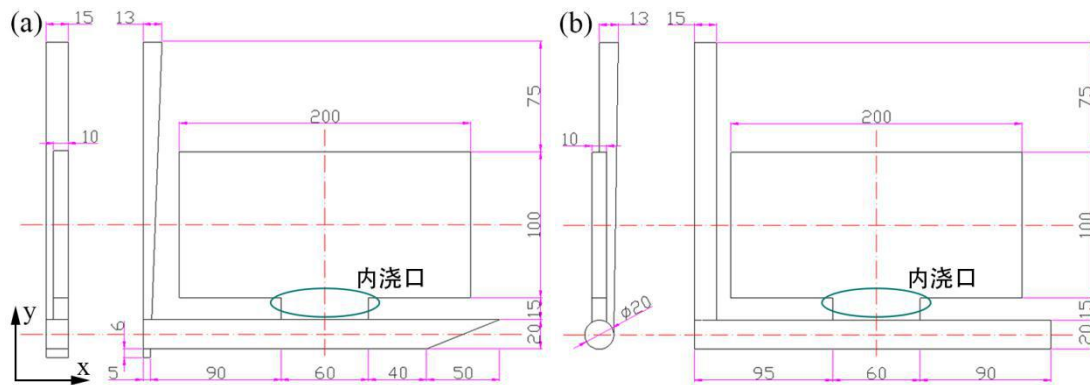


图 5-18 一典型铝合金铸造工艺^[130](单位: mm): (a) 矩形浇道; (b) 涡流浇道

Fig. 5-18 A representative aluminum alloy casting technology^[130] (unit: mm): (a) RR system; (b) VR system

为了更为直接地对比不同液面前沿形态对氧化夹渣的影响，参照文献[130]通过设置不同的内浇道速度来进行区别不同浇道，因此，计算域是图 5-18 中尺寸为 200 × 100 × 10 mm 的长方体区域。表 5-4 为计算过程中所需设置的参数，其中铝合金牌号为 LM25 (Al-7Si-0.4Mg)。考虑到充型过程时间很短，金属液温度变化很小，为了保证计算效率，本文均采用恒定的物性参数。

表 5-4 计算过程中所需设置的参数

Tab. 5-4 The parameters needed for simulation

参数	数值	单位
铝合金的密度	2416	kg/m ³

空气的密度	1	kg/m ³
铝合金的动力粘度	1.38e-3	Pa·s
空气的动力粘度	1e-5	Pa·s
铝合金与空气间的表面张力系数	0.87	N/m
铝合金的比热容	1.19	kJ/kg/K
铝合金的导热系数	70.15	W/m/K
铝合金的液相线温度	611	°C
铝合金的固相线温度	550	°C
铝合金的潜热	358	kJ/kg
重力加速度	{0, 0, -9.8}	m/s ²
	RR: {0, 0, 0.7}	
内浇道速度	VR: {0, 0, 0.4}	m/s
内浇道温度	740	°C
氧化夹渣生成速率常量	20	kg/m ³ /s
单元临界氧化夹渣密度	1	kg/m ³
壁面临界氧化夹渣密度	2	kg/m ³

5.5.2 模拟与实验结果对比及分析

图 5-19 和图 5-20 分别为模拟计算的不同浇道下中截面金属液充型体积比和氧化夹渣缺陷分布。从图 5-19 中金属液充型体积比模拟结果可以看出，矩形浇道下由于内浇道速度较大，使得充型形态呈喷射状态，从而在内浇道两端产生两个较大的卷气团，直至金属液充填至铸件顶端，卷气团仍然在铸件中下部。从氧化夹渣密度模拟结果可以看出，在产生卷气团之前，氧化夹渣只在液面前沿存在，随着卷气团产生以及流动形态逐渐紊乱，金属液内部也出现了氧化夹渣，且集中分布在铸件中下部。从图 5-20 中模拟结果可以看出，相比于矩形浇道，涡流浇道下由于内浇道速度较小，金属液充型形态较为平稳，卷气现象不严重，从而使得金属液内部氧化夹渣较少，且集中分布在铸件左右两侧。

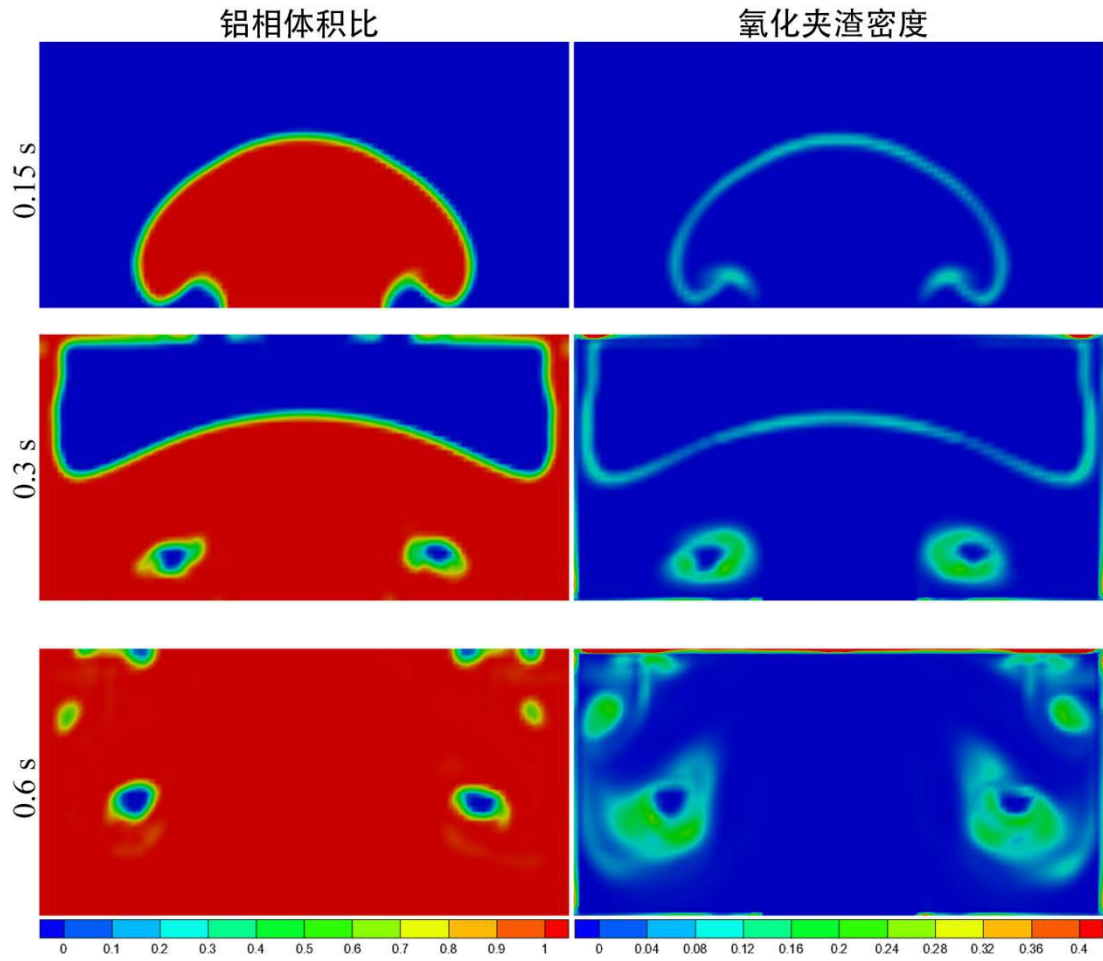
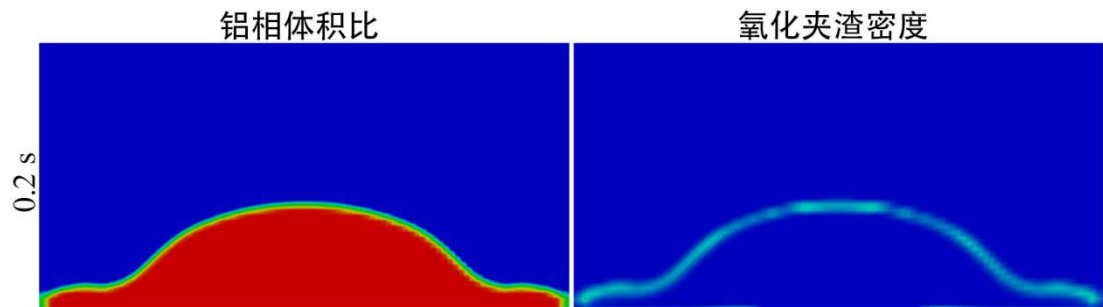


图 5-19 矩形浇道下不同时刻的中截面金属液充型体积比和氧化夹渣密度分布(单位: kg/m^3)

Fig. 5-19 The volume fraction of liquid metal and oxide inclusion density distributions on the middle cross-section under RR at different times (unit: kg/m^3)



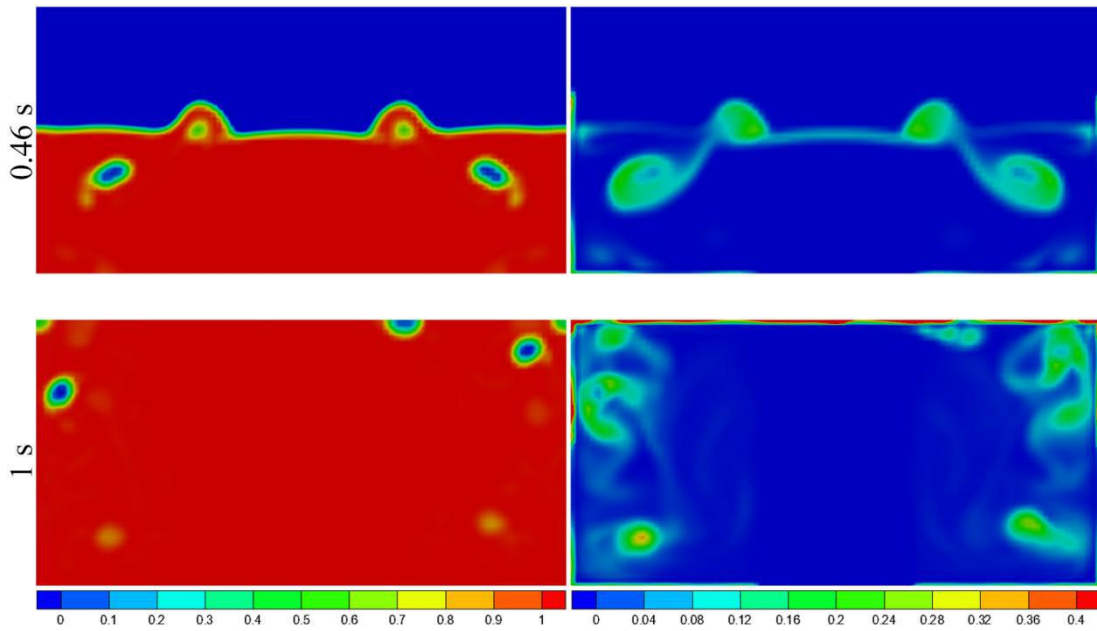


图 5-20 涡流浇道下不同时刻的中截面金属液充型体积比和氧化夹渣密度分布(单位: kg/m^3)

Fig. 5-20 The volume fraction of liquid metal and oxide inclusion density distributions on the middle cross-section under VR at different times (unit: kg/m^3)

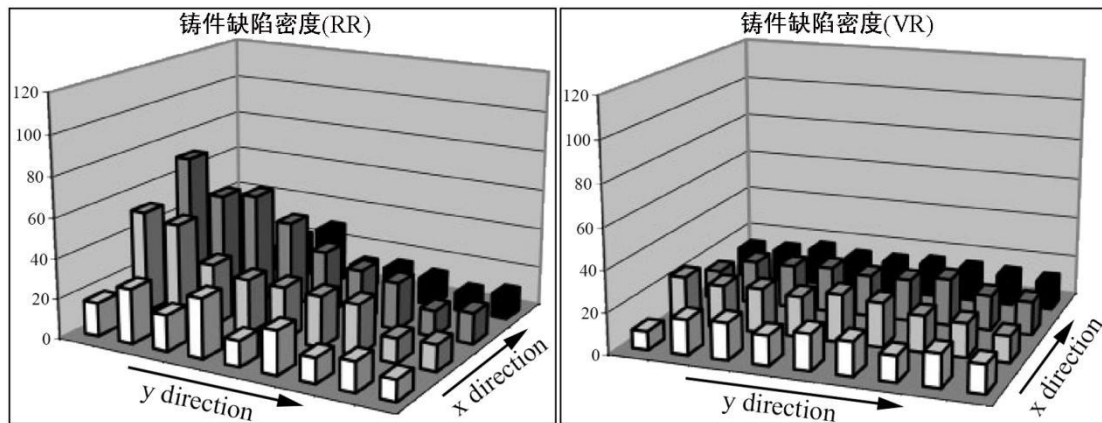


图 5-21 实验测量的不同浇道下铸件平板上缺陷密度分布^[130]

Fig. 5-21 The distributions of casting defect density (number per unit area) on casting plates under different runners^[130]

文献[130]中对采用不同浇道所获得的铸件平板进行抛光,进而采用图像分析设备对平板上不同区域进行亮度级别测量,从而得到不同浇道下铸件平板上缺陷密度分布,即单位面积上所测量的暗点个数,如图 5-21 所示。需要说明的是,实验所测量的铸件缺陷并不能完全跟氧化夹渣缺陷等价,因为其他铸件缺陷如卷气孔、缩孔

缩松等均会影响亮度测量。但从图 5-21 中对比结果可以看出，整体上而言，矩形浇道下缺陷密度分布不均匀，且主要集中在铸件中下部。涡流流道下缺陷密度分布较为均匀。

图 5-22 为不同浇道下铸件前壁面氧化夹渣密度分布，可以看出矩形浇道下氧化夹渣分布不均匀，且主要集中在铸件中下部；涡流流道下氧化夹渣主要集中在铸件两侧。从上述模拟结果来看，相比于涡流浇道，矩形浇道由于流动形态较为紊乱，使得氧化夹渣缺陷较为严重，实际缺陷测量结果也基本反映了此趋势。综合而言，氧化夹渣缺陷预测结果与文献实验结果对应良好，因此，验证了本文所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的准确性。

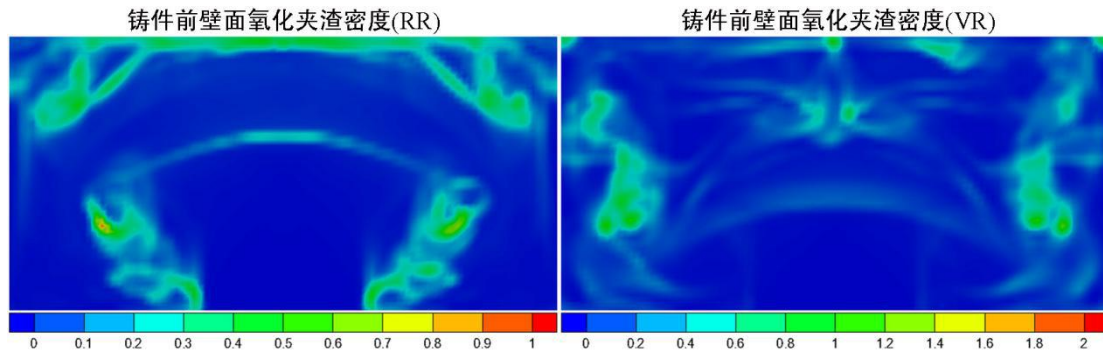


图 5-22 不同浇道下铸件前壁面氧化夹渣密度分布(单位: kg/m^3)

Fig. 5-22 The oxide inclusion density distributions on the front wall of the casting plates under different runners (unit: kg/m^3)

5.6 铜合金低压铸件氧化夹渣缺陷实验验证

为了验证本文所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。针对一实际铜合金低压铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器进行计算，分析其充型及氧化夹渣演变过程，并与实际铸件氧化夹渣缺陷分布情况进行对比验证。

5.6.1 几何模型及参数设置

图 5-23 为所采用的低压铸造工艺的几何及网格模型，铸件的整体尺寸为：217×50×535 mm，其中铸件本体为壁厚为 4 mm 的弯曲管状结构。

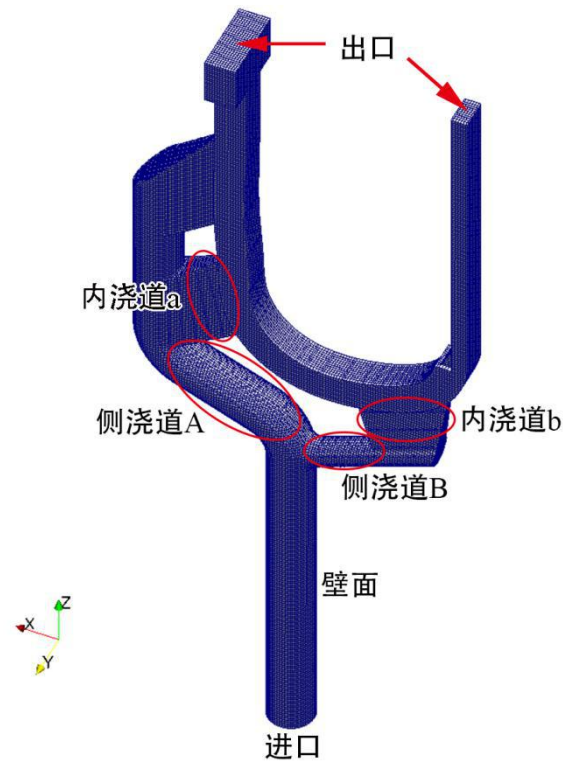


图 5-23 所采用的低压铸造工艺的几何及网格模型

Fig. 5-23 The geometric model and mesh of the adopted low pressure die casting technology
实验所采用的铜合金牌号为 GKMS60，模拟过程中所设置的参数如表 5-5 所示。

表 5-5 计算过程中所需设置的参数

Tab. 5-5 The parameters needed for the calculation

参数	数值	单位
铜合金的密度	7000	kg/m ³
空气的密度	1	kg/m ³
铜合金的动力粘度	3.22e-3	Pa·s
空气的动力粘度	1e-5	Pa·s
铜液与空气间的表面张力系数	1.2	N/m
铜合金的比热容	0.48	kJ/kg/K
铜合金的导热系数	120	W/m/K
铜合金的液相线温度	921.4	°C
铜合金的固相线温度	890	°C

铜合金的潜热	153	kJ/kg
重力加速度	$\{0, 0, -9.8\}$	m/s ²
进口压力	0 s 0 bar; 5 s 0.36 bar; 10 s 0.36 bar	bar
进口温度	1015	℃
氧化夹渣生成速率常量	10	kg/m ³ /s
单元临界氧化夹渣密度	1	kg/m ³
壁面临界氧化夹渣密度	2	kg/m ³

5.6.2 模拟与实验结果对比及分析

图 5-24 为充型过程中不同时刻的液相分布，从模拟结果可以看出，由于低压铸造工艺中底部进口端压力缓慢上升，保证充型过程十分平稳，使得氧化夹渣缺陷主要集中在液面前沿。图 5-25 为铜液在升液管内流动时中截面的氧化夹渣缺陷分布，从模拟结果可以看出，随着液面前沿暴露在空气中的时间增加，氧化夹渣缺陷生成量也逐渐增加。由于此过程中只有液面四周与铸型壁面接触，使得液面四周的氧化夹渣基本都粘附到相邻壁面。

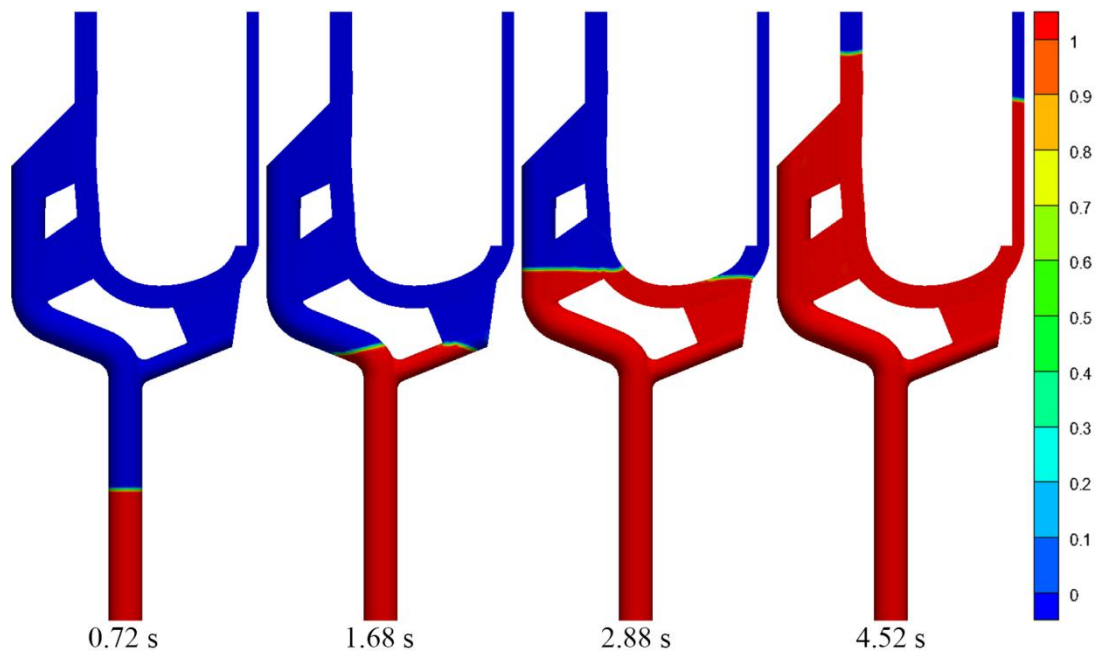


图 5-24 充型过程中不同时刻的液相分布

Fig. 5-24 The liquid metal distributions at different times during filling

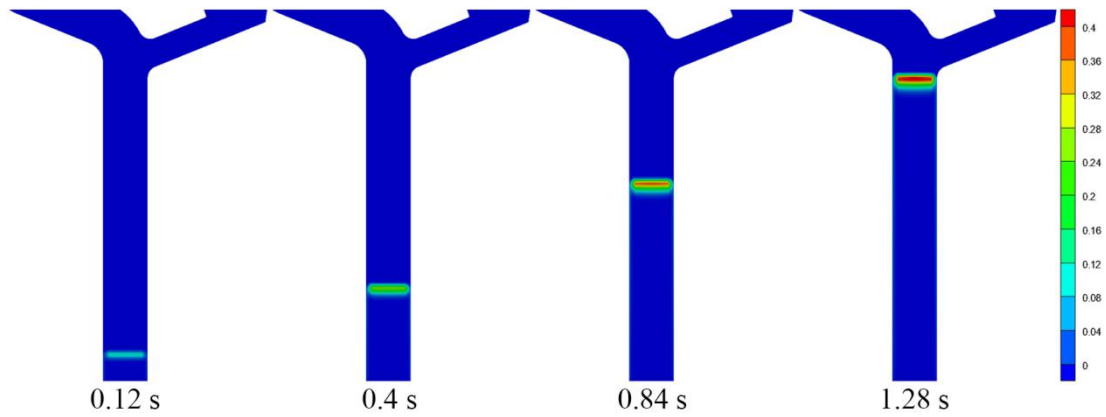
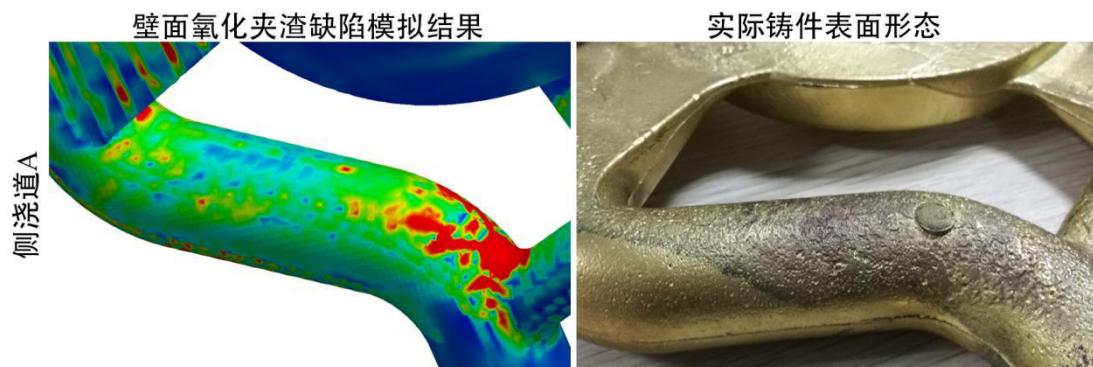


图 5-25 铜液在升液管内流动时中截面的氧化夹渣缺陷分布(单位: kg/m^3)

Fig. 5-25 The oxide inclusion density distributions on the middle cross-section when the liquid metal flowed into the lift tube (unit: kg/m^3)

通过上述分析可知, 由于充型过程十分平稳, 使得氧化夹渣很难卷入到金属液内部, 因而绝大部分氧化夹渣会粘附到铸型壁面。为了更为有效地分析不同区域的壁面氧化夹渣缺陷情况, 针对本文的铸造工艺, 选取了四个关键区域: 侧浇道 A、侧浇道 B、内浇道 a 和内浇道 b, 区域具体位置见图 5-23。图 5-26 为不同部位处壁面最终氧化夹渣缺陷模拟结果与实际铸件表面形态对比。需要说明的是, 实际低压铸造过程中同一铸型会进行多次充型-凝固-取件过程, 氧化夹渣会多次在铸型壁面上积累, 当累积到一定程度之后, 就会显著影响铸件表面形态。因此, 铸件表面形态可以直接反映壁面氧化夹渣缺陷情况。



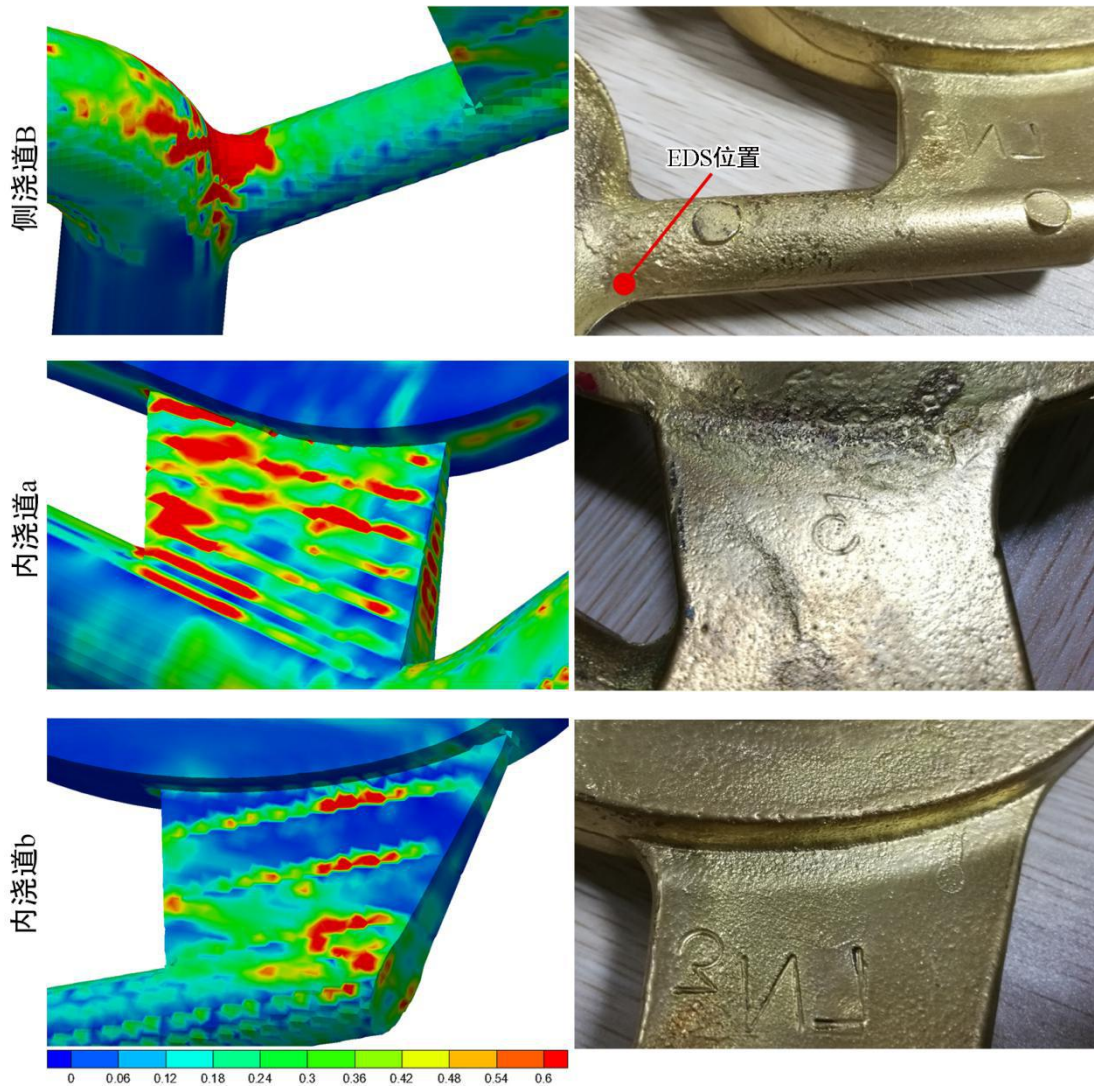


图 5-26 不同部位处壁面氧化夹渣缺陷模拟结果与实际铸件表面形态对比(单位: kg/m^3)

Fig. 5-26 Comparison between the oxide inclusion defect on the wall and the casting surface morphology on different parts (unit: kg/m^3)

为了进一步说明铸件表面粗糙区域的产生是由氧化夹渣积累所导致的,在实际铸件浇道选取一部位,位置见图 5-26,对此部位的两个位置点进行扫描电镜能谱分析,测试结果如图 5-27 所示。从测试结果可以明显看出,铸件表面粗糙区域的氧元素含量明显较大,因此,证实了铸件表面粗糙区域的产生原因是氧化夹渣积累。

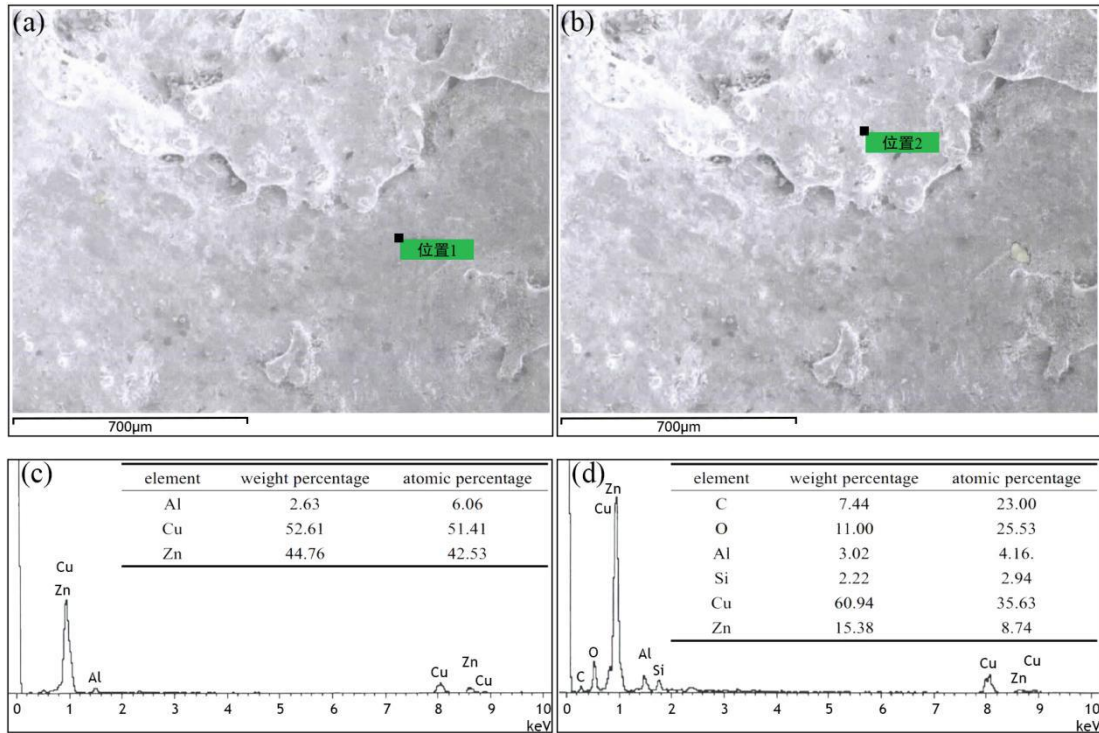


图 5-27 选定部位的扫描电镜能谱分析结果：(a) 位置 1；(b) 位置 2；(c) 位置 1 的扫描电镜能谱分析结果；(d) 位置 2 的扫描电镜能谱分析结果

Fig. 5-27 Energy dispersive spectrum (EDS) analysis results of the chosen locations: (a) location 1 for EDS; (b) location 2 for EDS; (c) EDS result of location 1; (d) EDS result of location 2

从图 5-26 中的对比结果可以看出，由于金属液在升液管内流动时生成了大量氧化夹渣，且只有少量粘附至壁面，当金属液流至侧浇道时，大量氧化夹渣会直接接触壁面，使得侧浇道 A 和侧浇道 B 壁面粘附较多氧化夹渣，且主要集中在流道上部。由于侧浇道 A 直径明显大于侧浇道 B，使得较多氧化夹渣进入侧浇道 A，从而使得内浇道 a 壁面处所粘附的氧化夹渣较内浇道 b 多。为了量化说明四个关键区域的氧化夹渣缺陷分布，针对每个区域均匀选取 20 个位置点，并记录各个位置点的氧化夹渣密度值，对比结果如图 5-28 所示。从对比结果可以看出，侧浇道 A 的整体氧化夹渣密度最大，侧浇道 B 少部分区域的氧化夹渣密度较大；相比于内浇道 b 而言，内浇道 a 壁面处氧化夹渣缺陷更为严重。综合而言，壁面氧化夹渣缺陷预测结果与实际铸件表面氧化夹渣缺陷分布对应良好，因此，验证了本文所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。

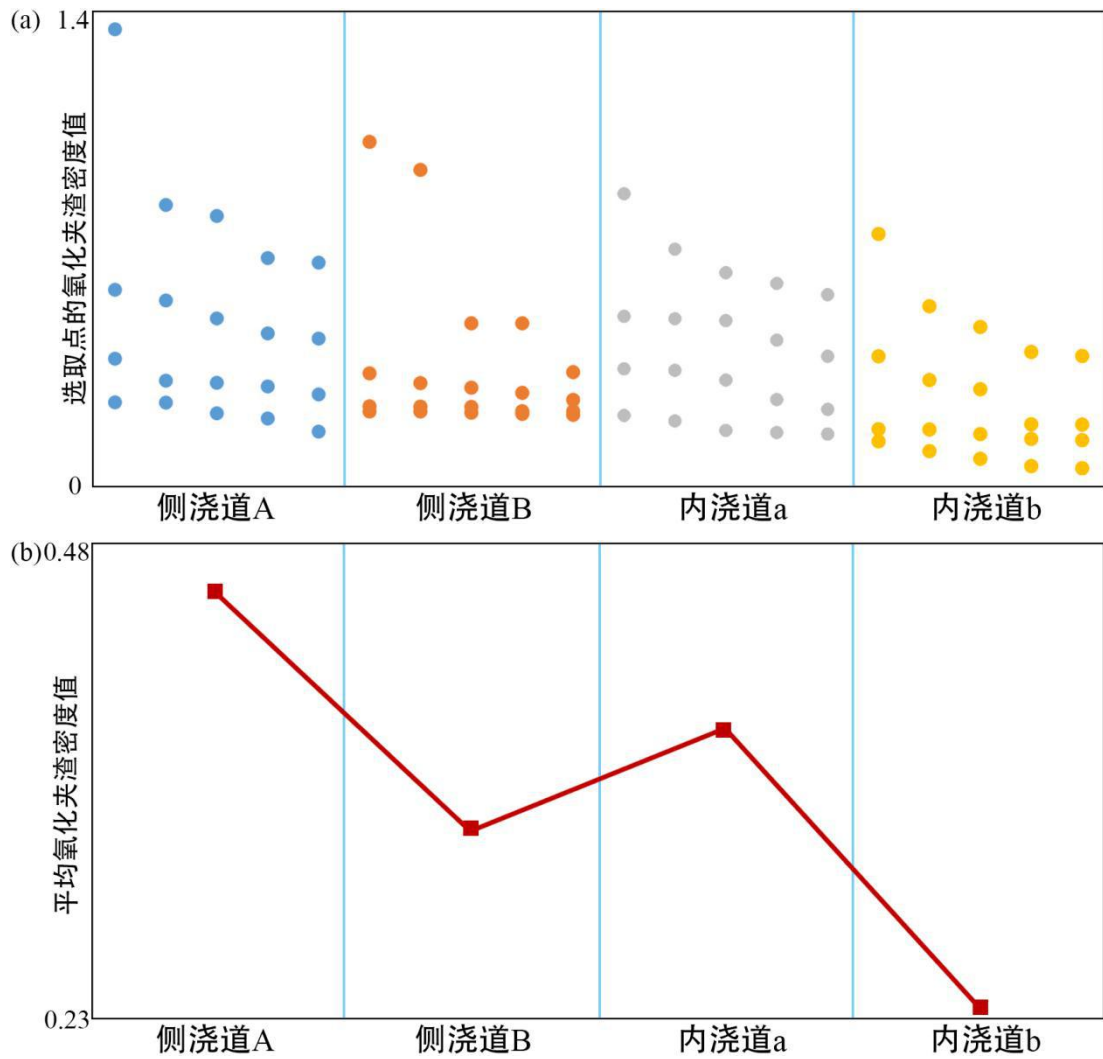


图 5-28 不同部位上均匀分布点的壁面氧化夹渣密度计算值及其平均值(单位: kg/m^3): (a) 氧化夹渣密度计算值; (b) 氧化夹渣密度平均值

Fig. 5-28 The calculated and averaged oxide inclusion density on the wall of evenly distributed positions on different parts (unit: kg/m^3): (a) calculated oxide inclusion density; (b) averaged oxide inclusion density

5.7 本章小结

(1) 设计了一组多壁厚铜合金低压铸造工艺, 分析不同壁厚下的充型过程和铸件最终充型高度。模拟和实验结果对应较好, 验证了本文所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性。

(2) 设计了一组具有不同浇道的锌合金高压铸造工艺，分析不同浇道下的充型过程和铸件最终卷气缺陷分布。卷气缺陷预测结果与实际铸件气孔分布对应良好，验证了所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性。

(3) 针对一组具有不同浇道的铜合金低压铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器进行计算，对比其充型及冷隔缺陷演变过程。冷隔缺陷预测结果与实际铸件冷隔分布对应良好，验证了本文所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。

(4) 针对一典型铝合金铸造工艺和一实际铜合金低压铸造工艺，采用所开发的铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器进行计算，对比分析氧化夹渣缺陷演变过程。氧化夹渣缺陷预测结果与实际铸件表面氧化夹渣缺陷分布对应良好，验证了本文所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。

第6章 结论与展望

6.1 全文总结

本文对铸造充型过程成形类缺陷数值模拟所涉及的各个方面进行了深入的研究和探讨，包括铸造充型过程多相流数学建模、冷隔缺陷演化机理及预测和氧化夹渣缺陷演化机理及预测等。同时，基于计算流体力学开源代码完成了相关求解器的开发工作，有助于广大科研工作者深入研究铸造充型过程数值模拟技术。主要的创新工作和结论如下：

(1) 考虑到液固转变对铸造充型过程影响较大，提出了一基于固相率变化的糊状区流动行为计算模型，即高固相率糊状区采用临界固相率方法，低固相率糊状区采用变黏度模型，中等固相率糊状区采用多孔介质拖拽模型，有效地处理了液固转变过程中糊状区不同阶段的流动行为。建立了气液固多相流数学模型，用于计算充型过程中“空气-金属液-已凝固金属”三相间的耦合作用。基于计算流体力学开源代码 OpenFOAM，开发了铸造充型过程求解器。计算了两个充型基准实验，验证了本文流动场模型基础算法(气液两相流计算)的准确性。计算和对比了不同糊状区流动模型下一底注式铸造工艺的计算结果，验证了本文糊状区流动行为计算模型的合理性。

(2) 影响冷隔缺陷的主要因素包括界面前沿凝固状态、碰撞剧烈程度和汇聚程度。考虑到隐式界面追踪算法只能得到扩散型界面前沿，提出了适用于冷隔缺陷预测的界面前沿判断算法。考虑到冷隔缺陷是由金属液界面前沿交汇产生的，参照拉格朗日粒子追踪的思想，提出了判断界面前沿碰撞的算法。结合冷隔缺陷演化机理，提出了一考虑金属相固相率、速度和体积比的冷隔缺陷生成模型，并在铸造充型过程求解器的基础上，开发了铸造充型过程冷隔缺陷预测求解器。

(3) 铸造充型过程中氧化夹渣缺陷的主要影响因素包括金属液-空气接触程度、金属液温度和已产生的氧化夹渣。结合已有的化学反应模型(化学燃烧速率计算模型和型芯发气速率计算模型)，提出了一考虑金属相体积比、温度和当前氧化夹渣密度的氧化夹渣生成速率计算模型。考虑到充型过程中氧化夹渣会在铸型壁面上发生粘附和累积，提出了一氧化夹渣缺陷壁面粘附模型。在已开发的铸造充型过程求解器的基础上，完成了铸造充型过程氧化夹渣缺陷预测求解器的开发工作。

(4) 设计了一组多壁厚铜合金低压铸造工艺，分析和对比了不同壁厚下的充型过程和铸件最终充型高度，验证了所提出的糊状区流动行为计算模型在预测浇不足缺陷方面的准确性。设计了一组具有不同浇道的锌合金高压铸造工艺，分析了不同浇道下的充型过程和铸件最终卷气缺陷分布。卷气缺陷预测结果与实际铸件气孔分布对应良好，验证了所采用的气液固多相流模型在预测卷气缺陷方面的实用性。针对一组具有不同浇道的铜合金低压铸造工艺，计算和对比了其充型及冷隔缺陷演变过程。冷隔缺陷预测结果与实际铸件冷隔分布对应良好，验证了所提出的冷隔缺陷预测模型的实用性。针对一典型铝合金铸造工艺和一铜合金低压铸造工艺，对比和分析了氧化夹渣缺陷演变过程。氧化夹渣缺陷预测结果与实际铸件表面氧化夹渣缺陷分布对应良好，验证了所提出的氧化夹渣缺陷预测模型的实用性。上述基准试验件和铸造实验证明了本文铸造充型过程中成形类缺陷数值模拟技术的可行性和实用性，能够为实际铸造生产提供科学指导。

6.2 研究展望

(1) 减少简化和假设，建立更加符合实际的铸造充型过程成形类缺陷预测模型，让数值模拟的结果不仅在趋势上与实际铸造工艺相同，而且在数值上能更加接近，精度更高。

(2) 已提出的铸造充型过程成形类缺陷预测模型包含一些需根据实际生产来确定的控制参数。结合数值模拟和实验研究，建立不同合金、不同铸造工艺下的控制参数库，奠定更加准确和全面预测铸造充型过程中成形类缺陷的基础。

(3) 结合实验研究，建立实际铸造充型过程成形类缺陷的量化标准，明确缺陷模拟结果与实际铸件缺陷之间的定量化对应关系，实现真正意义上的定量化预测铸造充型过程成形类缺陷。

致 谢

随着本论文的完结，我在华科的九年青葱岁月也将告一段落。当初那个青涩懵懂的少年，已有足够的勇气和自信走向生活。虽说象牙塔中的日子是纯粹和自由的，但也经历过彷徨和痛苦。回首一路来的点点滴滴，唯有感谢二字可以表达我所有的心情。

感谢我的硕士、博士研究生导师廖敦明教授。廖老师深厚的学术底蕴引领着我在求学路上积极进取，廖老师平易近人的生活态度让我感受到家人般的温暖。感谢庞盛永副教授。庞老师精益求精的工作态度和极高的工作效率一直激励着我。感谢陈涛博后和孙飞博后。在我每次遇到科研难题的时候他们总是耐心地指导，让我在科研道路上有了更大的追求。

感谢路达(厦门)工业有限公司的胡振清副总和达贵平经理。他们在项目合作期间全力配合实验工作，让我明白工科研究应立足于生产实践。

感谢滕子浩、唐玉龙、吴棣、袁贝、胡柏乐和张影等同课题组的所有兄弟姐妹。他们这些年在学习和生活上给予了我很多帮助，我十分珍惜与大家一起度过的研究生时光。

感谢大家族里的所有成员。他们让我意识到我从来都不是一个人在奋斗，更让我体会到生活的意义在于相互扶持和共同进步。

感谢夫人关维。她这些年的默默承受，让我在学术道路上无所顾虑。

感谢父母。他们给了我生命，给了我全部的感情和牵挂，让我一直满怀感恩之心。

感谢身在天国的奶奶。只愿来世去回报您对我那么多年的养育之恩。

谨以此文献给我的母校华中科技大学，愿她越来越好！

曹流

2018年03月于华中科技大学

参考文献

- [1] 中国机械工程学会铸造分会. 2016 年中国铸件产量发布 [EB/OL]. <http://www.foundrynations.com/index.php>, 2017-06-26/2017-10-19.
- [2] 周济. 智能制造——“中国制造 2025”的主攻方向[J]. 中国机械工程, 2015, 26(17): 2273-2284.
- [3] 中国机械工程学会铸造分会. 铸造行业“十三五”技术发展规划纲要[J]. 铸造, 2015, 64(12): 1165-1202.
- [4] 胡海成, 王伟东. 铸造行业的节能与环保[J]. 环球市场, 2016, 33: 188.
- [5] 于波, 孙逊. 铸造技术的发展现状与趋势[J]. 铸造设备与工艺, 2017, 2: 65-70.
- [6] Cao L, Liao D, Lu Y, et al. Heat transfer model of directional solidification by LMC process for superalloy casting based on finite element method[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2016, 47(9): 4640-4647.
- [7] 廖敦明, 曹流, 孙飞, 等. 铸造宏观过程数值模拟技术的研究现状与展望[J]. 金属学报, 2017, DOI: 10.11900/0412.1961.2017.00317.
- [8] Fursund V K. Das eindringen von stahl in forsand einflub der oberflachen reaktionen und der temperatur[J]. Giesserei Tech-Wiss, Beihefte, 1962, 14: 51-61.
- [9] 刘东戎, 杨智鹏, 王丽萍, 等. 铸造充型过程数值模拟技术的发展及现状评述[J]. 哈尔滨理工大学学报, 2016, 21(3): 96-100.
- [10] Ravi B, Joshi D. Feedability analysis and optimisation driven by casting simulation[J]. Indian Foundry Journal, 2007, 53(6): 71-78.
- [11] Temam R. Navier-stokes equations[M]. 3rd Ed., Amsterdam: North-Holland, 1984.
- [12] Taitel Y. On the parabolic, hyperbolic and discrete formulation of the heat conduction equation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1972, 15(2): 369-371.
- [13] 陈涛. 基于有限元法的铸造热应力数值模拟及其智能化技术的研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2013.
- [14] Roes H G, Stynes M, Tobiska L. Numerical methods for singularly perturbed differential equations: convection-diffusion and flow problems[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1996.

- [15] Hattel J, Hansen P, Hansen L F. Analysis of thermally induced stresses in die casting using a novel control volume technique[J]. Minerals, Metals & Materials Society, 1993: 585-590.
- [16] Celentano D, Oller S, Oñate E. A coupled thermomechanical model for the solidification of cast metals[J]. International Journal of Solids and Structures, 1996, 33(5): 647-673.
- [17] Richmond O, Tien R H. Theory of thermal stresses and air-gap formation during the early stages of solidification in a rectangular mold[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1971, 19(5): 273-284.
- [18] Wiese J W, Dantzig J A. Modeling stress development during the solidification of gray iron castings[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1990, 21(1): 489-497.
- [19] Gunasegaram D R, Farnsworth D J, Nguyen T T. Identification of critical factors affecting shrinkage porosity in permanent mold casting using numerical simulations based on design of experiments[J]. Journal of materials processing technology, 2009, 209(3): 1209-1219.
- [20] Nastac L, Jia S, Nastac M N, et al. Numerical modeling of the gas evolution in furan binder-silica sand mold castings[J]. International Journal of Cast Metals Research, 2016, 29(4): 194-201.
- [21] Beckermann C. Modelling of macrosegregation: applications and future needs[J]. International Materials Reviews, 2002, 47(5): 243-261.
- [22] 廖敦明, 刘瑞祥, 陈立亮, 等. 基于有限差分法的铸件凝固过程热应力场数值模拟的研究[J]. 铸造, 2003, 52(6): 420-425.
- [23] 张彬. 基于 ABAQUS 的铸件准固态区热应力场数值模拟技术[D]. 武汉: 华中科技大学, 2011.
- [24] 吴菲. 铝合金异形件压铸成形工艺的数值模拟分析[D]. 广州: 华南理工大学, 2010.
- [25] Rajkolhe R, Khan J G. Defects, causes and their remedies in casting process: A review[J]. International Journal of Research in Advent Technology, 2014, 2(3): 375-383.

- [26] Wang Y, Li D, Peng Y, et al. Numerical simulation of low pressure die casting of magnesium wheel[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2007, 32(3): 257-264.
- [27] Keerthiprasad K S, Murali M S, Mukunda P G, et al. Numerical simulation and cold modeling experiments on centrifugal casting[J]. Metallurgical and materials transactions B, 2011, 42(1): 144-155.
- [28] Liao D M, Cao L, Chen T, et al. Radiation heat transfer model for complex superalloy turbine blade in directional solidification process based on finite element method[J]. China Foundry, 2016, 13(2): 123-132.
- [29] Dabade U A, Bhedasgaonkar R C. Casting defect analysis using design of experiments (DoE) and computer aided casting simulation technique[J]. Procedia CIRP, 2013, 7: 616-621.
- [30] 曹流, 廖敦明, 周聪, 等. 基于有限元法的多材质铸造温度场模拟软件开发[J]. 特种铸造及有色合金, 2015, 35(11): 1163-1166.
- [31] Liu L, Nakano S, Kakimoto K. Dynamic simulation of temperature and iron distributions in a casting process for crystalline silicon solar cells with a global model[J]. Journal of Crystal Growth, 2006, 292(2): 515-518.
- [32] Sang W, Li F. An unstructured/structured multi-layer hybrid grid method and its application[J]. International journal for numerical methods in fluids, 2007, 53(7): 1107-1125.
- [33] Mitchell A R, Griffiths D F. The finite difference method in partial differential equations[M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 1980.
- [34] 曹流, 廖敦明, 曹腊梅, 等. 基于有限元法的熔模铸造过程温度场模拟软件自主开发[J]. 铸造, 2014, 63(12): 1235-1240.
- [35] Kim J, Kim D, Choi H. An immersed-boundary finite-volume method for simulations of flow in complex geometries[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 171(1): 132-150.
- [36] Liu G R, Liu M B. Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method[M]. Singapore: World Scientific, 2003.
- [37] Cao W, Zhou Z, Jiang F. Smoothed particle hydrodynamics modeling and simulation

- of foundry filling process[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2015, 25(7): 2321-2330.
- [38]Chorin A J. Numerical solution of the Navier-Stokes equations[J]. Mathematics of computation, 1968, 22(104): 745-762.
- [39]Gao D M. A three-dimensional hybrid finite element-volume tracking model for mould filling in casting processes[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1999, 29(7): 877-895.
- [40]Lewis R W, Usmani A S, Cross J T. Efficient mould filling simulation in castings by an explicit finite element method[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1995, 20(6): 493-506.
- [41]Homayonifar P, Babaei R, Attar E, et al. Numerical modeling of splashing and air entrapment in high-pressure die casting[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2008, 39(3-4): 219-228.
- [42]任立新, 沈江南, 阙福标, 等. 基于数值模拟的锌合金压铸热流道技术研究[J]. 热加工工艺, 2014, 43(7): 61-64.
- [43]Wu S P, Li C Y, Guo J J, et al. Numerical simulation and experimental investigation of two filling methods in vertical centrifugal casting[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2006, 16(5): 1035-1040.
- [44]Han T S, Hwang W S. A prediction method for gas entrapment for mold filling simulation in casting[J]. Transactions of Japan Foundry Engineering Society, 1995, 14: 69-88.
- [45]Lee W B, Lu H Y. Modeling of air back pressure in die-casting dies[J]. Journal of Materials Processing Technology, 1999, 91(1): 264-269.
- [46]Attar E, Homayonifar P, Babaei R, et al. Modelling of air pressure effects in casting moulds[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2005, 13(6): 903.
- [47]Prindiville J, Lee S, Gokhale A. An application of trapped-air analysis to large complex high-pressure magnesium casting[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2001, 124: 677-692.
- [48]Zhao H D, Bai Y F, Ouyang X X, et al. Simulation of mold filling and prediction of

- gas entrapment on practical high pressure die castings[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2010, 20(11): 2064-2070.
- [49]Tavakoli R, Babaei R, Varahram N, et al. Numerical simulation of liquid/gas phase flow during mold filling[J]. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2006, 196(1): 697-713.
- [50]Chen L L, Beckermann C, Liu R X. Numerical simulation of complex multi-phase fluid of casting process and its applications[J]. China Foundry, 2006, 3(2): 83-86.
- [51]Hao J, Chen L L, Zhou J X. Application of Level Set Method to the Simulation of Liquid-Gas Two-Phase Flow during Mold Filling[J]. Materials Science Forum, 2008, 575: 43-48.
- [52]魏尊杰, 李天晓. 消失模铸造气隙尺寸及压力数值计算[J]. 哈尔滨工业大学学报, 1995, 27(4): 126-130.
- [53]陈亚娟. 消失模铸造充型过程数值模拟研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2005.
- [54]Liu X J, Bhavnani S H, Overfelt R A. Simulation of EPS foam decomposition in the lost foam casting process[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2007, 182(1): 333-342.
- [55]张倩. 灰铸铁件消失模铸造过程模拟研究[D]. 沈阳: 沈阳理工大学, 2012.
- [56]Lewis R W, Navti S E, Taylor C. A mixed Lagrangian-Eulerian approach to modelling fluid flow during mould filling[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1997, 25(8): 931-952.
- [57]Funck W, Theisel H, Seidel H P. Vector field based shape deformations[J]. ACM Transactions on Graphics (TOG), 2006, 25(3): 1118-1125.
- [58]Bridson R, Houriham J, Nordenstam M. Curl-noise for procedural fluid flow[J]. ACM Transactions on Graphics (TOG), 2007, 26(3): 46-48.
- [59]Brochu T, Bridson R. Robust topological operations for dynamic explicit surfaces[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2009, 31(4): 2472-2493.
- [60]Enright D, Fedkiw R, Ferziger J, et al. A hybrid particle level set method for improved interface capturing[J]. Journal of Computational physics, 2002, 183(1): 83-116.
- [61]Nichols B D, Hirt C W, Hotchkiss R S. SOLA-VOF: A solution algorithm for transient fluid flow with multiple free boundaries[R]. Los Alamos Scientific Lab.,

- USA, 1980.
- [62]郝静. 铸造充型过程气液两相流动数值模拟的研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2008.
- [63]Liu X D, Fedkiw R P, Kang M. A boundary condition capturing method for Poisson's equation on irregular domains[J]. *Journal of computational Physics*, 2000, 160(1): 151-178.
- [64]Kang M, Fedkiw R P, Liu X D. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2000, 15(3): 323-360.
- [65]Nguyen D Q, Fedkiw R P, Kang M. A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, 172(1): 71-98.
- [66]Sussman M, Ohta M. Improvements for calculating two-phase bubble and drop motion using an adaptive sharp interface method[J]. *Fluid Dynamics & Materials Processing*, 2007, 3(1): 21-36.
- [67]Sussman M, Smith K M, Hussaini M Y, et al. A sharp interface method for incompressible two-phase flows[J]. *Journal of computational physics*, 2007, 221(2): 469-505.
- [68]Bourlioux A. A coupled level-set volume-of-fluid algorithm for tracking material interfaces[C]. *The 6th international symposium on computational fluid dynamics, Lake Tahoe, USA*, 1995.
- [69]Enright D, Losasso F, Fedkiw R. A fast and accurate semi-Lagrangian particle level set method[J]. *Computers & structures*, 2005, 83(6): 479-490.
- [70]Pang S Y, Chen L L, Zhang M Y, et al. Numerical simulation two phase flows of casting filling process using SOLA particle level set method[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2010, 34(12): 4106-4122.
- [71]金珠梅, 赫冀成. 双辊连续铸轧工艺中流场, 温度场和热应力场的数值计算[J]. *金属学报*, 2000, 36(4): 391-394.
- [72]Wang C, Hu H, Luo J. Computer Simulation of Investment Casting based on Procast Software[J]. *Foundry Technology*, 2007, 28(10): 1360-1365.

- [73] Yoshizawa A, Nisizima S. A nonequilibrium representation of the turbulent viscosity based on a two-scale turbulence theory[J]. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1993, 5(12): 3302-3304.
- [74] Arnberg L, Bäckerud L, Chai G. Solidification Characteristics of Aluminum Alloys: Dendrite Coherency[M]. Schaumburg: American Foundrymen's Society, 1996.
- [75] Frehse J, Málek J, Steinhauer M. On analysis of steady flows of fluids with shear-dependent viscosity based on the Lipschitz truncation method[J]. *SIAM journal on mathematical analysis*, 2003, 34(5): 1064-1083.
- [76] Neuman S P. Theoretical derivation of Darcy's law[J]. *Acta Mechanica*, 1977, 25(3-4): 153-170.
- [77] Carman P C. Fluid flow through granular beds[J]. *Transactions-Institution of Chemical Engineeres*, 1937, 15: 150-166.
- [78] Whitaker S. Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy's law[J]. *Transport in porous media*, 1986, 1(1): 3-25.
- [79] Voller V R, Prakash C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1987, 30(8): 1709-1719.
- [80] Jana S, Kättlitz O, Hediger F, et al. Predictions of misruns using three-phase coupled mold-filling and solidification simulations in low pressure turbine (LPT) blades[C]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2012.
- [81] Sente Software Ltd.. JMatPro[EB/OL]. <http://www.sentessoftware.co.uk/>,2017-07-06/2017-10-22.
- [82] BIOVIA. Material Studio[EB/OL]. <http://accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [83] Thermo-Calc Software. Thermo-Calc[EB/OL]. <http://www.thermocalc.com/>,2017-07-06/2017-10-22.
- [84] Wikipedia. Energy Dispersive Spectrometer[EB/OL]. https://en.wikipedia.org/wiki/Energy-dispersive_X-ray_spectroscopy, 2017-07-06/2017-10-22.
- [85] Wikipedia. Differential Thermal Analysis[EB/OL]. https://en.wikipedia.org/wiki/Differential_thermal_analysis, 2017-07-06/2017-10-22.

- [86] 邵珩, 李岩, 南海, 等. 熔模铸造条件下 Ti6Al4V 合金铸件与陶瓷型壳间界面换热系数研究[J]. 金属学报, 2015, 51(8): 976-984.
- [87] 曹永友, 熊守美, 郭志鹏. 压铸压室内界面传热反算模型的建立和应用[J]. 金属学报, 2015, 51(6): 745-752.
- [88] Wang X, Zhao Y, Su D, et al. Simulation of Mold Filling and Temperature Field of Mold in Metal Mold Gravity Casting by ProCAST[J]. Foundry, 2008, 57(12): 1263-1266.
- [89] Zhao H, Ohnaka I, Zhu J. Modeling of mold filling of Al gravity casting and validation with X-ray in-situ observation[J]. Applied Mathematical Modelling, 2008, 32(2): 185-194.
- [90] Jin C K, Kang C G. Fabrication process analysis and experimental verification for aluminum bipolar plates in fuel cells by vacuum die-casting[J]. Journal of Power Sources, 2011, 196(20): 8241-8249.
- [91] Dørum C, Laukli H I, Hopperstad O S. Through-process numerical simulations of the structural behaviour of Al-Si die-castings[J]. Computational Materials Science, 2009, 46(1): 100-111.
- [92] Wang H, Djambazov G, Pericleous K A, et al. Modelling the dynamics of the tilt-casting process and the effect of the mould design on the casting quality[J]. Computers & Fluids, 2011, 42(1): 92-101.
- [93] Wang H, Djambazov G, Pericleous K, et al. Numerical modelling of tilt casting process for γ -TiAl alloys[J]. International Journal of Cast Metals Research, 2012, 25(2): 65-74.
- [94] Lu S L, Xiao F R, Zhang S J, et al. Simulation study on the centrifugal casting wet-type cylinder liner based on ProCAST[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 73(1): 512-521.
- [95] 黄粒, 杜旭初, 罗传彪, 等. ZL114A 铝合金油路壳体低压铸造工艺研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2016, 36(8): 826-829.
- [96] 闫学伟, 唐宁, 刘孝福, 等. 镍基高温合金铸件液态金属冷却定向凝固建模仿真及工艺规律研究[J]. 金属学报, 2015, 51(10): 1288-1296.
- [97] 唐宁, 王艳丽, 许庆彦, 等. 宽弦航空叶片 Bridgeman 定向凝固组织数值模拟[J].

- 金属学报, 2015, 51(4): 499-512.
- [98] Luo H, Spiegel S, Löhner R. Hybrid grid generation method for complex geometries[J]. AIAA journal, 2010, 48(11): 2639-2644.
- [99] Grozdanić V. Finite-difference methods for simulating the solidification of castings[J]. Materials and technology, 2009, 43(5): 233-237.
- [100] Chen T, Liao D M, Zhou J X. Numerical simulation of casting thermal stress and deformation based on finite difference method[J]. Materials Science Forum, 2013, 762: 224-229.
- [101] Li C, Thomas B G. Thermomechanical finite-element model of shell behavior in continuous casting of steel[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2004, 35(6): 1151-1172.
- [102] Solidity. Solidity[EB/OL]. <http://solidityproject.com/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [103] Versteeg H K, Malalasekera W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method[M]. New York: Pearson Education, 2007.
- [104] OpenFVM. OpenFVM[EB/OL]. <http://openfvm.sourceforge.net/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [105] OpenFOAM. OpenFOAM[EB/OL]. <https://openfoam.org/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [106] Liu M B, Liu G R. Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments[J]. Archives of computational methods in engineering, 2010, 17(1): 25-76.
- [107] GPUSPH. GPUSPH[EB/OL]. <http://www.gpusph.org/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [108] DualSPHysics. DualSPHysics[EB/OL]. <http://www.dual.sphysics.org/>, 2017-07-06/2017-10-22.
- [109] 高歌. 计算流体力学: 典型算法与算例[M]. 机械工业出版社, 2015.
- [110] Jadhav B, Jadhav S J. Investigation and analysis of cold shut casting defect and defect reduction by using 7 quality control tools[J]. International Journal of Advanced Engineering Research and Studies, 2013, 2(4): 28-30.
- [111] Xiao L, Anzai K, Niyama E, et al. Reducing “cold shut” defects in the “H” Process aided by computer simulation[J]. International Journal of Cast Metals Research, 1998, 11(2): 71-81.

- [112] Lee J H, Won C W, Cho S S, et al. Effects of melt flow and temperature on the macro and microstructure of scroll compressor in direct squeeze casting[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2000, 281(1): 8-16.
- [113] Vazquez V, Juarez-Hernandez A, Mascarenas A, et al. Cold shut formation analysis on a free lead yellow brass tap[J]. *Engineering Failure Analysis*, 2010, 17(6): 1285-1289.
- [114] 秦永健, 孙国雄. 冷隔缺陷预测判据[J]. *上海金属*, 1997, 19(5): 23-27.
- [115] Samuel A M, Liu L, Samuel F H, et al. Influence of oxides on porosity formation in Sr-treated Al-Si casting alloys[J]. *Journal of materials science*, 2003, 38(6): 1255-1267.
- [116] Liu S G, Cao F Y, Zhao X Y, et al. Characteristics of mold filling and entrainment of oxide film in low pressure casting of A356 alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2015, 626: 159-164.
- [117] Kwon Y D, Lee Z H. The effect of grain refining and oxide inclusion on the fluidity of Al-4.5 Cu-0.6 Mn and A356 alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2003, 360(1): 372-376.
- [118] Cao X, Campbell J. Oxide inclusion defects in Al-Si-Mg cast alloys[J]. *Canadian metallurgical quarterly*, 2005, 44(4): 435-448.
- [119] Lin J, Sharif M. Numerical simulation of the movement, breakup and entrapment of oxide films during aluminum casting[J]. *Aluminum transactions*, 1999, 1(1): 71-78.
- [120] Zhao H, Ohnaka I, Sako Y, et al. Estimation of porosity defects with consideration of oxide entrapment[C]. *Proceedings of the 65th World Foundry Congress*. 2002.
- [121] Sun W. Modeling, model verification, and defect formation in ductile iron castings[C]. *Ductile iron society 2003 Millis symposium*. 2003.
- [122] Campbell J. The modeling of entrainment defects during casting[J]. *Simulation of Aluminum Shape Casting Processing: From Alloy Design to Mechanical Properties*, 2006, 10(2): 123-132.
- [123] Lai N W, Griffiths W D, Campbell J. Modelling of the potential for oxide film entrainment in light metal alloy castings[J]. *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, 2003, 10(2): 415-422.

- [124] Campbell J, Runyoro J, Boutorabi S M A. Critical gate velocities for film-forming casting alloys: a basis for process specification[J]. AFS Transactions, 1992, 100: 225-234.
- [125] Barkhudarov M R, Hirt C W. Tracking defects[J]. Die Casting Engineer, 1991, 43(1): 44-52.
- [126] Dai X, Yang X, Campbell J, et al. Effects of runner system design on the mechanical strength of Al-7Si-Mg alloy castings[J]. Materials Science and Engineering: A, 2003, 354(1): 315-325.
- [127] 赵海东. 铝合金铸件充型过程及氧化膜卷入的数值模拟[J]. 中国有色金属学报, 2005, 15(8): 1200-1207.
- [128] Backer G, Kim C W, Siersma K, et al. Computational analysis of oxide Inclusions in aluminum castings[J]. Simulation of Aluminum Shape Casting Processing: From Alloy Design to Mechanical Properties, 2006, 10(2): 165-175.
- [129] Dai X, Yang X, Campbell J, et al. Influence of oxide film defects generated in filling on mechanical strength of aluminium alloy castings[J]. Materials science and technology, 2004, 20(4): 505-513.
- [130] Yang X, Huang X, Dai X, et al. Numerical modelling of entrainment of oxide film defects in filling of aluminium alloy castings[J]. International Journal of Cast Metals Research, 2004, 17(6): 321-331.
- [131] 徐玉桥, 于梅. 金属液充型过程中夹杂物运动的数值模拟[J]. 沈阳工业大学学报, 2007, 29(4): 392-395.
- [132] Reilly C, Green N R, Jolly M R, et al. The modelling of oxide film entrainment in casting systems using computational modelling[J]. Applied Mathematical Modelling, 2013, 37(18): 8451-8466.
- [133] 吴树森, 柳玉起. 材料成形原理[M]. 第2版, 北京: 机械工业出版社, 2008.
- [134] Flow-3D. Flow-3D cast theory [EB/OL]. <https://www.flow3d.com/products/flow-3d-cast/>, 2017-06-26/2017-10-26.
- [135] Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. Journal of computational physics, 1981, 39(1): 201-225.
- [136] Meier M, Yadigaroglu G, Smith B L. A novel technique for including surface tension

- in PLIC-VOF methods[J]. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 2002, 21(1): 61-73.
- [137] Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations[J]. *International Journal for numerical methods in fluids*, 1998, 28(2): 357-378.
- [138] Wikipedia. Young-Laplace Equation[EB/OL]. https://en.wikipedia.org/wiki/Young-Laplace_equation, 2017-06-26/2017-10-19.
- [139] Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension[J]. *Journal of computational physics*, 1992, 100(2): 335-354.
- [140] 曹流. 基于有限元法的定向凝固过程温度场数值模拟的研究[D]. 华中科技大学, 2015.
- [141] Mathur S R, Murthy J Y. Pressure boundary conditions for incompressible flow using unstructured meshes[J]. *Numerical Heat Transfer*, 1997, 32(3): 283-298.
- [142] ANSYS. ANSYS Fluent[EB/OL]. <http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>, 2017-07-06/2017-10-30.
- [143] ANSYS. ANSYS CFX[EB/OL]. <http://www.ansys.com/zh-cn/products/fluids/ansys-cfx>, 2017-07-06/2017-10-30.
- [144] Patankar S V, Spalding D B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows[J]. *International journal of heat and mass transfer*, 1972, 15(10): 1787-1806.
- [145] Park T S. Effects of Time-Integration Method in a Large-Eddy Simulation Using the PISO Algorithm: Part I—Flow Field[J]. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2006, 50(3): 229-245.
- [146] Rodrigues M A, Padrela L, Geraldés V, et al. Theophylline polymorphs by atomization of supercritical antisolvent induced suspensions[J]. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2011, 58(2): 303-312.
- [147] Christopher J G. OpenFOAM User Guide version 4.0[M]. OpenFOAM Foundation Ltd., 2016.
- [148] 许蕾, 罗会信. 基于 ANSYS ICEM CFD 和 CFX 数值仿真技术[J]. *机械工程师*, 2008, 12: 65-66.

- [149] Henderson A, Ahrens J, Law C. The ParaView Guide[M]. New York: Kitware, 2004.
- [150] Sirrell B, Holliday M, Campbell J. The benchmark test 1995[C]. 7th Conference on Modeling of Casting Welding and Solidification, UK: London, 1995.
- [151] 王荣, 王维昌. 铸件浇不足和冷隔缺陷的成因及防止措施[J]. 金属加工, 2008, 17: 60-62.
- [152] Korbuly B, Pusztai T, Tóth G I, et al. Orientation-field models for polycrystalline solidification: Grain coarsening and complex growth forms[J]. Journal of Crystal Growth, 2017, 457: 32-37.
- [153] Ball G J, Howell B P, Leighton T G, et al. Shock-induced collapse of a cylindrical air cavity in water: a free-Lagrange simulation[J]. Shock Waves, 2000, 10(4): 265-276.
- [154] 盛志云. 铝硅合金铸件的收缩缺陷和氧化夹渣问题[J]. 中国造船, 1966, 1: 72-83.
- [155] 彭亿培. 防止氧化夹渣在有色合金铸件中的形成[J]. 特种铸造及有色合金, 1998, 3: 60-60.
- [156] Kassem H I, Saqr K M, Aly H S, et al. Implementation of the eddy dissipation model of turbulent non-premixed combustion in OpenFOAM[J]. International Communications in Heat & Mass Transfer, 2011, 38(3): 363-367.
- [157] 殷亚军, 袁梓豪, 周建新, 等. 铸造过程中型芯发气的数值模拟研究[C]. 2013 中国铸造活动周, 2013.
- [158] Laidler K J. The development of the Arrhenius equation[J]. Journal of Chemical Education, 1984, 61(6): 494-498.

附录I 攻读博士学位期间的学术成果

(1) 学术论文

- [1] **Liu Cao**, Fei Sun, Tao Chen, Yulong Tang, Dunming Liao. Quantitative prediction of oxide inclusion defects inside the casting and on the walls during cast-filling processes[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 119: 614-623. (已见刊, **SCI, T2类, 第一作者**)
- [2] **Liu Cao**, Dunming Liao, Yuzhang Lu, Tao Chen. Heat transfer model of directional solidification by LMC process for superalloy casting based on finite element method[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2016, 47(9): 4640-4647. (已见刊, **SCI, A类, 第一作者**)
- [3] **Liu Cao**, Dunming Liao, Fei Sun, Tao Chen, Zihao Teng, Yulong Tang. Prediction of gas entrapment defects during zinc alloy high-pressure die casting based on gas-liquid multiphase flow model[J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2018, 94(1): 807-815. (已见刊, **SCI, B类, 第一作者**)
- [4] **Cao Liu**, Liao Dunming, Sun Fei, Chen Tao. Numerical simulation of cold shut defect during casting filling process[J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2018, 10.1007/s00170-018-2012-z. (**SCI, B类, 第一作者**)
- [5] **曹流**, 孙飞, 陈涛, 滕子浩, 唐玉龙, 廖敦明. 铸造充型过程中液固转变影响流动行为的数值计算[J]. 金属学报, 2017, 53(11): 1521-1531. (已见刊, **SCI, B类, 第一作者**)
- [6] 廖敦明, **曹流**, 孙飞, 陈涛. 铸造宏观过程数值模拟技术的研究现状与展望[J]. 金属学报, 2018, 54(2): 161-173. (已见刊, **SCI, B类, 导师第一作者, 本人第二作者**)
- [7] Dunming Liao, **Liu Cao**, Tao Chen, Fei Sun, Yongzhen Jia, Zihao Teng, Yulong Tang. Radiation heat transfer model for complex superalloy turbine blade in directional solidification process based on finite element method[J]. China Foundry, 2016, 13(2): 123-132. (已见刊, **SCI, C类, 导师第一作者, 本人第二作者**)

- [8] 曹流, 廖敦明, 周聪, 陈涛, 庞盛永, 周建新. 基于有限元法的多材质铸造温度场模拟软件开发[J]. 特种铸造及有色合金, 2015, 35(11): 1163-1166. (已见刊, 中文核心, 第一作者)
- [9] 曹流, 廖敦明, 胡柏乐, 孙飞. 铸造充型过程中浇不足缺陷的数值计算研究[J]. 铸造, 2018. (已收录, 中文核心, 第一作者)

(2) 发明专利

- [1] 廖敦明, 曹流, 孙飞, 吴棣, 胡柏乐. 一种适用于铸造充型过程冷隔缺陷的预测方法: 中国, 201810061643.5[P]. 2018-01-23. (已受理, 导师第一, 本人第二)
- [2] 廖敦明, 曹流, 孙飞, 吴棣, 胡柏乐. 一种铸造充型过程中氧化夹渣运动的追踪方法: 中国, 201810062052.X[P]. 2018-01-23. (已受理, 导师第一, 本人第二)
- [3] 廖敦明, 曹流, 陈涛, 孙飞, 吴棣, 胡柏乐. 一种适用于凝固过程中辐射换热的计算方法: 中国, 201810146329.7[P]. 2018-02-12. (已受理, 导师第一, 本人第二)

(3) 会议论文

- [1] Liu Cao, Dunming Liao, Fei Sun, Tao Chen, Zihao Teng, Yulong Tang. Prediction of air entrapment defect during zinc alloy high pressure die casting based on gas-liquid multiphase flow model[C]. 7th International Conference on Mechanics and Materials in Design, Albufeira, Portugal, 2017.
- [2] 曹流, 廖敦明, 胡柏乐, 张影, 孙飞, 陈涛. 铸造充型过程中浇不足缺陷的数值计算研究[C]. 2017 中国铸造活动周, 江苏苏州, 2017.
- [3] 曹流, 廖敦明, 陈涛, 孙飞, 周建新, 庞盛永. 基于有限元法的复杂高温合金叶片定向凝固过程辐射换热模型[C]. 2015 中国铸造活动周, 湖南长沙, 2015.