DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2020.10.008

MAC 方法及其在铸造充型模拟中的应用

黄伟明[1],唐玉龙[2],宁林祥[3],吴　棣[2],廖敦明[2]

(1. 浙江嘉善北方机械制造有限公司,浙江 嘉兴 314100; 2. 华中科技大学 材料科学与工程学院 材料成形与模具技术国家重点实验室,湖北 武汉 430074; 3. 浙江欧冶达机械制造股份有限公司,浙江 湖州 314200)

摘　要:介绍了一种基于 MAC 的半拉格朗日方法,用于模拟铸造充型过程中的金属流动。结合拉格朗日和欧拉两种方法的优点,将流体视为具有某些物理性质的大量粒子的集合,绕过了纯欧拉角度下的复杂自由界面跟踪问题。对于流体内部,采用投影法求解不可压缩 N-S 方程。通过将粒子携带的信息映射到网格上,在背景网格上求解扩散方程,避免了拉格朗日方法中场描述的不便。引入水平集方法描述边界。对比计算分析了该方法和广泛应用的 VOF 方法的两个实例。结果表明,该方法能产生尖锐、不连续的流体界面,更接近铸造过程,尤其适合于充型速度快的铸造过程。

关键词:MAC 方法;半拉格朗日方法;铸造充型过程;流动模拟

中图分类号:TG244　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1000-8365(2020)10-0930-05

Application of the MAC Method in Casting Filling Simulation

HUANG Weiming[1], TANG Yulong[2], NING Linxiang[3], WU Di[2], LIAO Dunming[2]

(1.Zhejiang Beifang Machinery Manufacturing Co., Ltd., Jiaxing 314100, China; 2.State Key Laboratory of Materials Processing and Die & Mould Technology, School of Materials Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China; 3. Zhejiang Ouyeda Machinery Manufacturing Co., Ltd., Huzhou 314200, China)

Abstract: Marker-and-cell based semi-Lagrangian method, which combines the advantages of Lagrangian and Eulerian perspective, is introduced to simulate the metal flow during casting filling process. This method treats fluid in terms of a vast collection of particles with some physical properties that move around, naturally bypass the unique complex free interface tracking problem in Eulerian perspective. For the interior of the fluid, the efficient Projection method is used to solve the incompressible Navier-Stokes equations. On the other hand, the diffusion equation is solved on the background grid by mapping the information carried by the particles to the grid, thus avoiding the inconvenience of field description in Lagrangian perspective. And the level set method is introduced to describe boundary. In order to study the application of this method in the casting field, two examples are given with this method and the widely used VOF method. The results show that this method can produce sharp and discontinuous fluid interfaces, which is closer to the casting process with high filling speed.

Key words: marker-and-cell; semi-Lagrangian method; casting filling process; fluid simulation

在铸造领域,计算流体力学主要用于模拟金属液的流动过程,分析充型过程中可能出现的缺陷,如冷隔[1]和氧化夹渣[2]。金属液的流动前沿对填充缺陷的分析起着非常重要的作用。在铸造模拟中主流的自由曲面跟踪方法使用固定网格,如 VOF (Volume of Fluid)[3]、水平集 (Level Set)[4]和 CLSVOF (Coupled Level Set and Volume-of-Fluid)[5]方法等。在纯欧拉的角度看,这种方法使用连续函数来表示自由表面。一般地,使用这些方法的主要困难在于难以保持清晰的边界[6]。在每步分别使用边界拟合网格的方法[7-9]可能提供最高的精度,但由于其复杂性,很少在铸造模拟中使用。

另一类方法是基于粒子的"无网格"方法,例如 MPS (Moving Particles Semi-implicit) [10], SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics)[11],DPD (Dissipative Particle Dynamics)[12,13]。无网格使得拉格朗日模拟成为可能,在这种模拟中,粒子可以根据自己的状态移动。然而,在计算粒子的力时,我们必须找到相邻粒子的位置。为了避免成为 N 体问题,需要采用一些复杂的数据结构,如多重网格技术。此外,铸件的几何形状通常非常复杂,需要许多粒子,该方法计算效率相对较低,很难应用于铸造模拟。

MAC (Marker and Cell)方法[14]是介于固定网格

收稿日期:2020-10-05

作者简介:黄伟明(1971-),浙江嘉善人,总经理.主要从事铸造企业管理、铸造新工艺及新材料应用研究、铸造新装备创新应用.电话:13506837666,E-mail:info@jsbfjx.com

通讯作者:宁林祥(1965-),浙江湖州人,总经理.主要从事铸造企业管理、铸造工艺及材料研究.电话:13906726593,E-mail:ninglinxiang@ouyeda.com.cn

和无网格方法之间的半拉格朗日方法，它使用固定网格来描述流体的内部，并使用标记粒子来指示流体的形态。该方法不仅具有固定网格求解 N-S (Navier-Stokes)方程的优点，而且在流动前沿计算方面具有无网格方法的优点。然而，尽管它在计算流体力学领域非常流行，但很少用于铸造流动模拟。

本文采用结合水平集的 MAC 方法描述复杂边界，对铸造充型过程进行了数值模拟。通过计算实例，讨论了该方法在铸造充型过程模拟中的潜在应用性和局限性。

1　模拟方法

1.1　主要计算理论

粘性不可压缩流体的控制方程是连续性方程和 N-S 方程，如下所示[15]：

$$\nabla\cdot\vec{u}=0 \tag{1}$$

$$\frac{d\vec{u}}{dt}=-\nabla\varphi+\nu\Delta\vec{u}+\vec{f} \tag{2}$$

式中，$\vec{u}$是速度，t 是时间，$\varphi=P/\rho$ 是压力与密度之比，是粘度，符号 Δ 代表拉普拉斯算子，$\vec{f}$是体积力，通过有效的投影过程[16]，可以得到压力的泊松方程：

$$\Delta\varphi^{n+1}=\frac{\nabla\cdot\vec{u}^*}{\delta t} \tag{3}$$

$$\vec{u}^*=\vec{u}^n+\delta t(\nu\Delta\vec{u}^n+\vec{f}^n-\vec{u}^n\cdot\nabla\vec{u}^n) \tag{4}$$

上标“n”和“n+1”表示循环次数，例如是第“n+1”次循环的压力值。计算式(3)，将压力代入式(2)，得到第“n+1”次循环的速度场：

$$\vec{u}^{n+1}=\vec{u}^*-\delta t\cdot\nabla\varphi^{n+1} \tag{5}$$

整个计算过程基于 Harlow[14]提出的经典 MAC 方法，对于一个计算周期，有以下 6 个步骤。

(1)计算压力：基于速度场和流体水平集场求解压力泊松方程。

(2)更新速度：将新的压力场替换回 N-S 方程来更新速度场。

(3)对流：标记粒子根据其附近的速度分量进行移动，温度由背景单元插值而来，当粒子穿过单元边界时需进行调整。

(4)跟踪自由表面：根据标记粒子的位置更新流体水平集值。

(5)计算温度：将粒子温度映射到单元中，并根据热扩散交换单元温度。

(6)重新分配粒子：检查颗粒分布情况，必要时重新分配颗粒，或根据入口边界条件将新颗粒放入入口区域。

本计算中引入的标记粒子仅用于指示流体形态，更具体地说，有助于计算流体水平集的值。通过流体水平集的计算，可以更精确地描述液体的自由表面。

1.2　自由曲面的拉格朗日插值

当自由面不通过单元中心时，式(3)中的压力二阶导数应慎重考虑，传统的均匀网格差分方法不够精确。此处做简要说明，参见图 1。设 Φ 为水平集值，自由面 Φ=0 在点 x_{k-1} 和点 x_k 之间通过，施加的压力为 φ_a。x_{k-1} 位于流体之外，由于不连续性，它不能用于确定 k 点 φ 的梯度。代替地，我们使用 x_a、x_k 和 x_{k+1} 构造二阶拉格朗日插值：

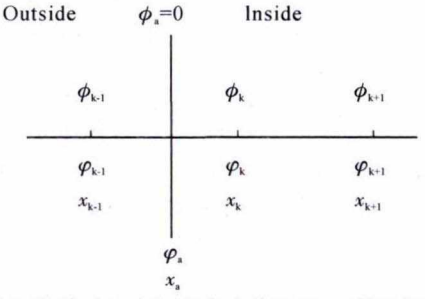


图 1 在单元中心间的自由表面的一维示意图

Fig.1 One-dimensional schematic for free surface passes between cell centers

$$\varphi(x)=\frac{(x-x_k)(x-x_{k+1})}{(x_a-x_k)(x_a-x_{k+1})}\varphi_a+\frac{(x-x_a)(x-x_{k+1})}{(x_k-x_a)(x_k-x_{k+1})}\varphi_k+\frac{(x-x_a)(x-x_k)}{(x_{k+1}-x_a)(x_{k+1}-x_k)}\varphi_{k+1} \tag{6}$$

取它关于 x 的二阶导数：

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=\frac{2}{(x_a-x_k)(x_a-x_{k+1})}\varphi_a+\frac{2}{(x_k-x_a)(x_k-x_{k+1})}\varphi_k+\frac{2}{(x_{k+1}-x_a)(x_{k+1}-x_k)}\varphi_{k+1} \tag{7}$$

在式(7)的右侧，只需确定 x_a 的值，可通过其相邻单元中心的水平集值来估计：

$$x_a=\frac{x_{k-1}\Phi_k-x_k\Phi_{k-1}}{\Phi_k-\Phi_{k-1}} \tag{8}$$

式(7)和式(8)的拉格朗日插值可以很容易地扩展到二维或三维情况，二维情况的自由表面边界构建示意图如图 2 所示。

1.3　墙的水平集

铸件的几何结构通常非常复杂，包括许多斜面和复杂曲面，它们不能用简单的均匀网格合理地表示。例如，如图 3 所示，一个倾斜的墙阻挡了一个下落的粒子并使其向右偏转。如果使用简单的均匀网格，因为没有定义斜壁，粒子将被反射回来，而不是向右。要处理此问题，可以为实体墙保留一个水平集场 Φ_s，其定义在单元角点而不是单元中心。Φ_s 通常是划分网格时计算出的到墙的有符号距离场。在第

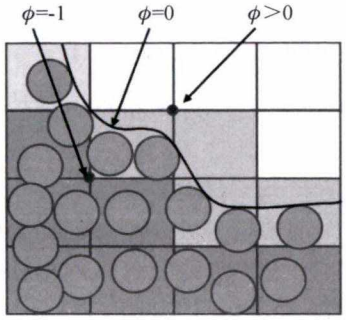


图 2 二维情况的自由表面边界构建

Fig.2 Free surface boundary construction in two dimensional case

(3)步骤对流中,每当一个粒子运行到一个新的位置 $\vec{x}^*$ 时,都要计算其水平集值 $\Phi_s(\vec{x}^*)$。如果该值为负,表明粒子在实体内部,则应执行反射操作:

$$\vec{x}^{n+1}=\vec{x}^*-(1+\alpha)\Phi_s(\vec{x}^*)\cdot\frac{\nabla\Phi_s(\vec{x}^*)}{|\nabla\Phi_s(\vec{x}^*)|} \tag{9}$$

式中,碰撞系数 α 应在 0 和 1 之间。当 α=1 时表示完全弹性碰撞,当 α<1 时表示在墙面法向使用非弹性碰撞。

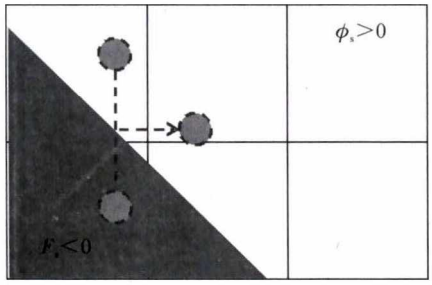


图 3 使用水平集斜墙(墙内为负,墙外为正)

Fig.3 Using level set to define oblique wall. The value inside the wall is negative while positive outside the wall

2 示例和应用

2.1 水柱坍塌

水柱坍塌的几何形状如图 4 所示,这种几何引用了 Koshizuka[10]的文章,因为文中进行了一项实验[17],在实验中,一块可移动的板支撑初始水柱,然后在 0.05 s 内被拉起并开始坍塌。本文分别采用基于 MAC 的半拉格朗日方法和 VOF 方法计算了水柱的坍塌过程,相关计算参数如表 1 所示,计算中忽略了板的拉伸过程。需要注意两种方法的离散过程和网格分辨率是相同的。

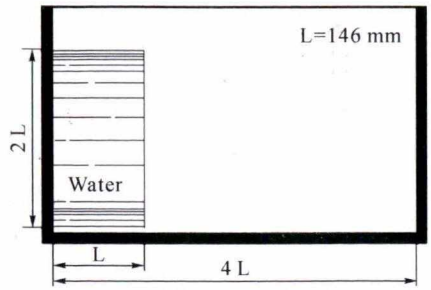


图 4 水柱坍塌的几何结构

Fig.4 Geometry of collapse of a water column

表 1 水柱坍塌的计算参数

Tab.1 Calculation parameters of collapse of a water column

参数	值
水平方向网格数	292
竖直方向网格数	146
每个单元粒子数	4
粒子半径	1.732 δx
粒子碰撞系数	α=0
柯朗条件	$u\max\delta t/\delta x\leqslant 0.5$
最大时间步长	$\delta t\leqslant 10^{-3}$ s

结果如图 5 所示,为了与 VOF 方法进行更好的比较,MAC 方法的后处理中流体用单元显示而不是用粒子。由图中可知,在崩溃开始时,两种方法都有相似的结果。在 t=0.24 s 时,两种计算结果略有不同。基于 MAC 的方法计算的流体流动速度比基于 VOF 的方法稍快。用 VOF 法计算的流体具有较大的粘度。当 t=0.50 s 时,两种方法计算的流体界面差别很大。从基于 MAC 的方法中,我们可以看到水撞击墙壁并破碎成碎片,形成非常尖锐和不连续的界面。基于 VOF 方法得到的水界面光滑连续,与实验结果相比不太真实。

2.2 复杂铸件的填充

通过对实际铸铁件熔模铸造的充型过程计算,研究了该方法的应用。仿真结果与 VOF 程序计算结果进行了比较。图 6(a)中显示了熔模铸造系统的几何模型,系统外形尺寸为 200 mm×100 mm× 500 mm。该铸造系统共有 4 个主浇道,每个浇道有 8 个铸件均匀分布。网格大小为 2 mm,在求解域上共有 125 万个单元。为了提高效率,每个单元只放置 6 个粒子。表 2 是该计算中的相关参数。

表2 熔模铸造的计算参数

Tab.2 Parameters needed for the iron casting

参数	值
金属液密度 /(kg/m³)	6 800
金属液动力粘度 / Pa·s	4.98e-3
金属液比热 / (kJ/(kg·K))	0.82
液相线温度 /℃	1 500
固相线温度 /℃	1 429
潜热 /(kJ/kg)	250
重力加速度 /(m/s²)	(0, 0, -9.8)
浇注温度 /℃	1 700
浇注速度 / (m/s)	0.15

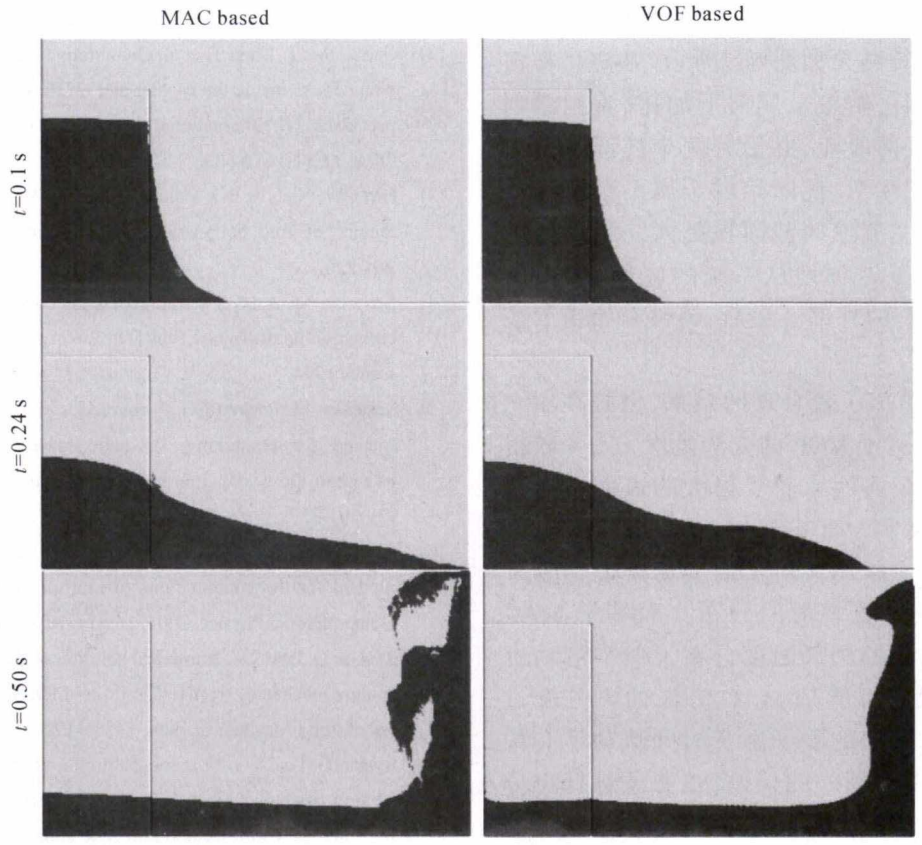


图 5 基于 MAC 方法和 VOF 方法的水柱坍塌计算结果

Fig.5 Collapse of a water column calculated with MAC based method and VOF based method

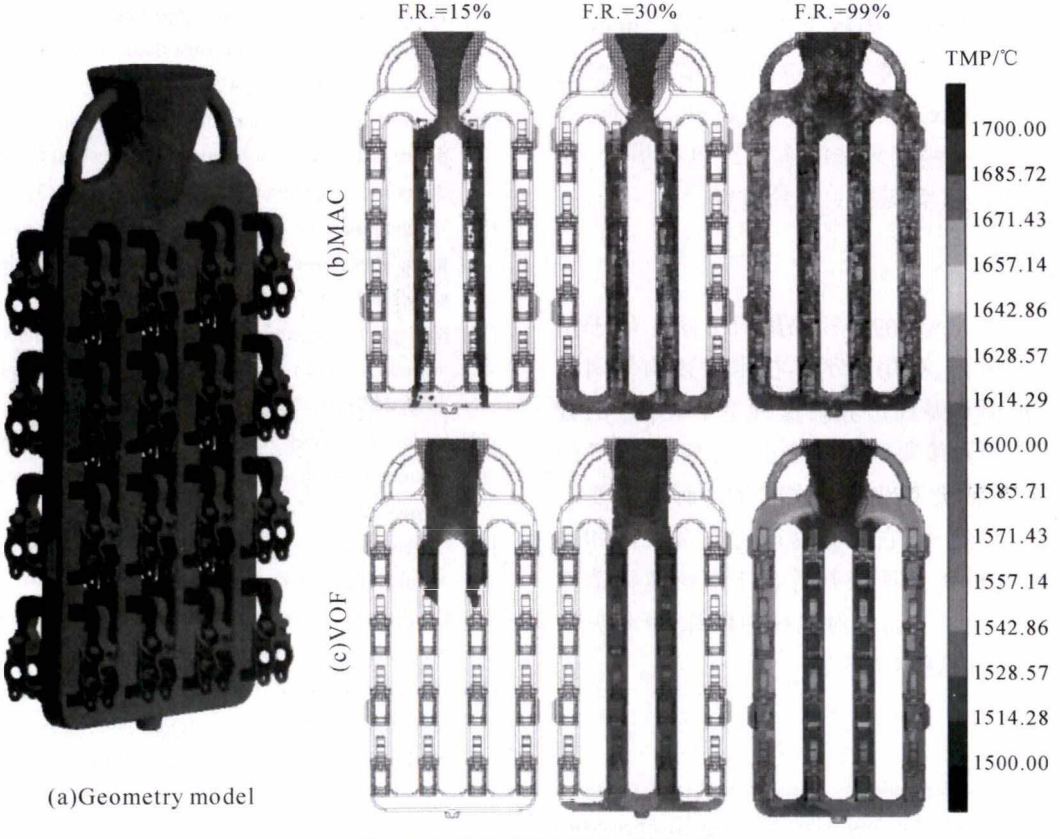


图 6 复杂铸件充型过程的模拟结果

Fig.6 Simulation result of a complex casting filling process

基于 MAC 方法的计算结果如图 6(b)所示，基于 VOF 方法的计算结果如图 6(c)所示。从浇口杯顶部流入铸造系统后，熔融金属向下加速，直到碰到壁面，然后分流成两股流，并沿着两个内部主流道继续向下加速。请注意，此时熔融金属不会填充横浇道，因为内部主流道的截面积更大。当这两条液流在压力作用下对称地从系统的底部流出时，它们就进入了系统的外部。最后，铸件开始由下往上填充。

两种方法都给出了较合理的结果，但是在填充过程的早期阶段，基于 VOF 的方法呈现了一个较粗的液流，就好像金属液承受了很大的表面张力一样，这并不是很真实。而基于 MAC 的方法提供了一个更合理的液流状态。对于温度场来说，基于 VOF 的方法呈现了更平滑的分布，而基于 MAC 的方法呈现了复杂的局部温度分布，似乎流动更加湍流。这种现象可能是 MAC 方法的再分配过程引起的。MAC方法的粒子在长时间流动后有聚集的趋势，即使引入额外的误差，也必须进行再分配过程。

使用 Intel Core i7-6700HQ CPU 和 8.0GB RAM，通过基于 MAC 的方法完成此模拟需要 125 min，RAM 平均占用 582MB，而基于 VOF 的方法只需 98 min，RAM 平均仅占用 198MB。也就是说，跟踪粒子不仅需要更多的空间，还需要更多的时间，这是基于 MAC 的方法的一个缺点。然而，借助颗粒的跟踪，一些更复杂的东西可以被描述，如氧化夹渣和冲砂，这需要进一步的研究。

3 结论

介绍了基于 MAC 的半拉格朗日方法，用于模拟铸造的充型过程，利用水平集技术描述均匀网格中复杂的自由面和壁面边界。这种基于 MAC 的方法通过标记粒子直接跟踪流体表面，与基于 VOF 的方法相比，不仅需要更多的存储空间，而且需要更多的计算时间。然而，它很容易产生非常尖锐和不连续的界面，这种优势使得其适合于高流速铸造充型过程的模拟。此外，通过对颗粒的跟踪，氧化夹渣和冲砂等难题变得更容易描述。

参考文献：

[1] 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.

[2] Cao L, Sun F, Chen T, et al. 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(1): 614-623.

[3] Hirt CW, Nichols BD. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries [J]. Comput. Phys., 1981; 39 (1): 201-225.

[4] Sussman M. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow [D]. Los Angeles: University of California, 1994.

[5] Sussman, M, Puckett EG. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows [J]. Journal of computational physics, 2000, 162 (2): 301-337.

[6] Tryggvason G, Bunner B, Esmaeeli, A, et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow [J]. Journal of Computational Physics, 2001, 169(2): 708-759.

[7] Ryskin, G, Leal LG. Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 1. The finite-difference technique[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1984, 148: 1-17.

[8] Ryskin G, Leal LG. Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 2. Buoyancy-driven motion of a gas bubble through a quiescent liquid [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1984, 148: 19-35.

[9] Takagi S. Three-dimensional deformation of a rising bubble. In Proc. German-Japanese Symp. on Multi-Phase Flow, 1994, 499.

[10] Koshizuka S, Oka Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid [J]. Nuclear science and engineering, 1996, 123(3): 421-434.

[11] Gingold RA, Monaghan JJ. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars[J]. Monthly notices of the royal astronomical society, 1977, 181(3): 375-389.

[12] Hoogerbrugge PJ, Koelman J. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics[J]. EPL (Europhysics Letters), 1992, 19(3): 155-160.

[13] Koelman J, Hoogerbrugge PJ. Dynamic simulations of hard-sphere suspensions under steady shear [J]. EPL (Europhysics Letters), 1993, 21(3): 363-368.

[14] Harlow, FH, Welch JE. Numerical calculation of time - dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface [J]. The physics of fluids, 1965, 8(12): 2182-2189.

[15] Teman R. Navier-Stokes Equations [M]. 3rd Ed, Amsterdam: North-Holland, 1984: 30-31.

[16] Chorin, AJ. Numerical solution of the Navier-Stokes equations[J]. Mathematics of computation, 1968, 22(104): 745-762.

[17] Koshizuka S, Oka Y, Tamako H. A particle method for calculating splashing of incompressible viscous fluid. American Nuclear Society, Inc., La Grange Park, IL (United States) 1995.