Сб. Компьютерный анализ литейной технологии: проблемы и перспективы. Материалы семинара 15-19 октября 2007 г. СПб.: ЦНТИ «Прогресс», 2007, с.20-29

М.Д. Тихомиров

Особенности постановки задач при моделировании литейных процессов. Численные методы. Преимущества и недостатки.

В настоящее время для разработки литейных технологий нередко применяют различные системы компьютерного моделирования литейных процессов (СКМ ЛП) [4]. Эти системы используют различные численные методы, математические алгоритмы и физические модели, имеющие разную адекватность решения [5]. Однако, зачастую даже специалисты по различным аспектам моделирования очень поверхностно представляют себе особенности физики ЛП и связанную с этим специфику различных численных методов. Можно встретить публикации, где авторы, претендующие на знание основ моделирования ЛП, распространяют странные и даже ложные представления о численных методах и особенностях физики ЛП (в основном в интернете, т.к. там отсутствует даже минимальное реферирование). Это затрудняет пользователям выбор и эффективное использование СКМ ЛП с учетом их специфики [6].

Большинство ЛП так или иначе определяется тепловыми процессами. Основными особенностями тепловой задачи в литейной постановке является неравномерное тепловыделение в интервале затвердевания и условия теплопередачи между отливкой и формой [1].

Выделение скрытой теплоты (нарастание доли твердой фазы) удобно учитывать с помощью т.н. «спектра тепловыделения», регламентирующий связь температуры и доли твердой фазы (рис.1). Для ряда сплавов спектр тепловыделения и суммарная величина скрытой теплоты являются достаточно консервативными и мало зависят от скоростей охлаждения (рис.1,2).

Рис.1 Кривые охлаждения для центра слитка ∅45мм из сплава Al-5%Si, заливаемого в песчаную форму и спектр тепловыделения

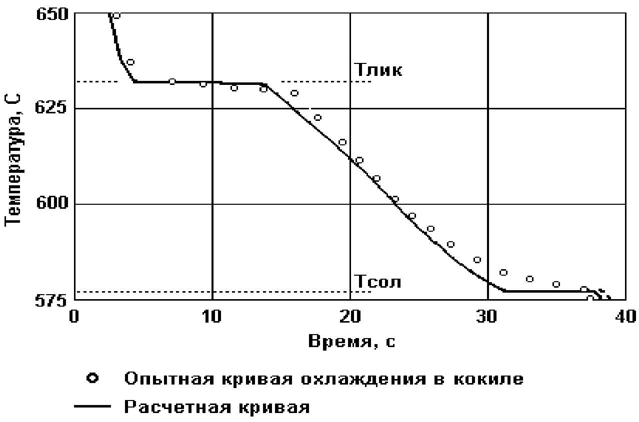

Рис.2 Кривые охлаждения для центра слитка ∅55мм из сплава Al-5%Si, заливаемого в кокиль.

При любой модели расчета тепловыделений можно ввести скрытую теплоту и спектр тепловыделения в исходное уравнение нестационарной теплопроводности т.н. «двухэтапным энтальпийным методом» [1]. Полагая для простоты теплоемкость сплава Ср постоянной на некотором температурном интервале ΔT, а суммарную скрытую теплоту L постоянной для сплава, можно записать уравнение, связывающее изменение энтальпии ΔH с изменением температуры ΔT и изменением доли твердой фазы ΔPs:

$$\Delta H = Cp*\Delta T - L*\Delta Ps, \qquad (1)$$

Т.о. вычисляются энтальпийные поля, которые определяются одновременно температурой и долей жидкой(твердой) фазы [1]. Причем, для большинства литейных задач, наиболее интересно распределение полей жидких фаз, т.к. именно они, а не температурные поля регламентируют большинство процессов в интервале затвердевания.

Кстати, интересным качеством энтальпийного распределения является то, что оно не будет иметь резких перегибов в пространстве отливки в процессе затвердевания (при естественных условиях охлаждения). Об этом часто забывают, когда пытаются рассуждать о том, что при моделировании затвердевания необходимо измельчать расчетную сетку при любом численном методе. Адекватный расчет процесса затвердевания при энтальпийном подходе (а это вероятно наиболее эффективный подход) не требует дополнительного измельчения сетки. В данном случае допустимую дискретность сетки диктуют особенности того или иного численного метода, а не особенности литейной постановки.

Вторая особенность тепловой задачи в литейной постановке связана с теплообменом между отливкой и формой. Существенное влияние граничной теплопередачи на тепловые поля в отливке связано с тем, что на границе сопряжения «отливка-форма» присутствует разрыв (скачок) температурной функции. В частном случае для малотеплопроводных (песчаных) форм этот скачок через относительно небольшое время может стать минимальным за счет быстрого прогрева прилегающего слоя формы. Т.е. будет формироваться единое «гладкое» температурное поле отливки и формы. В этом случае теплоотвод от отливки будет регламентироваться в основном прогревом формы, а не теплопередачей от отливки в форму. Это иногда дает повод делать непродуманные заявления о несущественном влиянии реальной топологии поверхности отливки на тепловые процессы. Это конечно заблуждение.

В общем случае, особенно для высокотеплопроводных (металлических) форм скачок температур всегда будет присутствовать и теплоотвод от отливки будет в основном определятся разницей температур и коэффициентом теплопередачи между отливкой и формой. В этом случае топология поверхности отливки и соотношения объемов и теплоотводящих поверхностей (т.н. «приведеная толщина») будут иметь очень существенное значение. Важно отметить то, что на границе сопряжения отливки и формы практически в одной и той же точке будет две температуры – одна со стороны отливки и другая со стороны формы.

Кстати, следует отметить, что «приведеная толщина» и соответственно связанный с ней т.н. «закон квадратного корня» вовсе не являются эмпирическими соотношениями, как это декларируют некоторые авторы. Эти соотношения попросту являются частями числа Фурье. В век численных расчетов иногда пренебрегают освоением классической теплофизики, а напрасно. Для понимания протекающих процессов и выявления сравнительных характеристик (в т.ч. и сравнительных характеристик численных метотов) такие знания просто необходимы.

Поскольку уравнение нестационарной теплопроводности не предусматривает возможности разрывов, то это диктует необходимость иметь как минимум две независимые расчетные области (сетки) – область отливки и область формы. А теплообмен между этими областями должен решаться на уровне теплообмена между сопряженными поверхностями отливки и формы. В этом смысле литейная постановка диктует не только определенные требования к методам расчета (адекватный учет соотношений объемов и площадей), но также и к постановкам внутри метода (вычисление разных температур на границах сопряжения «с разных сторон» в одном граничном узле).

При моделировании литейных процессов наиболее часто используют следующие методы численного решения: метод конечных элементов (МКЭ), метод конечных разностей (МКР) и метод конечных объемов (МКО).

Два наиболее часто применяемых численных метода в СКМ ЛП – это МКЭ и МКР. Наиболее наглядно разница между МКЭ и МКР видна по способу дискретизации геометрии (рис.3). МКР более старый метод, именно с ним связаны первые успехи численного моделирования. Уравнения МКР обычно формулируют как преобразование уравнения нестационарной теплопроводности (и аналогичных эллиптических дифференциальных уравнений теории поля) с помощью рядов Тейлора или прямой заменой производных разностными аналогами. Но на самом деле те же уравнения могут быть выведены например на базе метода элементарных балансов [7], без привлечения дифференциальных уравнений. Исходя из разбивки в виде «кирпичиков», в МКР при любой степени дискретности будет нарушено соотношение «объем/площадь» - например площадь шара в МКР всегда будет равно площади куба [2]. Нетрудно подсчитать с помощью того же закона квадратного корня, что например для цилиндра максимальная ошибка во времени затвердевания составит 38%. [2] В реальности систематическая погрешность при МКР меньше, т.к. происходит прогрев формы. Путем сравнительных расчетов на действующих разностных СКМ ЛП в [2] было показано, что для цилиндра погрешность составляет около 9% в форме из песчаной смеси и около 20% в металлической форме. В классической формулировке МКР предполагает одинаковое значение температуры в рамках разностной ячейки (рис.4). Это приводит к необходимости достаточно мелкой разбивки. Как было показано в [2], для выхода на уровень независимости результатов от густоты сетки, необходимо иметь не менее 30-40 ячеек по толщине любой стенки. В различных вариациях МКР, предположение о постоянном значении функции может не присутствовать в явном виде, однако при внимательном анализе его обычно всегда можно обнаружить как неявное предположение при некоторых операциях (чаще всего связанных с теплосодержанием ячейки). В МКР возможны различные схемы расположения узлов в которых определяется искомая функция (например температура) внутри разностной ячейки. С точки зрения более адекватного учета граничных температур следует располагать узлы по вершинам разностного «кирпичика». Однако, в большинстве разностных СКМ ЛП узел располагают в центре ячейки для облегчения решения, что приводит к дополнительным погрешностям.

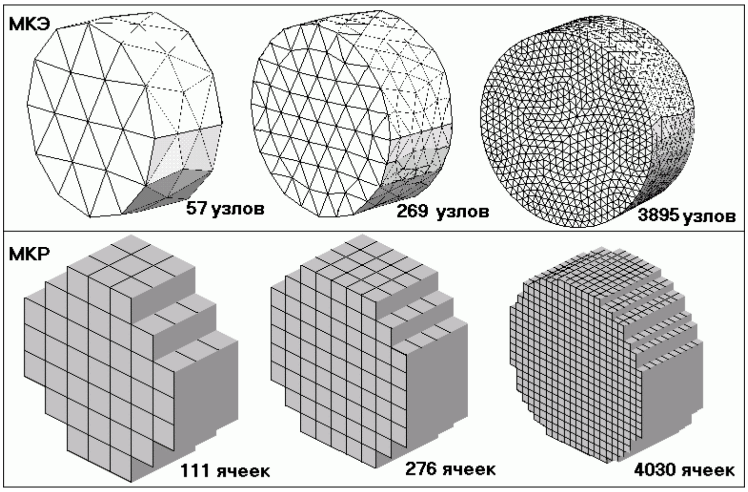

Рис.3 Разбивки цилиндра при МКЭ и МКР при близких значениях густоты сетки.

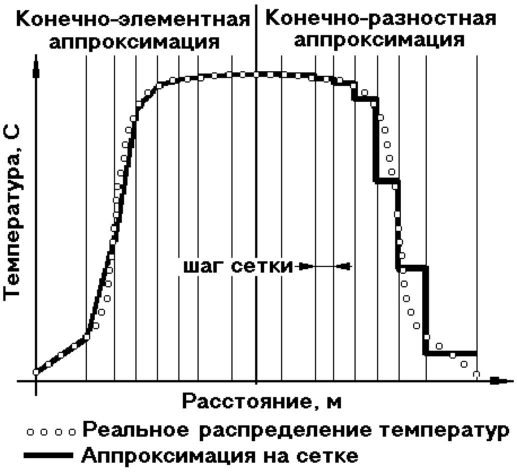

Рис.4 Различная аппроксимация искомой функции при МКЭ и МКР

Метод конечных объемов (МКО) в определенном смысле является развитием разностных методов. От МКР он отличается тем, что в граничных разностных ячейках учитываются произвольно ориентированные границы, «отсекающие» от ячейки произвольный объем. Иногда МКО рассматривается как некоторая промежуточная стадия между методом конечных разностей (МКР) и методом конечных элементов (МКЭ). Это вероятно не совсем справедливо, т.к. хотя МКО и учитывает произвольно ориентированные границы внутри разностной ячейки, но в основе своей предполагает ортогональную разностную разбивку (дискретизацию) на прямоугольные параллелепипеды и обладает рядом других особенностей присущих разностным методам. В тех случаях, когда все границы ортогональны, МКО приведет к тем же самым уравнениям, что и МКР. Возможности применения МКО для сложных случаев граничной теплопередачи (кокиль, ЛПД, ЛНД и т.п.) зависит от того как располагаются расчетные узлы в граничных ячейках и как учитывается реальная внешняя площадь в этих ячейках. В простейшем случае в рамках МКО это можно делать так, что особого отличия от МКР не будет (кроме более гладкой чисто визуальной картинки). При формальном отсечении от ячейки произвольного объема, в расчете не обязательно учитывать реальные площади и объемы, тем более, что если не искать температуру в узлах на границах, а использовать узел в центре, то в этом и немного смысла. Да и не все разработчики понимают как и для чего их искать. Во всяком случае, в одной из интернетных публикаций (причем на сайте разработчиков одной из СКМ ЛП) было заявлено, что «*сопряжение задачи ... , решаемой в МКЭ, с системой, основанной на МКР, внутри области затвердевшей отливки не представляет особых трудностей, поскольку, как нетрудно заметить, кубик можно легко превратить в два тетраэдра, проведя плоскость по диагонали.*»(!). (Это не шутка, эта цитата. В упомянутой публикации много странных, вернее попросту неверных рассуждений, в т.ч. и про МКО, и про МКЭ, и про МКР, и про затвердевание, и про граничную теплопередачу, но от этого «геометрического перла» просто оторопь берет.) Очевидно, что кубик «как нетрудно заметить» нельзя превратить в 2 тетраэдра «проведя плоскость по диагонали», просто потому, что кубик состоит из 5 тетраэдров (один из них сугубо «внутренний» и общих граней с кубиком не имеет). Вопрос в том, можно ли с помощью подобных манипуляций с «кубиком» превратить МКР если не в МКЭ, то хотя бы в МКО? И что должны думать пользователи СКМ ЛП, читая подобные рассуждения?

Конечно-элементный подход более молодой, более математизированный и более «сильный» метод, т.е. на уровне исходных посылок точнее соответствует уравнениям задач теории поля [3]. Сетка МКЭ чаще всего представляет из себя набор тетраэдальных пирамид (рис.3), что позволяет принципиально более точно, чем в МКР описывать геометрию и не приводит к нарушению соотношения «объем/площадь». Расчетные узлы в МКЭ всегда находятся на реальной поверхности, что позволяет адекватно учитывать граничные потоки, в т.ч. при наличии скачка искомой функции на границе «отливка-форма». Однако главное отличие МКЭ в том, что в нем на уровне исходных посылок предполагается распределение искомой функции (температур, энтальпий и т.п.) в объеме элемента – чаще всего линейное (рис.4). Соответственно МКЭ требует меньше машинных ресурсов (меньше оперативной памяти), расчет идет быстрее (меньше затраты процессорного времени), результат расчетов может быть более адекватным. В МКЭ несколько сложнее построить расчетную сетку, однако в настоящее время на рынке программных продуктов есть ряд автоматизированных специализированных «разбивщиков» для МКЭ, так что генерация конечно-элементной сетки превратилась практически в рутинную операцию. В середине 80-ых годов МКР-системы моделирования почти повсеместно были вытеснены элементными системами в силу очевидных преимуществ МКЭ. Единственным исключением по совершенно объективным причинам оставались (и остаются) системы для моделирования гидро- и аэродинамических процессов. Подобные задачи связаны с наличием движущейся свободной поверхности и применение МКЭ потребовало бы перегенерации сетки на каждом шаге по времени. Поэтому для решения задач гидродинамики (например заливки) и сейчас в большинстве случаев используют МКР или МКО.

Для сравнения возможностей различных методов, можно провести тестовые расчеты для простейшего тела типа «плита», охлаждаемого в среду с постоянной температурой. Для этого случая можно получить точное аналитическое решение [8] и сравнить его с результатами расчетов различными численными методами. В такой постановке будет исключена погрешность МКР связанная с границами, а МКР и МКО будут описываться одинаковыми уравнениями. Схема расчета приведена на рис.5. Для МКР в случае узлов, расположенных в центре будем специально вычислять и использовать в расчете температуру на границе со средой, хотя в большинстве СКМ ЛП, использующих такую схему это не делается.

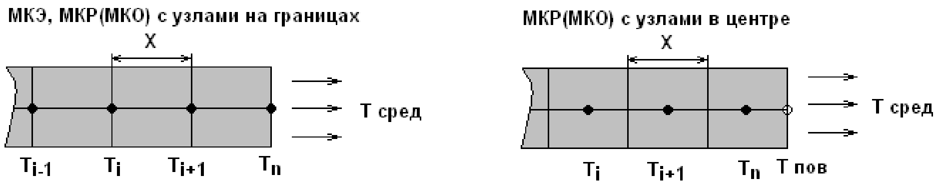

Рис.5 Схема расчета охлаждения плиты для разных методов

Поскольку, как указывалось выше, достаточно важным является температура отливки на границе, т.к. именно она в общем случае определяет интенсивность теплоотвода от отливки, то будем анализировать температурные кривые на поверхности, граничащей со средой. В данном случае это особенно актуально, т.к. среду с постоянной температурой можно рассматривать как абсолютно непрогреваемую (например интенсивно водоохлаждаемую) форму. Будем считать, что начальная температура отливки 700 С, постоянная температура формы 20 С, а остальные характеристики, в т.ч. и коэффициент теплопередачи назначим характерными для литья алюминиевых сплавов в кокиль. Будем исследовать как количество расчетных элементов влияет на степень приближения к точному решению для различных методов (рис. 6-9).

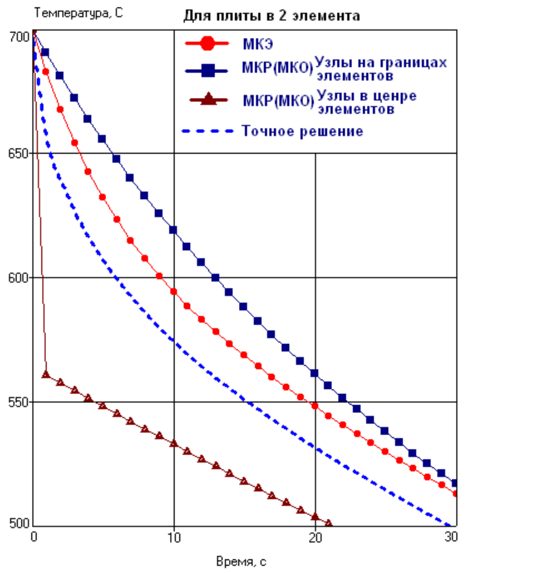

Рис. 6 Кривые охлаждения поверхности для 2 элементов

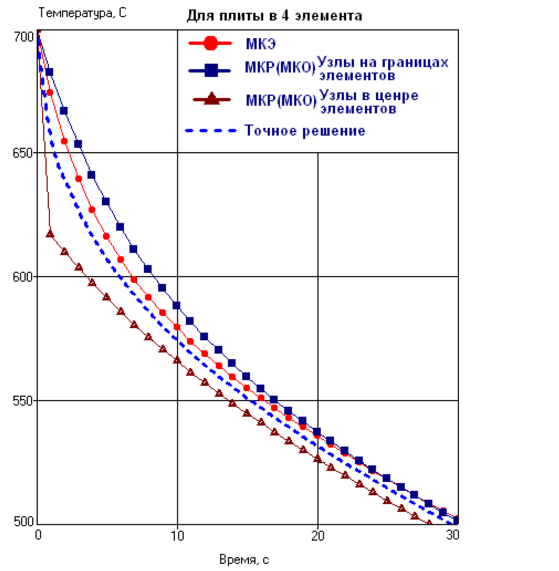

Рис. 7 Кривые охлаждения поверхности для 4 элементов

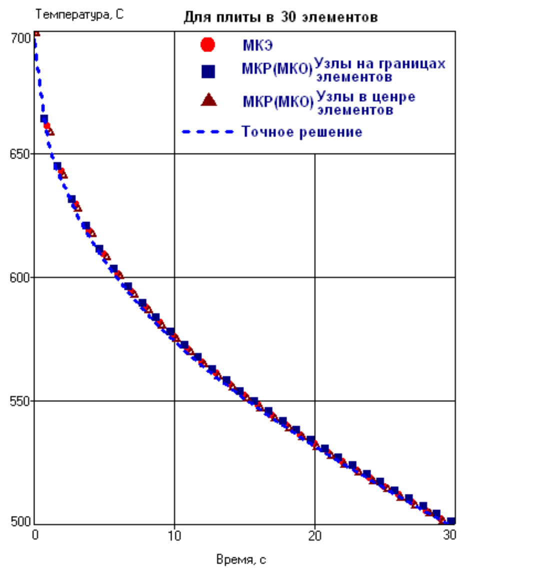

Рис. 8 Кривые охлаждения поверхности для 30 элементов

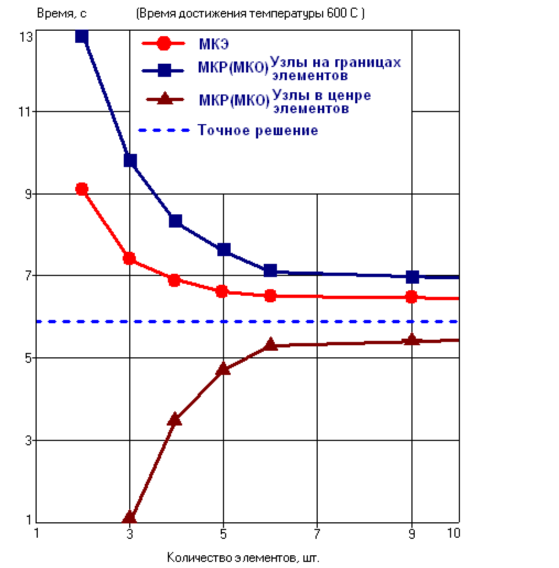

Рис. 9 Зависимость времени падения температуры поверхности от 700 до 600 С от количества элементов

Из графиков (рис.6-9) видно, что МКЭ наиболее быстро сходится к точному решению и требует меньшего количества элементов. Хуже всего ведет себя МКР(МКО) с узлами в центре.

Список литературы

1. Тихомиров М.Д., Основы моделирования литейных процессов. Тепловая задача.- М: Литейное производство.- 1998, No 4, с.30-34.
2. Тихомиров М.Д., Комаров И.А. Основы моделирования литейных процессов. Что лучше – метод конечных элементов или метод конечных разностей?- М.: Литейное производство.- 2002, No 5, с.22-28.
3. Тихомиров М.Д., Сабиров Д.Х., Абрамов А.А. Физико-математические основы компьютерного моделирования литейных процессов. Система моделирования «Полигон»: Сб. ЦНИИ Материалов – 90 лет в материаловедении. Юбилейный выпуск.- СПб., 2002, с.151-176.
4. Абрамов А.А., Бройтман О.А., Тихомиров М.Д. Применение компьютерного моделирования при разработке технологий изготовления отливок из алюминиевых сплавов - М.: Литейное производство.- 2006, No 11, с.31-34.
5. Тихомиров М.Д. Сравнительный обзор наиболее известных систем компьютерного моделирования литейных процессов: Материалы научно-практического семинара «Новые подходы к подготовке производства в современной литейной промышленности». - СПб., 2004, с.14-28.
6. Тихомиров М.Д. Основы моделирования литейных процессов. Важные особенности систем моделирования- М.: Литейное производство.- 2004, No 5, с.24-30.
7. Михеев М.А., Михеева И.М. Основы теплопередачи. М., Энергия, 1977. 344 с.
8. Григорьев В.А., Зорин В.М. Тепло- и массообмен. Теплотехнический эксперимент. - М., 1982, 512 с.