



ICME 2024 集成计算材料工程及工业应用研讨会

论文摘要集

2024 07.12 ▶ 07.15

中国·大理



目录

集成计算材料工程的工业应用实践	1
自水冷多层壳一体化镂空砂型的铸造工艺研究	2
基于多保真度神经网络与迁移学习的电阻点焊焊核直径预测方法研究	3
基于深度学习的铸造过程模拟仿真	4
基于可解释性机器学习预测铁基非晶合金的磁热性能	5
42CrMo4 圆钢旋转摩擦焊有限元模拟	6
多主元合金神经演化机器学习势的开发与验证	7
玻璃纤维复合材料长效服役性能评价	8
Inconel 693 合金的高温氧化和耐熔融玻璃腐蚀行为及机理研究	9
双激光选区激光熔化 AlSi10Mg 超高周疲劳行为研究	10
连铸板坯宏观偏析数值模拟研究	11
Gleeble 热模拟平台在 ICME 研究中的角色和作用	12
热处理数值模拟研究进展	13
固相原位反应晶内纳米相增强铝基复合材料强韧化机制研究	14
新型 SP2215 耐热合金斜轧穿孔数值模拟及工艺优化	15
SLM 时效强化型高温合金相变动力学模型建立及应用	16
SWRH82B 盘条轧制过程和风冷过程有限元模拟及参数优化	17
不锈钢床床熔化增材制造工艺过程模拟与性能预测	18
计算设计 Al-Mg-Si 铝合金成分优化全流程热处理工艺	19
镁合金轮毂锻造成形有限元模拟研究	20
基于第一性原理计算的抗氢材料设计及优化研究	21
含 Nb 齿轮钢高温渗碳淬火变形数值模拟	22
基于微结构的析出强化镍基超合金蠕变断裂寿命预测	23
先进储能与节能轻合金设计	24
通过添加少量钢实现对 Sn-0.7Cu 焊料/Cu 基板界面处金属间化合物的生长调控	25
7050 铝合金高温拉伸过程中微观组织的演变和析出相的长大/溶解行为	26
第二相对 Al-Zn-Mg-Cu 铝合金再结晶行为的影响	27
Al-Mg-Si 合金热压缩过程中的动态再结晶行为研究	28
均匀化 4047 铝合金热变形行为及本构模型研究	29
集成计算材料工程在大型铸锻件热加工中的应用	30



不同奥氏体化温度对核压力容器用 SA508 Gr. 4N 钢马氏体转变的影响	31
铝合金热成形过程的集成计算	32
激光清洗辅助铝合金丝粉协同电弧增材制造工艺与机理	33
镁合金多元固溶鸡尾酒效应和材料集成设计与应用	34
多元镁合金凝固过程枝晶偏析模拟研究	35
基于时序图神经网络的跨尺度晶体塑性建模方法	36
双金属环件短流程铸辗复合成形界面结合行为研究	37
材料数字化研发-从小模型到大模型	38
有序 3D 微结构对 Cu-Cr 触点材料电学性能的影响	39
Sn-0.7Cu 型多元合金焊料成分-组织-性能的多尺度	40
模拟计算与研究	40
不同均匀化时间对 7075 铝合金力学性能的影响	41
大型柱状工件热处理升温规律研究	42
铁电材料机电耦合效应的理论研究	43
5xxx 系铝合金焊丝成分设计及其焊接模拟	44
外场对 6082 铝合金时效处理过程位错与组织变化的影响	45
格子玻尔兹曼方法模拟不同固液密度比条件下液滴凝固与热流耦合规律	46
稀土对马氏体时效钢动态再结晶行为影响的实验研究和有限元模拟	47
基于物理模型与数据驱动模型的材料成形多尺度模拟	48
基于矩形通道转角约束的 Al-Zn-Mg-Sc 盒形构件挤压过程晶粒演变规律研究	49
基于离心铸造的铝镁双金属环坯结合行为模拟研究	50
不同成分体系低合金耐磨钢连续冷却相变行为研究	51
锻造 6061 铝合金轮毂疲劳模拟研究及寿命预测	52
双金属复合材料轧制界面结合预测模型研究	53
基于 CALPHAD 方法的 H13 钢 QPQT 热处理工艺设计及其对微观组织和热疲劳性能的影响	54
不同锻造比对 40CrNi2Si2MoV 高强度钢性能和组织的影响	55
格子玻尔兹曼方法模拟洛伦兹力作用下合金凝固熔体流动与溶质偏析机制	56
合金相中原子择优占位行为研究的必要性、方法和若干应用	57
锆合金管材皮尔格冷轧工艺模拟仿真研究	58
机器学习在稀土钢铁材料研究中的应用探索	59
SA508-3 钢构筑成型动态再结晶耦合元胞自动机及晶体塑性有限元的数值模拟研究	60
基于 CALPHAD 方法的新型钴基高温合金的成分设计及性能研究	61
NiAl 金属间化合物变形机制的原子尺度研究	62



基于 Oyane 韧性损伤模型的淬火开裂预测数值模拟研究	63
石墨烯增强铝基复合材料的界面调控与力学性能研究	64
集成材料计算：轻合金制备工艺研究的新范式	65
多尺度模拟研究铝合金中的析出行为	66
7050 铝合金热拉伸过程中微观亚结构及第二相粒子的演变	67
基于热-力耦合分析的玻纤复材拉挤成型仿真	68
6 机架铝杆连轧与 9 道次多层坯轧制数值模拟	69
考虑拘束效应的铝/钢电阻点焊复杂构型断裂预测研究	70
热处理智能制造系统开发及应用	71
含铌锆合金蠕变行为微观机理的分子动力学模拟研究	72
基于 JMatPro 的材料性能优化设计与联合仿真应用	73
将注意力机制移到黑盒子外：“中心-环境”特征模型	74
增材制造马氏体不锈钢显微组织和相变研究	75
功能结构一体化点阵多孔材料的仿真及试验研究	76
基于相场模拟对铁电材料的压电性能的电场控制研究	77
Zr-Nb-Sn 合金辐照损伤介观尺度数值模拟软件	78
局域化学环境对 AlNbTiZr 高熵合金中点缺陷和氧行为影响的研究	79
基于分子动力学方法解析 Fe-Mn-C 奥氏体钢低温应变响应	80
硬/软磁铁氧体交换耦合对磁导率影响的相场研究	81
Al-Mg-Si 合金 CMT 焊接接头的软化机理及软化区的有限元模拟预测	82
探究应变状态对中锰 TRIP 钢奥氏体稳定性的影响	83
铝合金溶质原子在特殊晶界处的晶界偏析行为及其力学性能的分子动力学模拟研究	84
合金元素对铍铝合金界面性质影响的第一性原理研究	85
316H 奥氏体钢在不同保载时间下的高温疲劳-蠕变行为与本构模型研究	86
基于机器学习 Fe-Cr-Ni-Al/Ti 多主元合金的成分设计及性能优化	87



集成计算材料工程的工业应用实践

代丽、王卓、黄诗尧

成都材智科技有限公司

摘要：材料是现代科技和工业发展的基石，在各个领域中起着至关重要的作用。然而，材料研发流程复杂，目前主要采用传统的“经验+试错”的研发模式，存在研发周期长、成本高、试验过程复杂且不可预测性强等问题，严重限制了新材料的快速开发和应用，亟需更高效的研发方法和工具来突破这些障碍。随着计算技术的飞速发展，材料科学领域迎来了全新的研究范式，即集成计算材料工程（ICME），它在材料研发中发挥着关键作用，通过整合多尺度建模、计算模拟和数据驱动方法，显著加速材料的设计与优化过程。ICME 在国内外的的发展迅速，已成为材料科学和工程领域的重要研究方向，也有很多应用实例，本文介绍了 ICME 在新材料设计和优化中的具体应用案例，展示其在加速材料研发过程中的作用。材智科技围绕 ICME 自主开发了多款底层支撑应用软件，包括材料数据智能管理与应用系统、材料集成计算应用系统、材料机器学习系统等，可支持材料数据的采集、清洗、管理及应用、材料计算仿真软件的集成应用以及材料机器学习模型构建与应用等，本报告也将对这些应用软件功能进行详细介绍。



自水冷多层壳一体化镂空砂型的铸造工艺研究

徐敬英、康进武

北京科技大学、清华大学

随着终端产品的高端化和极端化发展，对铸件质量和性能的要求越来越高，对铸造技术提出了更高的要求。3D 打印砂型技术为复杂高质铸件的生产提供了更佳的工艺选择，但目前在实际应用中，3D 打印砂型只是简单替代传统砂型的造型和制芯，并未真正发挥 3D 打印砂型技术的创新性和灵活性，3D 打印砂型技术仍然主要应用于密实砂型/砂芯的制作，铸件难以实现有效冷却控制，难以实现智能铸造。因此，基于 3D 打印砂型技术设计了复杂的多层壳镂空砂型/砂芯一体化结构，并研制了多层壳一体化镂空砂型自水冷装置，采用多层壳一体化镂空砂型进行了铝合金筒形的铸造工艺研究，探讨了水冷多层壳一体化镂空砂型对筒形铸件的收缩变形、残余应力、微观组织和力学性能的影响规律。并利用多层壳镂空砂型提高砂型的保温效果，搭建了底部敞开的多层壳镂空砂型的逐渐浸入式水冷定向凝固平台，实现了铝合金铸件的定向凝固。



基于多保真度神经网络与迁移学习的电阻点焊焊核直径预测方法研究

岳中杰、陈秋任、包祖国、谭国笔

南京工业大学、长三角先进材料研究院

提出了一种基于机器学习和迁移学习方法的电阻点焊焊核直径预测方法。最初，低保真度(LF)数据是通过有限元数值模拟和实验设计(DOE)获得的，用于训练低保真度机器学习模型。随后，从RSW过程实验中收集高保真(high-fidelity, HF)数据，并通过迁移学习技术对低保真度模型进行微调。通过实验验证了模型的准确性和泛化性能。实验结果表明，结合不同的保真度数据集并采用迁移学习可以显著提高预测精度，同时最小化相关的实验成本，为RSW中关键过程参数的预测提供了一种有效的方法。



基于深度学习的铸造过程模拟仿真

康进武、赵起超、韩晓、杨亚慧、王纪武

清华大学、北京交通大学

以深度学习为核心的人工智能取得了巨大的飞跃，对社会产生了深刻的影响。但是深度学习在模拟仿真和科学计算领域的应用还较少。建立了一种镜面 MU-net 神经网络，它由两个独立的 U-net 网络组成，上边的 U-net 输入为铸件模型，下边的 U-net 输入为 t_i 时刻的温度场，两个网络在底部或最后的输出合并，最终输出为 t_{i+1} 时刻的温度场。每个 U-net 网络包括一个编码器和一个解码器。采用 302 张二维不同形状的铝合金铸件模型以及它们 t_{min} (t 为 0、10、20、30、40、50、60) 的温度场作为训练集，对镜面 MU-net 神经网络进行了训练。输入为砂型铸件模型和 t_{min} 的温度场，标签为 $t+10min$ 的温度场进行训练。将训练后的网络用于预测铝合金铸件的温度场，定义准确率为预测结果与模拟结果偏差小于 $10^{\circ}C$ 的像素个数占总的像素点个数的比值。对 26 张铸件模型作进行预测，准确率为 0.9838，平均皮尔逊相关系数为 0.99994，高于 U-net 网络准确率 0.9124，皮尔逊相关系数 0.99964。预测时间为 1.65s，远远快于模拟仿真的计算效率。并对影响精度的因素进行了讨论分析。



基于可解释性机器学习预测铁基非晶合金的磁热性能

刘城城、苏航

中国钢研科技集团有限公司

等温磁焓变(-SM)作为表征非晶合金磁热性能的重要参数，如何进行精确的预测是关注的重点。本文通过机器学习建立-SM的预测模型，对比四种机器学习算法，etr算法有着最好的表现(测试集： $R^2=0.90$ ， $MAPE=13.31\%$)。通过PCC和RFE进行特征选择，剔除无用特征，得到7个特征最佳子集，对应的特征为 M_f 、 δ_r 、 ΔH 、 T_m 、 ΔT_m 、 E_c 和 ΔS 。之后引入SHAP对预测模型进行可解释性分析，得到特征的重要性排序以及临界特征值。又根据建立的预测模型，以FeZrB体系为例，提出新合金的设计策略，为合金设计提供一定的指导。最后加入其他体系非晶合金，验证了模型的泛化能力，提出机器学习在非晶合金领域应用的发展方向。



42CrMo4 圆钢旋转摩擦焊有限元模拟

吴永强、王龙、牟鹏飞

河北建筑工程学院、张家口市北方穿越钻具制造有限公司

本文通过有限元模拟软件 DEFORM 模拟了直径 65mm 的 42CrMo4 圆钢旋转摩擦焊过程，研究了焊接参数对应力、应变、温度和材料流动的影响。采用控制变量法，设置飞轮角速度分别为 40rad/s、45rad/s、50rad/s，移动夹具的移动速度分别为 0.32mm/s、0.4mm/s 和 0.5mm/s。结果显示随着旋转摩擦焊的进行，进给量显著影响焊接质量，通过观察飞边形貌可评估焊缝质量。温度最高点出现在摩擦界面附近，距离摩擦界面越远而温度降低。焊接区域承受较大应力和应变，尤其在摩擦界面。进给量变化直接影响温度和应力分布，合理控制进给量减少焊接应力集中。进给量影响材料流动行为，适当进给量促进焊缝成形。根据具体要求选择合适进给量，实时监测和调整进给量以确保焊接质量一致。优化实验条件为飞轮角速度 50rad/s，移动夹具移动速度 0.4mm/s，进给量 20mm 时焊缝形成充分，焊接过程稳定，质量优异。



多主元合金神经演化机器学习势的开发与验证

彭平

湖南大学

Pd-Cu-Ni-P alloy is an ideal model system of metallic glass known for its exceptional glass-forming ability. However, few correlation of structures with properties was systematically investigated owing to a lack of interatomic potential. In this work, a neuroevolution machine learning potential (NEP) with efficiency close to embedded atom method (EAM) potentials is developed. Its accuracy has been compared to density functional theory (DFT) calculations. For energy, force and virial, the training errors are 6.0 meV/atom, 111.1 meV/Å and 21.5 meV/atom, respectively. By means of this NEP, several thermodynamic parameters such as glass transition temperatures and pair distribution functions of Pd₄₀Cu₃₀Ni₁₀P₂₀ and Pd₄₀Ni₄₀P₂₀ liquid and glassy alloys as well as their short-range orders, tensile and compression strengths, transport properties etc. have been evaluated by a series of molecular dynamics simulations. A good agreement with DFT calculations and previous experiments indicates this NEP provides an accurate and efficient scheme in the analysis and exploration of microstructures, thermodynamic and kinetic properties of Pd-Cu-Ni-P alloys.



玻璃纤维复合材料长效服役性能评价

刘彩明

浙大城市学院

玻璃纤维复合材料具有很高的强度和刚度，同时重量轻，是电网线路中最理想的材料之一。相比于传统的陶瓷材料，使用玻璃纤维复合材料可以减轻线路的重量，降低对支撑结构的要求，减少了施工和维护的成本。玻璃纤维复合材料对于大多数化学物质具有较强的耐腐蚀性，这使得它在潮湿、多雨或者化学腐蚀性环境下的电网线路中表现出色。此外，其还具有优良的绝缘性能，降低了因绝缘故障导致的停电风险。玻璃纤维复合材料已经广泛应用于输电线路的绝缘子和横担。由于玻璃纤维复合材料在电网中应用的时间并不长，所以由长期服役环境导致材料性能退化规律尚不清楚，但这对玻璃纤维复合材料长效服役性能评价至关重要。基于此，首先开展了玻璃纤维复合材料在自然老化、加速老化后的性能变化。结果表明平行于纤维方向的材料性能随着老化温度、老化时间的增加并未发生明显的退化，而垂直纤维的方向是材料发生热老化退化的主要方向，并建立了热老化引起的材料性能随老化时间的退化规律模型。然后基于风载荷工况，设计并进行了材料的疲劳和蠕变退化实验，确定了不同R比下材料的S-N曲线及蠕变曲线。结果表明，R比对损伤的演化趋势有一定的影响，垂直于纤维方向的材料性能会发生明显的蠕变退化。基于“损伤演化率”和“蠕变主曲线”建立了材料疲劳退化和蠕变退化的性能预测模型，能够基于服役工况给出合理的玻璃纤维复合材料长效服役性能评价。



Inconel 693 合金的高温氧化和耐熔融玻璃腐蚀行为及机理研究

李应举

中国科学院金属研究所

核废料处理是核工业发展的重要一环。目前，核废料处理的有效手段是通过玻璃固化处理，玻璃化过程主要在焦耳加热陶瓷熔炉（JHCM）中进行。在高温和腐蚀环境中使用的电极材料发生失效是影响焦耳加热陶瓷熔炉使用寿命关键。Inconel 693 合金在玻璃固化介质中呈现出较当前广泛使用的 Inconel 690 合金更优的抗腐蚀性能，成为下一代玻璃固化熔炉电极的候选材料。合金表面形成连续的腐蚀阻挡层会提升合金的耐高温和熔融玻璃腐蚀性能，而 Inconel 693 合金中 Al 元素的含量显著影响了合金表面生成 Al₂O₃ 的形态和形成机制。因此，本工作通过调控 Inconel 693 合金中 Al 元素的含量实现了合金表面 Al₂O₃ 膜由内氧化转变为外氧化，显著提高了合金的抗氧化性能。另外，通过调控 Al 元素含量的 Inconel 693 合金研究了其在模拟实际工况通电条件下的腐蚀行为发现，合金中 Al 元素含量过高或过低都不利于腐蚀过程中表面生成连续的 Al₂O₃ 膜。并通过模拟揭示了交流电对腐蚀行为的影响机制，为我国自主研发玻璃固化熔炉电极材料提供理论支撑和技术支持。



双激光选区激光熔化 AlSi10Mg 超高周疲劳行为研究

李文凯、敬宇、石燕栋、苏旭明

浙大城市学院

选区激光熔化（SLM）技术在大规模生产中的应用受限于其较慢的打印速度。目前的研究主要集中在如何提升 SLM 的打印速度，其中多激光打印技术被视为有效的解决方案，可显著增快打印速度。本研究探讨了使用单激光与双激光制造 AlSi10Mg 材料的超高周疲劳行为。研究结果显示，单激光制造的材料具有更高的超高周疲劳寿命，尽管两种方法的疲劳寿命分散度都较大。通过对微观结构和疲劳断口的分析，发现双激光制造的 AlSi10Mg 材料在搭接区存在大量孔洞。为了进一步研究孔洞尺寸对材料超高周疲劳行为的影响，采用 P-S-N 模型对数据进行了分析。



连铸板坯宏观偏析数值模拟研究

沈厚发

清华大学

建立了连铸板坯凝固宏观偏析多元多相数学模型，采用数值模拟方法研究了凝固组织变化及宏观偏析的形成与特征。结果表明：不同合金元素的成分分布受铸机结构及凝固组织影响。中心偏析附近的负偏析与沿凝固前沿沉降的等轴晶有关。



Gleeble 热模拟平台在 ICME 研究中的角色和作用

陈伟昌

Dynamic Systems Inc. NY USA

新材料或新合金的研发已经是国内冶金行业面临的重大课题，美国 TMS 协会提出的 ICME 材料基因工程路线图为新材料的研发和市场新需求的满足提供了一个明确的方向。

在人工智能（AI）极速发展的形势下，冶金行业的人工智能研究已经提上了日程。AI 在非金属材料行业已经取得了重大突破，我们冶金行业的研究人员必须迎头赶上。如何利用人工智能大模型来帮助高效确定材料的成分，同时利用高通量金属打印技术，生成试样，通过 Gleeble 平台快速获取大量精准的数据对大模型进行有效训练已经成为 ICME 成功的关键。

本文主要介绍如何通过人工智能大模型结合 Gleeble 智能实验室来快速高效开发新合金，满足市场对新合金新材料的需求，以加强冶金企业在未来市场中的竞争力。

热处理数值模拟研究进展

张明皓、李贤君、张文良、罗平、孙朝阳、杨斯媛、王恺择、李志颖
中国机械总院北京机电研究所有限公司、北京科技大学 机械工程学院

习近平总书记在二十大报告中指出，坚持把发展经济的着力点放在实体经济上，推进新型工业化，推动制造业高端化、智能化、绿色化发展。近年来，热处理行业中，智能制造也引起了高度关注，推进自动化、智能化成为热处理行业下一阶段发展目标之一。智能热处理是智能制造的重要组成部分，热处理计算机模拟是智能热处理的核心技术，而热处理模拟软件则是涉及知识产权的重要载体。工信部出台的《“十四五”软件和信息技术服务业发展规划》提出，要补足国内产业链短板弱项，其中工业软件将是重点补强环节。更加说明了模拟软件在工业发展的重要性。

本文系统介绍了目前主流热处理模拟软件的发展历程，阐述了不同热处理数值模拟软件功能模块、优缺点及其应用。并介绍了国内对热处理模拟软件的研究历程，对国内外热处理模拟软件存在差距进行了比较。最后对热处理数值模拟软件的应用现状与研究进展进行了总结，对其发展进行了展望，如下：

1) 热处理数值模拟软件自主化成为行业急需。一旦发达国家中止与我国热处理数值模拟软件的贸易，停止其在我国出售的各类热处理数值模拟软件，那么整个行业的发展将会大大受到制约。突破这类“卡脖子”问题，不仅是热处理行业繁荣发展的重要道路，更是国家强盛之基、安全之要。核心技术只有掌握在我国自己手中，才能避免国外对中国的封锁，保障我国的工业安全和国家安全。

2) 国家和各高校应该加大对相关复合型人才的招收和培养，尤其是传统行业和计算机行业的交叉，是提高热处理数值模拟软件以及其他工业软件开发水平的重中之重。

3) 结合现今热处理行业的发展需求，热处理数值模拟软件的发展方向包括：建立并不断完善热处理基础数据库；提高零件质量和生产效率的高温渗碳淬火、真空渗碳淬火的热处理数值模拟软件，真空渗氮、深层渗氮数值模拟软件；双频、多频感应加热淬火及感应压床淬火数值模拟软件等。



固相原位反应晶内纳米相增强铝基复合材料强韧化机制研究

戎旭东、赵冬冬、赵乃勤

天津大学

纳米增强相的晶内分布构型设计因其可实现复合材料强度-延展性协同，是发展具有优异力学性能的铝基复合材料（AMCs）研究重点之一。本研究基于 Al-CuO 固相原位反应体系，制备了晶内纳米 δ^* -Al₂O₃ 颗粒和 γ -Al₂O₃ 晶须多组元协同增强铝基复合材料，其抗拉强度可达 481 MPa，断裂延伸率为 16.8%。通过建立 Al₂O₃ 等效分布理论模型，提出纳米增强相晶内分布是复合材料获取高强度的主要途径。晶内 Al₂O₃ 的引入使复合材料变形过程中 GND 表现出显著的晶内分布特征。基于修饰的应变硬化模型，揭示了 Al₂O₃ 对于复合材料动态硬化和各向同性硬化的显著贡献，证实了晶内 Al₂O₃ 在改善复合材料应变分配、应变/应力传递和强度匹配方面的重要作用。基于裂纹尖端塑性区和位错缠结区理论，揭示了 Al₂O₃ “富集区” — “贫化区” 交替分布的非均匀结构是原位反应 Al-CuO 铝基复合材料高韧性的主控因素。本研究结果对理解复合材料中晶内纳米增强相强韧化行为具有重要理论意义。



新型 SP2215 耐热合金斜轧穿孔数值模拟及工艺优化

梁凯、姚志浩、谢锡善、董建新、王洪瑛

北京科技大学

奥氏体耐热合金在斜轧穿孔过程中工艺参数的选择不当，可能导致毛管出现晶粒粗大、混晶等现象甚至在加工工程中发生断裂，进而影响到后续的加工变形及产品的最终性能。本研究基于先前的热变形试验，建立 SP2215 合金的材料模型，并利用有限元软件 Simufact Forming 16.0 对合金的斜轧穿孔过程进行模拟，分析了穿孔过程中管坯金属流动、应变场、应力场、应变速率场、温度场及穿孔机穿孔作用力的动态变化，模拟结果与实际变形规律相符。进而探讨了顶伸量、轧辊转速、管坯初始温度等工艺参数对合金热穿孔性能与微观组织的影响，最终获得合金的最佳斜轧穿孔工艺为：顶伸量 50 cm、轧辊间距 95.84 cm、导板间距 116.06 cm、轧辊转速 50 Rpm、管坯初始温度 1100~1150℃。



SLM 时效强化型高温合金相变动力学模型建立及应用

孔豪豪、侯雅青、秦海龙、孙志民、谢锦丽、毕中南、苏航

钢铁研究总院有限公司

中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心

北京钢研高纳科技股份有限公司

激光选区熔化技术(SLM)是一种金属增材制造技术,可高精度、高效率、低损耗的制备结构复杂的金属构件,其中时效强化型高温合金是最早应用该技术的材料之一[1-5]。为了深入理解 SLM 制备过程中,材料在复杂热行为作用下的固态相变行为,为材料微观组成预测及性能优化提供可能性,本文通过耦合等效微区热源模型及非等温 Johnson-Mehl-Avrami 相变模型,开发了一个“热-冶金”耦合高效计算模型(TMMF)。借助 TMMF 研究了 SLM 制备 IN738LC 高温合金(主要包含 γ 基体和 γ' 析出相)时,材料的温度演化、相变动力学行为及关键工艺参数对相变行为的影响。研究发现:打印过程中,依据材料峰值温度与 γ' 相变温度区间的相对大小,可将 SLM 工艺中固态相变过程分为三个阶段,分别为析出-回溶阶段、析出阶段及稳定阶段,其中析出阶段 γ' 相体积分数变化比例最高;打印结束后,材料内 γ' 相呈不均匀状态分布,且分布与所在的层数及道数有关,此外, γ' 相体积分数与激光扫描功率成正比,而与激光扫描速度和扫描间距成反比。本研究中 TMMF 模型中的温度子模块通过文献报道的实验数据进行了验证。



SWRH82B 盘条轧制过程和风冷过程有限元模拟及参数优化

曹东东、唐正友、丁桦、邓通武、崔峰、唐伟、曾敏

东北大学材料科学与工程学院

东北大学辽宁省轻量化用关键金属材料重点实验室

攀钢集团研究院有限公司

钒钛资源综合利用国家重点实验室

为了准确控制 SWRH82B 盘条在 880℃ 时的吐丝温度和冷却速度，本文采用 DEFORM 和 ANSYS 有限元分析软件分别对轧制过程和风冷过程进行了模拟。模拟结果表明，在轧制过程中的水冷阶段，水冷 1 至水冷 5 的对流换热系数分别为 1N/s/mm/℃、1N/s/mm/℃、1N/s/mm/℃、1N/s/mm/℃ 和 0.85 N/s/mm/℃，吐丝时盘条心部的平均温度约为 909.75℃，表面温度约为 880.5℃，二者温差为 29.25℃。在风冷过程的模拟中，当前四台风机的佳灵装置开启角度为 3°，后四台风机的佳灵装置开启角度为 1.5° 时，可以实现搭接和非搭接区域盘条表面温度基本一致，温差在 6℃ 以内。随着初始辊道速度的增加，搭接区域各盘条表面的温度差先减小后增加，在初始辊道速度为 0.70m/s 至 0.75m/s 之间时，盘条表面温差达到最小，此时对应的盘条间距在 73.90mm 至 79.18mm 之间，能获得搭接区域较为均匀的冷却速度。通过对 880℃ 吐丝工艺的优化模拟，结果表明可获得索氏体率达 92%，网状渗碳体小于 1 级，心部马氏体小于 0.5 级的 SWRH82B 组织。

不锈钢粉床熔化增材制造工艺过程模拟与性能预测

尹海清、吴灵芝、张瑞杰、张聪、王国伟、王永伟、雍兮、刘赓、苏杰

北京科技大学

中国工程物理研究院

钢铁研究总院

增材制造技术因其具有制造周期短、近净成形及性能优异等特点，已成功应用于钛合金、不锈钢、铝合金等先进材料的零件生产。增材制造过程极快的加热和冷却速率以及循环相变的特点，其涉及的影响因素复杂。本研究拟基于材料集成计算及材料基因工程的思想探索高性能不锈钢粉床融化制备过程，围绕缩短研发周期、降低研发成本的需求，突破大成分空间的成分设计、跨工序的组织演变与性能预测，构建高性能材料设计服务平台，实现机理模拟+少量验证的新品种设计与优化。搭建的增材制造高性能特殊钢集成计算平台，实现了高性能马氏体不锈钢的高性能、无打印裂纹缺陷的材料成分优化筛选、氧化物在熔池中的行为及其作用机理，打印全流程的温度场模拟，熔池的融化与凝固过程组织演变，及固态循环相变的微观组织场的耦合模拟。揭示了增材制造过程高的氧含量提升力学性能的机理及调控氧行为的元素筛选，以及工艺参数变化对微观组织演变的作为机理，为低成本增材制造用粉末的研发和增材制造高性能不锈钢产品的性能全局优化提供理论依据。

关键词：粉床融化、增材制造、不锈钢、集成计算、氧化物



计算设计 Al-Mg-Si 铝合金成分优化全流程热处理工艺

赵圆杰、李俊

昆明理工大学

成分优化与热处理工艺协同改进，以提升铝合金性能和节约能耗是当前主要的科学和工程热点。6系铝合金中，Mg、Si、Fe、Mn等元素间的交互作用对AlFeSi相的变体和Mg₂Si的亚稳强化相间的转变具有重要的影响。本论文针对Al-Mg-Si合金通过热力学和动力学计算，研究了Mg、Si、Fe、Mn元素对β-AlFeSi和Mg₂Si亚稳相的相转变影响规律，并通过实验对计算结果进行了验证和分析。计算结果表明，Si、Fe、Mn元素对β-AlFeSi的热力学转变具有重要的影响，并且3个元素间存在显著的交互作用。此外，发现Si元素含量不仅对Mg₂Si相在均匀化和固溶热处理过程中的回溶完全与否具有重要影响，同时相比较Mg元素而言也对亚稳相的析出影响更为显著。实验验证表明，热处理过程中的相转变过程及力学性能的计算结果和实验结果吻合较好。



镁合金轮毂锻造成形有限元模拟研究

廖启宇、乐启焱、蒋燕超、丁桦

东北大学

镁合金轮毂是实现汽车轻量化的重要零部件，目前国内镁合金轮毂大多通过一次锻造成形，但存在成形差、组织与力学性能一致性与稳定性差等问题。而有限元数值模拟是了解成形过程、优化模具结构与成形工艺高效且便捷的手段。因此，本文以锻造轮毂常用 AZ80 镁合金为材料，建立本构模型与再结晶模型，对轮毂锻造成形过程的物理场、组织场进行研究，进而优化模具结构和成形工艺，实现镁合金锻造轮毂的细晶且高成形制备。首先，对轮毂成形过程金属流动制约处进行模具优化，增加金属流动速度。其次，利用固定点和流动点追踪，对轮毂成形全过程全区域的温度场、速度场、应力场以及组织分布进行研究，厘清轮毂成形过程工艺与组织之间的关系。再次，采用多级变速的方式对轮毂成形工艺进行优化，针对轮毂不同部位的物理场与组织场特点，在成形特定节点进行变速处理，进而达到组织细化与均匀性。最后，在最佳工艺条件下，进一步对坯料形状进行优化，采用圆台形坯料结构形式，与圆柱形坯料相比，圆台坯料可以提高有效应变、动态再结晶体积分数，细化轮辐和下轮缘处晶粒。同时，圆台形坯料还可以提高轮缘的流动性，使轮缘填充更容易，并降低上轮缘的开裂倾向。



基于第一性原理计算的抗氢材料设计及优化研究

米志杉、杨丽、苏航

中国钢研科技集团有限公司

氢能由于其来源广泛、清洁环保、热值高、可再生等优点，被誉为最具有发展潜力的二次能源，能够助力碳达峰和碳中和的目标实现。高强钢在高压氢储运方面有着广泛应用，但是钢的强度越高，氢脆敏感性越高。目前钢铁材料的氢脆机理尚未明确，值得进一步探索。在本报告中，利用第一性原理计算方法，研究了在 BCC 铁晶格和晶界处不同合金元素与氢的相互作用，在表面掺杂合金元素对氢吸附解离的影响，以及析出相作为氢陷阱的氢捕获行为，为抗氢脆材料的设计提供了理论支持。



含 Nb 齿轮钢高温渗碳淬火变形数值模拟

贺笃鹏

中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心

渗碳淬火变形是齿轮制造过程中经常遇到的问题，变形严重时会影响到齿轮合格率、精度等级。热处理变形方面的研究较多，但对于近些年才推向商业应用的高温渗碳淬火的变形规律研究较少，尤其是通过数值模拟的方法研究高温渗碳淬火过程中涉及的碳扩散、温度场、相变场、以及应力应变场。高温渗碳淬火变形是一个多工序多物理场问题，单纯的试验方法很难全面研究渗碳淬火复杂的变形演变机理。为了研究高温渗碳热处理的过程，本文将以 18CrNiMo7-6 齿轮钢 C 型缺口试样为对象，建立了渗碳淬火过程的扩散模型、传热模型、相变模型、变形过程中的本构模型，研究了 980℃ 渗碳淬火过程中的碳扩散、温度场、相变场、应力应变场的演变规律，对最终渗碳淬火变形进行了预测。主要结论如下：

(1) 建立了高温渗碳淬火多工序多场耦合有限元模型，并与实测的变形结果对比，吻合度较高，该模型能够较为准确的预测高温渗碳淬火热处理变形。

(2) C 型试样缺口位置与试样厚端心部位置在淬火 5s 时温差最大，此时热应力导致的变形相对较大；试样厚端心部位置开始马氏体转变的时间约为 18s，马氏体转变到 50% 的时间约为 30s 左右，心部马氏体含量为 95.4%；试样缺口末端位置基本无残余应力，残余应力主要集中在心部位置，约 320MPa；

(3) C 型缺口试样渗碳淬火时热应力和马氏体相变应力交互作用，导致 C 型缺口张开位移呈现先增后降再增加的变化趋势，在心部马氏体含量为 50% 时缺口张开位移最小。



基于微结构的析出强化镍基超合金蠕变断裂寿命预测

胡佳楠、Zhanli Guo、Nigel Saunders

Sente Software Ltd

Thermotech Ltd

镍基超合金因其在高温下的高强度，已被广泛应用于飞机发动机和燃气轮机等工业当中。对于其材料的蠕变强度的提高和断裂寿命的评估与预测一直是这些超合金设计和工业应用中的关键问题之一。由于经常缺乏相关的长期材料服役数据，蠕变断裂寿命的评估与预测通常基于经验外推方法（如 Larson-Miller 方法[1]）使用加速蠕变断裂试验的短期或中期数据来进行。这些外推方法的一个显著缺点是未能考虑材料在高温服役条件下的微结构演变，从而可能导致不够准确的寿命预测。此外，如果在评估与预测过程当中还涉及合金材料设计，继续使用这些非常依赖于短期试验数据的外推方法将会非常昂贵。本研究将微结构的演变，特别是 γ' 和/或 γ'' 析出相的熟化过程[2]，纳入到了镍基超合金的蠕变断裂计算中[3]，提出了一种基于 Monkman-Grant 模型的损伤累积方法。通过这种微结构建模方法，既可以研究材料力学性能在高温下的演变，还能提供更可靠和一致的蠕变断裂寿命及强度预测。预测结果与广泛的商业镍基超合金的短期和中期蠕变断裂寿命的实验结果达成了良好的一致性。通过与一些使用外推方法得到的长期蠕变断裂寿命的比较，进一步展示了该方法的可靠性与实用性。



先进储能与节能轻合金设计

李谦

重庆大学

储能和节能是全球能源转型发展的重大战略，先进轻金属材料是实现高效安全储能和节能的有效途径和必然选择。镁基储氢材料和铝基结构材料的开发，面临的共性科学问题是多元系中关键相及界面的调控，报告围绕先进轻合金中关键相/界面稳定性和多因素耦合条件下相转变动力学的共性科学问题，提出了多元多相体系热力学及热物化性质预测方法和多因素反应过程动力学新模型，阐明了镁基多元系中储氢相的稳定性及氢化反应机理和铝硅合金细化剂抗毒化机理和变质剂抗毒化机理，突破了高容量镁基储氢合金寿命短的关键行业瓶颈，攻克了汽车动力总成等关键铸件用高硅铝合金细化剂的硅致失效和细化剂-变质剂毒化的卡脖子问题，形成多项原创性技术原型。



通过添加少量铟实现对 Sn-0.7Cu 焊料/Cu 基板界面处金属间化合物的生长调控

杨安仓

昆明理工大学

由不均匀原子扩散引起接点处金属间化合物(IMCs)层孔洞缺陷导致连接失效严重制约了 Sn 基焊料的发展。本次工作通过添加少量的铟(In)改善了 IMCs(高温 η -Cu₆Sn₅ 相和 Cu₃Sn)的热力学稳定性进而成功的获得了厚度适中、缺陷浓度少且界面结合稳定的 IMCs 层。提出了一种在掺杂合金元素情况下关于 IMCs 层新的、系统的生长模式。最终,利用第一性原理计算方法进一步阐明了 In 掺杂对 η -Cu₆Sn₅ 相和 Cu₃Sn 的生长调控机理。

7050 铝合金高温拉伸过程中微观组织的演变和析出相的长大/溶解行为

吴开俊、卜恒勇

昆明理工大学

7050 铝合金作为高强度铝合金的代表，因其合金化程度高、重量轻、耐腐蚀性好等优点，被广泛应用于航空航天、轻量化汽车、铁路运输等领域。对于具有高层错能的铝合金，热变形条件下表现出不同的软化机理，如动态回复（DRV）和动态再结晶（DRX），许多学者已经证明了 7 系铝合金中的非连续动态再结晶（DDRX）、连续动态再结晶（CDRX）和几何动态再结晶（GDRX）。然而，不同变形条件下的软化和再结晶机理尚存争议。由于 7050 铝合金高温变形过程复杂析出溶解行为，如动态沉淀（DPN）、动态回溶（DPR）和沉淀的 Ostwald 熟化，对调整铝合金显微组织和提高性能方面发挥着重要作用。然而合金在高温拉伸过程中析出相的变化却鲜有人研究，不能简单的将变形和热处理叠加和组合，而忽略二者的相互作用。对 7050 铝合金在不同温度和不同应变速率下进行了高温拉伸试验。利用 EBSD 和 TEM 对微观结构和析出相的演变进行了表征。结果表明，变形温度和应变速率对软化机制和析出行为有显著影响。DRV 在不同变形温度下发生，633 K 时，应变速率在 0.1 s^{-1} 时 DRV 为主要的软化机制， 0.01 s^{-1} 和 0.001 s^{-1} 发生 DDRX；673 K 及以上温度时 DDRX 和 CDRX 同时发生。 $\text{-Mg}(\text{Zn}, \text{Cu}, \text{Al})_2$ 在升温过程中其数量在逐渐降低，而尺寸表现为先增加后减少， $\text{-Mg}(\text{Zn}, \text{Cu}, \text{Al})_2$ 相经历了长大又回溶的过程。 $\text{Al}_2\text{CuMg}(\text{S})$ 相在此过程中持续长大，S 相沿着 $[010]\text{Al}$ 和 $[001]\text{Al}$ 方向生长，由于位错诱导析出导致高的生长速率，S 相在析出长大过程中平均尺寸异常粗大。



第二相对 Al-Zn-Mg-Cu 铝合金再结晶行为的影响

黄仁松、郑善举、李萌藁、孙鹏、杨洪福

昆明理工大学

研究探讨了第二相对 Al-Zn-Mg-Cu 铝合金再结晶行为的影响，结果表明：初始组织主要由 Al 基体、Al₇Cu₂Fe、Mg(Zn, Al, Cu)₂、 η [Mg(Zn, Al, Cu)₂] 和 Mg₂Si 相组成。其次，变形参数对 Al₇Cu₂Fe 相含量影响甚微。在 270 °C 至 430 °C 温度范围内，二次弥散沉淀相含量主要受沉淀、粗化和溶解过程的影响。在 470 °C 时，第二相的面积分数主要由初生 η [Mg(Zn, Al, Cu)₂] 相的溶解过程决定。此外，还揭示了二次弥散析出相与连续动态再结晶（CDRX）和非连续动态再结晶（DDRX）机制的相互作用机制，这为通过第二相与再结晶的关系来细化晶粒尺寸提供了有价值的视角。



Al-Mg-Si 合金热压缩过程中的动态再结晶行为研究

孙鹏、郑善举、李萌蕻、黄仁松、杨洪福

昆明理工大学

本文结合选区电子衍射（SAED）、透射电子显微镜（TEM）、扫描电子显微镜（SEM）和电子背散射衍射（EBSD）技术，研究了 Al-Mg-Si 合金热压缩过程中的动态再结晶行为。目的是阐明 Mg₂Si 对热变形过程中再结晶的影响以及潜在的动态再结晶（DRX）机制。结果表明，在 450° C/0.001 s⁻¹ 的变形条件下生成的立方晶系 Mg₂Si 促进动态再结晶。此外，在热压缩过程中，观察到三种 DRX 机制，即连续动态再结晶（CDRX）、不连续动态再结晶（DDRX）和几何动态再结晶（GDRX）。在上述机制中，相比于 GDRX，CDRX 需要更高层次的亚晶粒旋转形成晶粒。我们的研究首次讨论了立方晶系 Mg₂Si 对再结晶的影响。同时，我们进一步研究了 CDRX 和 GDRX 形成过程中的亚晶粒旋转行为。这些研究对理解 Al-Mg-Si 合金的热压缩行为具有重要意义。



均匀化 4047 铝合金热变形行为及本构模型研究

程前、黄仁松、张柳、郑善举、李萌藁

昆明理工大学材料科学与工程学院

本文以 4047 铝合金为研究对象，首先探索了 4047 铝合金的均匀化热处理工艺及微观组织演变。结果显示：铸造态 4047 铝合金的显微组织主要包含 α -Al 枝晶、多角形初晶 Si 相、细针片状共晶 Si 相以及 β -Al₅FeSi 相。在均匀化热处理过程中，均匀化工艺引发了部分亚稳态相（多角形初晶 Si）的溶解和细针片状共晶 Si 的改性。再利用 Gleeble-3500 热模拟试验机对均匀化态 4047 铝合金进行了不同应变速率、不同变形温度下的热压缩实验。同时基于实验，利用 Arrhenius 双曲正弦函数、应变补偿方程和深度反向传播神经网络（DNN），建立了 4047 铝合金热压缩状态下的本构模型。并将两者预测结果进行比较，可以得出，DNN 模型对 4047 铝合金热变形行为的预测精度优于应变补偿的 Arrhenius 模型。对于在 300-450° C, 0.01-10s⁻¹ 范围内的 4047 铝合金，应变补偿的 Arrhenius 本构模型的精度相对较低。因此，体现了 DNN 模型在热变形实验中预测精度的优越性，可以为科研、实践以及生产，提供一些理论性的指导。



集成计算材料工程在大型铸锻件热加工中的应用

杨康

天津重型装备工程研究有限公司

大型铸锻件产品具有材料种类繁多、产品形状各异、制造工序多、制造周期长、产品质量不稳定等特点，采用传统的研发方法和模式已经不能适应产品快速迭代的需求，也不能满足高质量发展的要求。应用集成计算材料工程的方法，综合利用材料计算、实验模拟和仿真模拟的手段，在大型铸锻件的新材料研发、新产品开发、工艺优化、质量提升等方面发挥了积极、重要的作用。以对某支承辊的淬火工艺进行优化为例，进行了温度-组织-应力的三场耦合分析，得到了淬火过程中的温度、组织及应力的变化规律，对淬火温度、淬火时间及回火初期的保温时间等工艺参数进行了优化，计算结果表明该轧辊的合理的淬火温度应为 850℃、油淬时间为 6h，回火初期的保温时间至少为 9h。



不同奥氏体化温度对核压力容器用 SA508 Gr. 4N 钢马氏体转变的影响

陆书萌、郑善举、李萌蕻、吴亚茹、杨洪福

昆明理工大学

为了探究不同奥氏体化温度对核压力容器用 SA508Gr. 4N 钢马氏体转变的影响，设定了不同奥氏体化温度以研究不同实验条件下的马氏体转变，分析了再奥氏体化过程和马氏体相变完成后的晶界特征、显微组织、转变动力学与马氏体相特点，结果表明：不同奥氏体化温度对再奥氏体化相变临界温度影响不大，晶粒尺寸随着奥氏体化温度升高而增大；经不同奥氏体化温度处理后，相组成主要为板条马氏体和少量残余奥氏体，RA 主要呈粒状分布于马氏体板条间； M_s 温度随奥氏体化温度的升高先减小后增大，而 M_f 对奥氏体化温度变化并不敏感；随着奥氏体化温度的升高，板条马氏体组织平均尺寸增大，变体的选择倾向增大，但始终满足相变过程中界面能和体积应变能尽可能低的原则。



铝合金热成形过程的集成计算

李大永、刘如学、周国伟

上海交通大学

铝合金热成形过程涉及多尺度问题，如宏观塑性变形、细观组织演化和再结晶、微观位错运动和第二相作用等。依赖类比设计和经验设计的工艺设计开发周期长，成本高。随着计算技术的飞速发展，材料集成计算工程（Integrated Computational Materials Engineering, ICME）受到越多关注，逐渐成为材料设计、工艺调控和性能评估的重要模拟手段。以材料微观结构信息为起点，通过多尺度、全流程的建模与仿真实现对材料制备加工、微观结构和产品性能的一体化分析，建立工艺-组织-性能之间的对应关系，成为材料加工领域的一个重要发展方向。

本项研究以铝合金为研究对象，针对其挤压型材制造中的组织预测难、粗晶抑制难和形性控制难等问题，借助实验表征、理论分析和建模仿真等手段，确立热变形中动静态再结晶机制及其与宏观热力外场和微观第二相、位错演化内在联系，建立塑性变形-再结晶-晶粒长大的多尺度模拟方法，实现材料变形、组织演化与力学响应的协同计算，为其成形性制造提供理论和方法支撑。

通过开展热变形基础实验，研究铝锂合金热变形与动态再结晶的宏微观机制，建立变形-动态再结晶热力耦合计算模型；分析变形历史与第二相对固溶组织演化的影响规律，静态再结晶与晶粒粗化计算模型；建立铝合金型材挤压成形的宏观有限元模型，集成细观晶体塑性、元胞自动机、动静态再结晶物理模型以及反映位错密度演化和第二相作用的微观计算模型，实现热加工过程的塑性变形-力学响应-组织演化联合计算。



激光清洗辅助铝合金丝粉协同电弧增材制造工艺与机理

孟云飞、陈辉

西南交通大学

由于环境风会对电弧燃烧和熔滴过渡造成干扰，使得铝合金电弧增材制造（WAAM）在野外环境中难以应用。本文通过同步填充 AlSi5 丝材与 90Mg-5TiO₂-5NaF (wt.%) 混合粉末，形成气-渣联合保护来改善这一问题。结果表明，WAAM 薄壁墙稳定沉积的抗风能力可从 1.5 m/s 提高到 3.5 m/s。Mg 粉加入使沉积组织晶粒细化达 21%，并促进形成新的 Mg₂Si 增强相，通过固溶-沉淀强化效应提高了沉积件的力学性能。而且，在激光清洗的辅助下，当环境风速为 3.5 m/s 时沉积薄壁墙的气孔率从 54.9% 降低到 28%。综合作用下，新工艺下沉积薄壁墙的抗拉强度和延伸率提高到 166 MPa 和 3.7%，分别达到室内无风环境下 WAAM 的 98.2 % 和 31%。



镁合金多元固溶鸡尾酒效应和材料集成设计与应用

袁媛、陈涛、王俊、陈先华、汤爱涛、潘复生

重庆大学

镁及镁合金具有密度低的特点，在航空航天、交通运输和其它需要减重的领域具有巨大的应用前景。然而，由于镁合金的室温延展性和耐蚀性能较低，镁合金的大规模生产和应用仍然受到很大限制。合金化是改善镁合金综合性能的有效方法之一，合金元素主要存在于第二相和镁基体相中。特别地，镁基体相为镁合金中最主要的相，与镁合金的性能直接关联。基于研究发现，镁基体相中的多合金元素固溶可能会带来鸡尾酒效应，并提供优秀的综合性能。

在本项工作中，我们系统地计算了合金元素对镁基体相晶格参数、固有物理和化学性质的影响，并提出了合金元素本征特征性质与镁基体相固溶度之间的关联特征。基于两种合金元素在镁基体相中的固溶行为进行了热力学计算，发现两种合金元素在镁基体相中的固溶行为的典型特征，如图 1 所示[3]。结合固溶行为特征以及镁合金中各种性能与基体相之间的物理关系，提出了多目标性能镁合金的基本合金设计准则，如图 2 所示。根据这一设计理念，成功设计出了超高阻尼 Mg-Sn-Y 合金和低降解率 Mg-Sr-Y 合金。



多元镁合金凝固过程枝晶偏析模拟研究

张昂

重庆大学

凝固是铸造镁合金成形的关键过程，在此过程中由于溶质再分配产生的枝晶偏析，会恶化产品的力学性能和可加工性。本报告针对多元镁合金偏析缺陷，以 AZ91 和 VW92 两种典型的商用镁合金为研究对象，开发了多元镁合金偏析缺陷多尺度数值模拟架构，研究了偏析缺陷的微观形成机制。首先对多元镁合金枝晶偏析相场模型进行了参数分析和实验验证，然后开展了多元镁合金枝晶偏析相场模拟研究，分析了不同温度条件对多元镁合金枝晶偏析的影响，研究了不同合金元素（非稀土和稀土、三元和四元）的偏析差异。研究结果对于深入理解偏析形成机制，指导偏析控制和提升镁合金产品的性能具有重要意义。



基于时序图神经网络的跨尺度晶体塑性建模方法

胡袁哲、刘如学、周国伟、李大永

上海交通大学机械与动力工程学院

上海交通大学船舶海洋与建筑工程学院

近年来，数据驱动方法在各种材料的本构建模中取得了迅猛发展，能够准确学习材料复杂的弹塑性行为，并表现出卓越的计算效率。在晶体塑性领域，现有的数据驱动本构模型仍处于发展初期，无法考虑晶粒的各向异性，极大限制了其对多晶变形响应和局部效应的准确分析。为此，当前工作提出了一种基于时序图神经网络的晶体塑性代理模型，用于预测复杂加载条件下细微观尺度的多晶变形行为，并在模型构建中纳入了微观结构演化和晶粒局部作用。在此模型中，图数据结构用于描述多晶的代表性体积单元（RVE），从而在建模中引入晶粒的空间连接关系、各个晶粒的晶体取向和变形状态。具体而言，该模型首先使用图神经网络捕捉多晶变形中的空间特征，随后将提取的特征输入时序神经网络以捕捉变形的历史信息，从而实现对 RVE 中各晶粒变形状态的追踪。为产生高质量的训练数据，在多种加载条件下对 RVE 进行了晶体塑性有限元模拟。所提出的网络模型可在循环加载和任意加载等复杂变形条件下，准确高效地同步预测晶粒尺度和 RVE 尺度的应变-应力响应和织构演化。预测所得的单晶平均应力误差低于 1.5 MPa，取向偏差小于 2° ，并且模型具有自洽性，即预测结果独立于加载路径的应变增量划分。



双金属环件短流程铸辗复合成形界面结合行为研究

秦芳诚、何亚琛、崔予馨

桂林理工大学

短流程铸辗复合成形技术是制造航空航天、汽车和石油化工等重大领域双金属环件的先进成形技术。基于 ProCAST 宏微观数值模拟研究发现，提高内层浇注温度有利于外层 40Cr/内层 Q345B 双金属环坯界面的冶金结合；内层浇注温度 1600 °C 和间隙时间 221 s 时的界面有效应力为 39.35 MPa，缩松体积为 133.30 cc，冶金结合高度为 100.917 mm。双金属环坯离心铸造实验表明，结合界面无明显分界线，以小角度晶界为主，沿结合层的中间高度区域平均晶粒尺寸最大，平均剪切强度为 258.86 MPa，剪切断口为典型脆性断裂和韧性断裂。



材料数字化研发-从小模型到大模型

苏航

中国钢研科技集团有限公司

摘要：计算和数据是材料创新性研究的两大基础资源。建立了材料多尺度公网云计算平台 Material-DLab，众筹开发了 1150 多个材料 APP，可以实现从原子到微观组织、到宏观性能的全尺度计算支持。开发了全自动机器学习工具 MARS，集成了 20 多种机器学习算法和自主开发的可视化分类图算法，可以实现数据清洗、AI 建模到 GA 优化的全流程自动运行。在此基础上利用国产开源大模型探索了 AI 智能体在自动相图计算中的应用。



有序 3D 微结构对 Cu-Cr 触点材料电学性能的影响

单历元、苏旭明

浙大城市学院

高 Cr 含量 (≥ 25 wt.%) 的铜铬 (Cu-Cr) 系合金具有较大的分断电流能力、较强的抗电弧侵蚀能力, 是目前最重要的中、高压大功率真空开关触头材料之一。低电弧腐蚀速率与低接触电阻是中、高压电器开关对触头材料的二项基本要求。随着智能时代的到来, 高可靠和低成本的要求越来越高, 传统的 Cu-Cr 触头由于电弧侵蚀造成的组织退化问题极大限制了此材料在高端制造领域的大规模应用, 也是大功率真空开关失效的主要原因之一。采用 3D 打印技术制备了有序 3D 微结构的 Cu-Cr 触点材料。根据数值模拟结果, 电导率的变化情况主要有: (1) 改变层内 Cr 纤维距离 a 对电导率的作用效果更加明显; (2) 在具有相同 Cu 体积分数的情况下, 即相同层内纤维间距, 层间距大的结构比层间距小的结构电导率更大; (3) 横向电导率对层间间距十分敏感。



Sn-0.7Cu 型多元合金焊料成分-组织-性能的多尺度 模拟计算与研究

段永华

昆明理工大学

通过构建特殊成分的金属间化合物(IMCs)连接层是一种提高当今电子元器件互联可靠性的有效策略。然而,多组元合金成分设计在以往的研究过程中往往需要很长的试验周期和花费大量成本。近年来,随着计算材料科学技术在各个领域的快速发展,使得多尺度模拟计算相结合方法在开发新型材料方面被广泛关注。在目前的工作中,我们使用高通量筛选方法成功地制备了一种成分为 Sn-0.7Cu-0.175Pt-0.025Al (wt.%) 新型四元合金焊料,结果表明该焊料具备优异的焊接性能,对 IMCs 层的生长抑制率高于 40%。此外,利用原子分辨率成像技术和先进数据信息学探索了不同合金原子的取代位点,实验结果与计算结果十分吻合。结合第一性原理计算和分子动力学模拟方法,探索了 IMCs 的机械性能。综合研究表明,多尺度模拟为开发新型合金焊料提供了重要的指导。



不同均匀化时间对 7075 铝合金力学性能的影响

陈凤凤

昆明理工大学

采用光学显微镜（OM）、扫描电子显微镜（SEM）、能谱仪（EDS）、X 射线衍射仪（XRD）、透射电子显微镜（TEM）、硬度测试和拉伸测试等方法研究了 465℃ 均匀化温度和不同均匀化时间（6h/12h/24h/36h/48h）对 7075 铝合金铸态组织形貌和力学性能的影响。结果表明，在均匀化的初始阶段，随着 Zn 的扩散，连续的亮白色网状 σ -Mg(Zn, Cu, Al)₂ 相向白色断絮状 S-Al₁₂CuMg 相转变。在中间阶段，S-Al₁₂CuMg 相溶解，Cu 元素不断扩散到 Al₁₇Cu₂Fe 中，并伴随着大量的纳米级 MgZn₂ 相的析出。随着均化时间的延长，Al₁₇Cu₂Fe 和 MgZn₂ 相发生粗化。合金的强度和塑性呈现先上升后下降的趋势。当均化时间为 24 小时时，极限抗拉强度（UTS）、屈服强度（YS）和伸长率分别达到 231.1MPa、134.2MPa 和 4.0%，并且达到了峰值。7075 铝合金均匀化过程中相的转变和溶解机制为提高合金的力学性能提供了科学的理论依据。



大型柱状工件热处理升温规律研究

马祎炜

天津重型装备工程研究有限公司

结合实际热处理时的测温数据，确定了热处理模拟的适用参数。模拟研究了不同尺寸（ $\phi 1600\sim 2200$ mm）和不同装炉数量（1~4个）柱状工件热处理时的温度场。结果表明，多个工件同时热处理时，工件内部升温最慢的位置会偏向相邻的工件；多个工件堆叠放置时，升温速度明显变慢，但装炉数量越多，平均一个工件的热处理加热总时间越短；工件的热处理保温时间与直径呈线性关系，直径越大，所需保温时间越长。



铁电材料机电耦合效应的理论研究

朱胤宁

四川大学

在凝聚态物理学中，铁电材料有着十分重要的意义，它具有自发极化和压电等独特性质。它们被应用于电容器、传感器、存储设备、致动器和医学成像等领域，展示了它们在各个技术领域的多功能性和重要意义。我们将探讨一种很常见的铁电材料—钙钛矿结构 ABO_3 。本文研究的晶胞为四方晶相。本文基于的理论是由共价键排斥能等产生原子位移的畸变，这会影 响铁电和压电特性。机电耦合系数很大程度上影响决定了能量转换的效率。通过数学方法和物理理论 的结合，我们建立了一个内聚能理论模型，其中总能量包括短程斥能、共价能和马德隆能。该模型考虑了 O 离子和 B 离子的位移，这使得结构具有铁电性。除了位移，结构的晶格常数也是我们实验模型中的变量。我们建立了二维和三维的数学模型，分别分析了在这两种情况下的各种参数变化情况。在二维情况下，我们只考虑 B 离子的位移，并为此建立内聚能理论模型。在三维情况下，我们不仅考虑了 B 离子的离子位移，还考虑了 O 离子的离子位移。除了介电常数等重要参数的分析，我们主要分析了机电耦合因子的变化情况，发现增加 A 的离子半径或 $B-O$ 的共价键都可以提高机电耦合因子。此项工作的重要性在于，它解释了机电耦合系数的物理根源，并为提高机电耦合系数提供了理论支持。



5xxx 系铝合金焊丝成分设计及其焊接模拟

左汉宁、王耀超、杨书汉

昆明理工大学

昆明大律科技有限公司

本研究首先通过 CALPHAD 相图计算方法及 DOE 实验设计方法，从焊缝金属成分出发，对铝合金焊接常用的 5xxx 系铝合金焊丝成分进行设计优化，得到了更适合焊接 6082 铝合金母材的焊丝成分。随后，通过 ABAQUS 进行了铝合金 P-MIG 焊接过程的数值模拟研究，分析了高斯、双椭圆复合热源下不同热输入对焊缝组织和性能的影响，同时建立了热输入与焊缝组织转化及性能的关系模型。实验验证结果显示，模型预测的焊缝组织和性能与实验结果吻合度良好。本研究工作可为焊丝成分设计优化及焊接工艺的调控提供一定的指导。



外场对 6082 铝合金时效处理过程位错与组织变化的影响

陈建伟、起华荣

昆明理工大学

对固溶态(SS)6082 铝合金进行常规时效(CAT)及施加外场的时效(UVAT)两种实验,拉伸实验结果表明,与CAT工艺相比,UVAT工艺能够更有效的提高铝合金的性能,UVAT处理3h的试样延伸率为16%,极限抗拉强度为329MPa,屈服强度为268MPa,与常规时效处理3h的试样相比,延伸率略有下降,极限抗拉强度、屈服强度分别提高了12%、54%,其性能已经非常接近常规时效处理10h的试样。显微组织结果表明,UVAT可以促使位错生成及运动、细化晶粒及加快第二相的析出,在这个过程中位错密度随着时间的延长先升高后降低,UVAT处理3h后,晶粒尺寸从 $10.24\ \mu\text{m}$ 降低到了 $6.49\ \mu\text{m}$,析出的 β'' 相分布弥散、数量较多,这种微观演变是性能提升的主要原因。

格子玻尔兹曼方法模拟不同固液密度比条件下液滴凝固与热流耦合规律

吴鹏霄、李栋、韩青有、孙东科

东南大学

液滴凝固现象广泛存在于自然界与工业生产中，如喷涂、激光焊接和增材制造等领域。在凝固过程中，固液密度差异将显著影响液滴的凝固特性，同时这一过程涉及复杂的动态相变和传热过程。因此，深刻理解固液密度差异对液滴凝固过程的影响机制具有重要意义。本文建立了一种考虑液滴凝固过程中液固体系体积变化的热流耦合格子玻尔兹曼模型(Lattice Boltzmann Model, LBM)，其中液相流动与界面演化基于自由表面 LB 方法求解，热传导与固液相变通过宏观焓方程描述并采用总焓 LB 法求解。该模型特别考虑了固液密度差异对凝固过程与最终形态的影响。通过 Stefan 问题与冷壁面液滴冻结算例的模拟结果同基准解和文献结果进行比较，验证了模型和算法的正确性。结果表明，固液密度比小于 1 和大于 1 会分别导致凝固后的液滴顶部出现锥形和平台，这同实验观察到的现象相吻合，并且凝固时间随着密度比的增大会逐渐减小。随后，进一步研究了接触角和底板温度对凝固过程及三相接触线演化进程的影响。结果表明，在液滴体积一定时，凝固时间随着接触角的增大而显著增长。而不同底板温度则在影响凝固速率的情况下不改变最终液滴形态，表明液滴凝固后的特殊形态同凝固速率的无关性。本研究为理解液滴凝固过程提供了新思路，并提出了一种有效的数值模拟方法。



稀土对马氏体时效钢动态再结晶行为影响的实验研究和有限元模拟

张宇轩、王海燕

内蒙古科技大学

马氏体时效钢作为超高强度钢的一种，因具有超高的强度被应用于汽车工业、航空航天和国防军工等领域。热成型是马氏体时效钢最常用的生产工艺之一，在锻造、热轧等热变形过程中材料的微观结构与机械性能均会发生改变。马氏体钢在热变形中的动态软化机制通常为低层错能金属的动态再结晶，因此研究热变形过程中的再结晶行为以指导马氏体时效钢的生产与加工具有实际意义。本文制备了有无稀土 Ce 添加的两种马氏体时效钢，通过 Gleeble 热模拟机进行单道次压缩实验，选取压缩变形温度为 $900\sim 1150^{\circ}\text{C}$ 、应变速率为 $0.01\sim 10\text{ s}^{-1}$ 。实验结果表明，Ce 的添加提高了材料的峰值应力，并使动态再结晶的活化能上升，对动态再结晶的产生具有抑制作用。通过真应力应变曲线的分析，建立了两种钢的动态再结晶临界应变模型和动力学模型，并导入 Deform-3D 有限元分析软件，结合有限元模拟与显微组织表征，进一步探究了 Ce 对马氏体时效钢动态再结晶行为的具体影响。有限元模拟揭示了在热压缩过程中试样应力应变分布及再结晶情况，验证了 Ce 添加对再结晶行为的抑制效果。



基于物理模型与数据驱动模型的材料成形多尺度模拟

周国伟、胡袁哲、李大永

上海交通大学

材料成形过程中伴随着材料形状的变化，同时会发生显著的微观组织演化，如织构、晶粒尺寸等，多尺度模拟是实现材料成形准确调控和性能预测的关键。本文首先针对多尺度模拟中小尺度精确建模问题，主要介绍基于晶体塑性的热成形动态再结晶建模方法，以及其在热挤压热成形中的应用；随后针对多尺度模拟中计算效率与精度平衡问题，介绍基于机器学习的材料模型的建模及新应用，重点介绍机器学习建模方法在晶体塑性模拟中实现。



基于矩形通道转角约束的 Al-Zn-Mg-Sc 盒形构件挤压过程晶粒演变规律研究

赵红丽、秦芳诚、蒋际循

桂林理工大学

盒形构件是目前工业制造中常用的形状之一，它具有结构稳定、装配简便等特点，在汽车、航空、电子等行业得到广泛应用。等通道转角挤压成形是制备性能优异超细晶材料的大塑性变形方法之一。因此基于矩形通道转角约束挤压出的盒形构件成形极限大、晶粒细化程度高，这对盒形件制造质量的提高和成本的降低具有重要意义。采用 Deform-3D 有限元模拟软件，探究挤压温度、速度、摩擦系数等参数对 Al-Zn-Mg-Sc 盒形构件的晶粒演变规律。通过对比分析各参数下盒形构件的成形效果、晶粒尺寸和动态再结晶体积分数，得出 Al-Zn-Mg-Sc 盒形构件的最佳挤压参数范围。



基于离心铸造的铝镁双金属环坯结合行为模拟研究

崔予馨、秦芳诚、邓先镜

桂林理工大学

双金属环件短流程铸辗复合成形技术是制造航空航天、风力发电、新能源汽车等重大领域的先进成形技术，其关键在于，通过离心铸造工艺为热辗扩过程的稳定进行制备结合质量好的双金属环坯。以内层 AZ31B、外层 2219A1 双金属环坯为研究对象，基于 ProCAST 宏微观数值模拟研究发现，铸型转速 500r/min 和浇注间隙时间 386s 时双金属环坯的最高轴向冶金高度为 190.34mm，环坯内层缩松缩孔缺陷体积为 171.18cc。基于 Abaqus 数值模拟研究表明，初始辗扩温度 420℃、芯辊进给速度 2.2mm/s 和辗扩比 $K=1.8$ 的工艺参数下，可以实现离心铸造环坯的稳定热辗扩和内外层协调变形；同时，增大辗扩比，塑性变形更容易渗透双金属环件的径向厚度区域，有利于促进离心铸造环坯结合质量的提高。



不同成分体系低合金耐磨钢连续冷却相变行为研究

蒋际循、秦芳诚、赵红丽

桂林理工大学

与高锰钢、耐磨铸铁等耐磨材料相比，低合金耐磨钢具备更为优良的强度、韧性和耐磨性，是工程、采矿等机械产品构件的重要材料。对不同 C、Si、Mn、Cr 含量的低合金耐磨钢连续冷却相变行为进行了研究。热轧态的微观组织与力学性能表明，2#耐磨钢的塑性与韧性比 1#好，归因于 C、Si、Mn、Cr 含量的协同作用。2#耐磨钢在快冷速下仍有较多贝氏体组织，建立的 CCT 图贝氏体相区更大。本研究阐明了冷却速率与低合金耐磨钢微观组织之间的关系，分析了 C、Si、Mn、Cr 含量对低合金耐磨钢冷却相变行为和机械性能的综合影响规律。



锻造 6061 铝合金轮毂疲劳模拟研究及寿命预测

杨海金、秦芳诚、崔予馨、林涛

桂林理工大学

车轮是行驶系统的重要组成部件和安全部件，它对汽车的行驶安全性和可靠性有着至关重要的影响。采用 ANSYS Workbench 软件进行锻造铝合金轮毂的疲劳寿命预测具有重要的工程应用价值，通过研究锻造 6061 铝合金 22 寸轮毂的径向疲劳与弯曲疲劳，发现轮毂应力集中、易发生疲劳损伤部位为轮辐处；轮毂在径向载荷 27591N 的影响下，最小疲劳寿命为 174 万次，达到要求最小循环 120 万次；轮毂分别在弯曲载荷 5011N（轻载）和 7289N（重载）的作用下，各自最小疲劳为 167 万次和 22 万次，达到要求最少循环次数 130 万次和 20 万次。



双金属复合材料轧制界面结合预测模型研究

吴裕

中国核动力研究设计院

通过轧制试验，获得不同温度、变形量等条件下复合材料界面的结合情况，采用剪切拉伸方法测试界面结合强度；运用微观表征方法厘清界面结合机理，建立与界面结合 G 因子及 zhangbay 模型相关机理模型，通过本构模型建立及有限元方法模拟界面应力应变，结合实验及模拟数据，获得工艺-G 因子/ZhangBay 模型-性能的关系模型，为该类型复合材料的轧制界面结合性能预测奠定基础。



基于 CALPHAD 方法的 H13 钢 QPQT 热处理工艺设计及其对微观组织和热疲劳性能的影响

王腾飞、张竣宣、李绍宏、李俊

昆明理工大学

H13 钢因其具备良好的淬透性、强韧性和热疲劳性能而广泛应用于热锻模、压铸模、热挤压模等领域。但 H13 钢经常规热处理后组织中的马氏体板条较宽、晶粒尺寸较大、碳化物易粗化等易造成热应力集中而加速热疲劳裂纹的萌生和扩展，降低模具的使用寿命。因此，如何进一步改善 H13 钢的性能以及提高模具使用寿命以最大限度节约资源和降低碳排放已成为模具行业亟待解决的课题。本研究通过 CALPHAD 方法对 H13 钢进行 QPQT 热处理工艺设计，研究了 QPQT 处理对试验钢显微组织、力学性能和热疲劳性能的影响，揭示了 QPQT 处理后试验钢的热疲劳裂纹萌生和扩展行为。结果表明：QPQT 工艺可使奥氏体晶粒在常规调质处理基础上细化了 60%左右，马氏体板条平均宽度细化了 51%左右，并有利于在回火过程中析出更小、更均匀的碳化物。本研究为 H13 钢的性能提升和应用提供了重要的技术思路，对工程应用有一定参考价值。



不同锻造比对 40CrNi2Si2MoV 高强度钢性能和组织的影响

张柳、郑善举、李萌藁、杨雯皓、程前

昆明理工大学材料科学与工程学院

本研究将实验与有限元模拟相结合，研究不同锻造比对 40CrNi2Si2MoV 高强度钢性能和显微组织的影响。结果表明，在高锻造比下，奥氏体相峰值显著减少，而马氏体相峰值占主导地位，同时位错密度、强度和硬度增加。新生成的小角度马氏体晶粒的均匀分布使得强度和塑性增加。高强度钢在高锻造比下优异的强度和韧性主要取决于回火马氏体和残余奥氏体。高锻造比下的冲击韧性比低锻造比下提高了近 1.23 倍，极限抗拉强度提高了 1.02 倍，显微硬度提高了 2.25%，而伸长率降低了 0.65%。断口形貌分析表明，提高锻造比不仅可以确保碳化物在基体中更均匀地分散，而且可以显著提高裂纹扩展阻力，从而提高实验钢的冲击韧性。并且该研究利用了有限元软件评估锻造过程中等效应力、等效应变、温度波动和损伤进展对机械性能的影响。这项综合分析建立了一个强大的理论框架，旨在优化 40CrNi2Si2MoV 高强度钢的锻造工艺和后续热处理组织和性能。



格子玻尔兹曼方法模拟洛伦兹力作用下合金凝固熔体流动与溶质偏析机制

李栋、孙东科、吴鹏霄、李俊杰

东南大学机械工程学院

西北工业大学材料学院

利用电流的热效应熔化金属广泛应用于众多合金加工技术中，如电弧增材制造、真空电弧重熔等。电流与自感磁场以及外部磁场相互作用会产生洛伦兹力驱动对流，将对熔池中的流动和溶质偏析过程产生强烈影响。为揭示洛伦兹力对熔体流动和溶质偏析行为的影响机制，本文建立了包含对流传热、溶质输运、液固相变和电磁场计算的格子玻尔兹曼耦合模型。模型采用多松弛格子玻尔兹曼方程计算熔体流动，并耦合焓方程、溶质输运方程和电磁场方程来实现传热传质过程和电磁场分布的模拟。通过模拟多个基准算例验证了模型与算法的可靠性。随后模拟研究了 Ti-6Al-4V 合金熔池中不同强度自感洛伦兹力和搅拌洛伦兹力对流动偏析行为的影响规律。结果表明合适强度的自感洛伦兹力能够与浮力驱动对流相互耦合而减弱偏析，搅拌洛伦兹力能够驱动熔体产生绕搅拌磁场旋转的环形流动，同时能够影响平行于外部磁场的纵截面内的熔体流动过程，从而造成溶质偏析行为的改变。本研究加深了洛伦兹力对金属熔凝过程影响的理解，并为模拟电流加工金属的制造过程提供了可行的数值解决方案。



合金相中原子择优占位行为研究的必要性、方法和若干应用

吴波、乔阳、苏龙菊、钱程、孙佳文、Hamid Ali

福州大学

合金相的精细微结构与相变过程的准确表达和理解，是设计和调控合金性能的关键科学问题，也是长期悬而未决的难题。不同晶态合金相中，可能存在复杂成分和复杂结构，例如，合金组元可能包含若干种合金元素，亚晶格可能从双亚晶格到五亚晶格不等，因此合金合金元素在各个亚点阵上的占位必然存在占位倾向性（Site Preference，即择优占位）。目前原子择优占位行为的实验研究，面临成本高、分析技术复杂，迫切需要结合理论计算方法。另一方面，目前尚缺乏合理有效的理论模型和求解方法，也迫切需要建立一种普适化的研究方法，并结合必要的精准实验验证，来确定不同热处理温度下，合金元素在各个亚点阵上的占位分数等精细结构信息。本报告梳理了若干长期悬而未决的原子择优占位暨有序—无序转变行为难题，汇报了我们在探索普适化型和方法方面的新进展。采用基于晶体学结构信息的亚点阵模型，结合合金热力学和第一性原理计算，可以不受合金组元数和亚点阵个数的限制，能够对任意复杂体系的晶体构型和热力学进行有效的描述和求解。我们对一系列简单合金相、复杂合金相的微结构和性质，尤其是高熵合金四大效应进行了理论研究，我们迫切需要采用包含精细中子散射技术在内的先进实验技术，进行可靠性验证。



锆合金管材皮尔格冷轧工艺模拟仿真研究

郑策, 张士宏, 杨院生

中国科学院金属研究所

摘要: 锆合金以其优异的核性能常用于制备核反应堆燃料组件中的包壳管。皮尔格冷轧工艺是生产锆合金包壳管的关键工序, 其具有效率高、形变量大、管材尺寸精度高等优点, 但因工艺参数较多, 孔型设计复杂, 质量缺陷随轧制条件敏感度高, 因此采用数值模拟与实验技术相结合, 分析管材在皮尔格冷轧过程中的受力情况, 以及加载工况与轧制缺陷的内在关系, 以优化皮尔格冷轧技术。为了能更加准确地描述管材在皮尔格冷轧过程中的本征变形行为, 本研究采用Hi1148各向异性模型描述管材轧制过程中各向异性行为, 使用混合硬化模型外延材料应力-应变曲线准确地描述材料在大应变下的硬化行为。通过合理布置力传感器, 获得轧制过程中轧制力、芯棒轴向力以及管坯轴向力的演化过程。结果表明, 有限元模拟结果与实验测试结果吻合良好。基于验证的有限元模型, 跟踪研究了管材内壁点的剪应力变化情况, 结果发现其在单轧制周期内, 剪切应力正负方向交替变化, 内壁点经历类剪切疲劳过程, 导致管材内壁缺陷的产生, 通过剪应力疲劳实验结果获得锆合金管材低周剪切疲劳寿命预测模型, 该模型已用于实际生产过程中孔型设计及工艺参数优化。

关键词: 锆合金; 皮尔格冷轧; 本构模型; 剪切疲劳; 工艺优化



机器学习在稀土钢铁材料研究中的应用探索

高雪云、邢磊、王海燕

内蒙古科技大学

内蒙古自治区新金属材料重点实验室

稀土微合金化可以调控钢的相变、力学性能和耐腐蚀性能，逐渐成为高性能钢铁材料研发的重要手段。本文基于钢铁工业生产、实验和从头计算获得的海量数据训练机器学习模型，为立足北疆高值化应用白云鄂博稀土资源提供理论支持。本研究基于从钢铁生产企业收集的稀土钢板生产线的工业数据构建了数据集。将合金成分和热机械处理(TMCP)参数作为特征值，热轧后钢的抗拉强度作为目标变量。在此基础上，使用多种回归算法构建特征值与目标值之间的映射关系，结果表明，优化后的DNN模型能够以低于5%的误差预测抗拉强度。基于材料的热变形应力-应变曲线构建本构方程，以实现从钢铁材料热变形流变应力的再现和预测，可为热变形工艺制定和有限模拟提供支持。本文利用机器学习方法构建了稀土钢热变形本构模型，该模型与传统的ZA和Arrhenius模型相比具有显著的精确性，使快速且精细化构建热加工图成为可能。基于密度泛函理论的从头计算可以从电子结构层面获得材料的基本物理性能，但由于计算能力和成本所限，只能应用于小规模体系。本文利用从头计算获得的参考构型数据构建数据集对机器学习模型进行训练并获得多体势能模型，在此基础上实现大规模含稀土原子体系的高精度分子动力学模拟。



SA508-3 钢构筑成型动态再结晶耦合元胞自动机及晶体塑性有限元的数值模拟研究

杨幸运、仝大明、龚淼、顾剑锋

上海交通大学

动态再结晶 (Dynamic recrystallization, DRX) 对构筑成形的连接质量具有显著的影响且涉及材料非均匀变形行为及微观组织演变的相互作用。本文开发了一种通过元胞自动机 (Cellular Automata, CA) 将动态再结晶引发的微观组织转变及动态软化效应纳入材料本构特征的晶体塑性有限元模型 (Crystal Plasticity Finite Element Methods, CPFEM), 实现了 SA508-3 钢构筑成型动态再结晶过程力学响应、微观组织演化及界面愈合率等的实时预测。结果表明模拟得到的力学响应特征与实验数据表现出较好的一致性, 充分证明了本文所提出的 CPFEM 模型的准确性; 另外, 模拟结果显示由于材料的非均匀变形行为, SA508-3 钢动态再结晶形核表现出强烈的非均匀性, 在一些三叉晶界处极易优先形核; 由位错密度差驱动的晶粒生长行为可使得再结晶晶粒跨越初始界面生长消除界面, 提升界面的连接质量。



基于 CALPHAD 方法的新型钴基高温合金的成分设计及性能研究

郭翠萍、陈飞阔、李长荣、杜振民

北京科技大学

CALPHAD 方法综合利用相图与热化学实验数据、热力学和扩散动力学理论等，系统优化材料的成分、相（含亚稳相）组成、组织结构及热加工处理过程，进而改善材料性能，使得相图测定和相平衡研究真正成为了材料设计的一部分。建立一个完善、自洽的热力学数据库是 CALPHAD 方法进行成分设计以及工艺设计的基础。以 $\gamma' + \gamma$ 两相共格组织进行强化的新型钴基高温合金除基体 Co 元素外，包括了 Ni、Al、W、Ta、Ti 和 Cr 等合金化元素。应用我们组建立的新型钴基高温合金热力学数据库，结合文献报道的具有优异性能新型钴基高温合金中的 γ' 相的相分数、 γ' 相的溶解温度、 γ 相的稳定温度区间等因素，设计了四种新型钴基高温合金的成分，在固溶和时效后对其显微组织进行了观察，测量了室温、600 和 800°C 的屈服强度以及密度，并与目前商用的高温合金的性能进行了比较。



NiAl 金属间化合物变形机制的原子尺度研究

于洋、高雪云

内蒙古科技大学

超高强度钢作为一种先进钢铁材料，具备优良的机械性能，被广泛应用于各个领域。析出强化是超高强度钢中一种主要的强化方式，B2-NiAl 相作为一种超高强度钢中的析出相，它的晶格常数与 α -Fe 相近，能与其保持共格关系，起到良好的强化效果。研究 B2-NiAl 相的力学行为，对超高强度钢的生产和强化机理研究具有指导意义。本文运用分子动力学研究了 B2-NiAl 相拉伸过程中的力学性能和原子行为，在 300k 温度下模拟 B2 相在各晶向上，以多个固定的应变速率的拉伸过程。结果表明：对于 [001] 晶向拉伸，应变速率的变化几乎未对产生任何影响。在此拉伸过程中出现了 B2 \rightarrow L10 相变，对应其应力应变曲线经历了 B2 相弹性应变-失稳-再到 L10 相弹性应变的过程，该相变过程符合 Bain 关系； [011] 晶向和 [111] 晶向拉伸中未产生相变，在弹性应变阶段均保持 B2 相结构，且应力应变曲线相似；在失稳阶段， [011] 晶向拉伸出现较大规模的非贯穿无规律裂缝，模型依靠少数原子粘连维持一定的应力水平，这一应力水平随应变速率的上升而降低；在较小应变速率下， [111] 晶向失稳过程中出现的裂缝规模较小，且存在于特定晶面，模型应力水平仍足以进行一小段弹性应变。应变速率达到一定水平后，裂缝规模增大，B2 相不再支持弹性应变，转为同 [011] 拉伸相似的失稳过程。



基于 Oyane 韧性损伤模型的淬火开裂预测数值模拟研究

龚淼、仝大明、杨幸运、顾剑锋

上海交通大学

淬火是材料改性的重要工艺，可以提高材料的机械性能，但在淬火过程中，工件经常会因为应力集中、材料缺陷、热处理工艺不当等产生开裂。有限元数值模拟的方法可用于淬火开裂预测研究，降低生产成本，提高生产效率。数值模拟方法是对淬火零件的温度场、组织场、应力应变场进行三场耦合计算，获得淬火过程中零件的温度、组织、应力应变的变化规律，本文通过引入 Oyane 韧性断裂模型，获得淬火过程中损伤因子的变化规律，通过设计高温拉伸实验得到不同材料随温度变化的损伤因子数值，从而预测淬火过程的开裂趋势。本文设计了 Cr12MoV、H13 两种材料的对比实验：通过带 V 口小方块的水淬实验结果和高温拉伸实验得到的损伤数值，结合数值模拟计算，结果显示：(1)Oyane 模型预测了带 V 口小方块的淬火开裂过程，预测结果与实验结果吻合；(2)H13 的开裂原因为马氏体相变过程中急剧升高的相变应力造成损伤值的剧烈升高，导致淬火开裂；(3)Cr12MoV 的开裂原因为冷却过程中逐渐升高的热应力导致损伤值的累积，造成淬火开裂。



石墨烯增强铝基复合材料的界面调控与力学性能研究

杨立壮、张洪梅、程兴旺

北京理工大学唐山研究院

铝基复合材料因其密度低、延展性高、耐蚀性强而被广泛应用于航空航天、电子和汽车工业等领域。但传统的铝基复合材料因增强体的尺寸与性能的局限性，难以满足结构材料高强高韧的力学性能要求。与传统增强体相比，石墨烯具有独特的二维结构和超高的力学性能，被认为是金属基复合材料的理想增强体。但由于铝基体与石墨烯之间的界面结合较弱，导致石墨烯难发挥其优异特性。针对以上问题，本文从设计新型石墨烯-铝界面结构的角度出发，利用原位合成路线制备金属纳米颗粒修饰的石墨烯复合增强体，结合粉末冶金工艺，在铝基复合材料中构建了稳定的界面结构，使复合材料在变形过程中难以从界面处开裂，充分发挥石墨烯的载荷传递效应。同时，稳定界面结构的建立也改善了界面附近的位错储存能力，使复合材料具有优异的加工硬化能力，从而获得了良好的均匀延伸率，进而复合材料强度获得提升的同时也使塑性得到了良好的保持。



集成材料计算：轻合金制备工艺研究的新范式

彭立明

上海交通大学

轻合金材料制备工艺从金属冶炼到构件成形，涉及高温、动态与瞬时的复杂物理过程，包含众多工艺参数与多物理场耦合现象。传统的“经验+试错”方法难以精确预测和控制产品质量，阻碍了其在高端领域的广泛应用。为解决这一问题，集成材料计算模拟融合了多尺度建模与材料信息学，提出了一种基于工程化目的的新研究范式。通过该范式可以实现材料制备工艺的优化及智能控制，从而构建产品的基础性设计平台。多尺度模拟计算可以模拟不同物理场耦合作用下微观组织的演化过程，分析不同物理场对微观组织演化及构件力学性能的影响。机器学习算法可以有效构建轻合金产品“工艺参数-产品质量”预测模型，实现产品质量的准确实时预测；结合深度学习算法，可以快速识别产品缺陷和特定区域，实现智能品质检测，从而提升产品的整体质量。轻合金制备过程的集成材料计算已成为未来发展的主要方向，是我国轻合金产业走向高端化、国际化的重要环节。



多尺度模拟研究铝合金中的析出行为

刘泓

上海交通大学

析出强化是铝合金的主要强化机制。在本研究中，采用多尺度模拟方法系统地研究了铝铜合金的析出和强化行为。研究人员利用热力学模型和第一性原理方法计算了析出相的热力学稳定性和成核驱动力。应用经典成核理论计算了析出相的成核能垒和最佳成核路径。相场模型被用来预测在晶体缺陷影响下析出颗粒的非均匀生长过程及析出颗粒的空间分布。此外，使用相场位错模型预测析出颗粒的强化效果。通过与实验结果的分析发现，采用这种多尺度模拟方法的模拟结果与实验结果一致。这种多尺度模型突破了合金开发中基于传统试错方法的限制，提供了通过多尺度计算平台描述析出成核和生长的初步框架。



7050 铝合金热拉伸过程中微观亚结构及第二相粒子的演变

祁清文, 卜恒勇, 李萌藁

摘要: 7050 铝合金具有密度小、比强度高、抗冲击性好、耐腐蚀等特点, 在汽车制造领域得到了广泛的应用, 但 7050 铝合金在室温下的塑性较差, 零件尺寸精度得不到保证, 近几年有学者提出温成型和热冲压技术, 这种将成型工艺和热处理相结合的技术可以更好的解决成型难的问题。本文旨在通过对热变形的研究, 可以更加清晰的了解塑性变形过程中变形参数对微观组织的影响, 对提升零件的成品率有较大的帮助。本文通过开展在不同变形温度和变形速率下的热拉伸实验, 对所获得的曲线和试样进行分析和表征, 研究表明: (1) 位错多边化是导致再结晶的主要原因; (2) 剪切应变对析出相的析出有着促进作用。(3) 随着变形温度的升高, 变形的微观机制由位错的滑移转变为攀移, 晶内强化相由 η' 和 η 相转变为 AlZnMgCu 相, 变形方式由晶内变形转变为晶界协调变形为主。

关键词: 7050 铝合金; 热拉伸; 微观亚结构; 第二相粒子



基于热-力耦合分析的玻纤复材拉挤成型仿真

石燕栋、陈章兴、苏旭明

浙大城市学院

拉挤成型是连续纤维增强复合材料的重要成型工艺之一。拉挤成型受纤维含量及种类、树脂黏度、模具温度、牵引速度等诸多材料特性和工艺参数的影响。目前，拉挤成型工艺参数设计主要根据经验或试错试验确定，难以解释制件气孔、开裂、分层、翘曲等现象，成品率、生产效率、能耗等都不尽理想。建立拉挤成型过程的热-力耦合分析模型，考虑树脂固化反应过程，以及固化过程中的热传导、复合材料本构关系，实现固化-传热-应力协同分析，并利用温度测试试验验证仿真分析结果。在此基础上，结合不同工艺参数下的开机试验以及仿真分析结果，建立工艺参数与开裂、翘曲等质量问题的内在联系，为工艺优化提供依据和准则。



6 机架铝杆连轧与 9 道次多层坯轧制数值模拟

起华荣、卜恒勇、李萌藁、蒋健博、陈建伟

昆明理工大学

鞍山钢铁集团技术部

利用 Simufact-Forming 成形模拟软件，通过建立物理模型，工艺调整，结合生产实际参数建立了铝圆杆 6 机架连轧模型，对比了三套孔型 6 种材料轧制变形特点；对 45 钢宽厚板两层、三层叠轧过程进行了物理建模和数值计算，研究了结合界面温度场、应力应变场分布情况，并提出了轧合条件。



考虑拘束效应的铝/钢电阻点焊复杂构型断裂预测研究

史丽婷、石燕栋、李文凯、刘彩明、单历元、苏旭明

浙大城市学院

电阻点焊技术在轻量化铝/钢混合车身中的应用具有降本、增效、减重、节能等优势。铝/钢电阻点焊接头的断裂性能直接影响整车服役安全和可靠性。如何准确预测两层板和三层板点焊接头复杂加载构型（如拉伸剪切、剥离等）的断裂模式及断裂载荷，以保证车身安全性和结构完整性是汽车轻量化设计过程中面临的关键问题。本研究结合微观结构与宏观性能，揭示了两层板和三层板铝/钢电阻点焊接头拉伸断裂失效机理；开发了新型微区材料力学性能测试方法，实现了考虑材料力学性能非均匀性的拉伸断裂模式预测；提出了拘束参量和熔核直径对铝/钢电阻点焊接头断裂的影响作用，为进一步研究铝/钢电阻点焊接头复杂构型的断裂失效准则奠定了理论基础。



热处理智能制造系统开发及应用

邓小虎、郭嘉毅

天津职业技术师范大学

海思特（苏州）材料科技有限公司

为提升热处理车间智能化水平，解决车间管理方式落后与“数据孤岛”等问题，本研究根据热处理车间离散型的生产特点，设计并开发了热处理车间智能制造系统。首先，系统采用信息化技术管理车间生产全过程，实现了车间生产信息流通共享，执行过程透明可控以及生产历史追溯可查等功能；其次，系统通过建立数字化模型，绑定并存储实时数据，同时在设计中引进了安全环保的理念，达到了对车间的设备管理、安全生产以及异常预警的目标；最后，基于完整的车间数据，利用数据分析技术将车间各设备的能耗成本与工作效率进行全方位自动统计与分析，实现了车间各项指标精细化管理。本系统在车间成功应用后，改进了车间生产和设备的管理方式，提升了车间智能化水平，并为热处理车间的绿色制造和节能减排提供了支持。



含铌锆合金蠕变行为微观机理的分子动力学模拟研究

赵江涛、林君如、宋富斌

兰州大学

锆合金在堆内的蠕变行为影响材料服役性能。由于堆内原位辐照蠕变实验难以开展，目前对锆合金蠕变微观机理的认识还不够充分。因此，本文针对含铌锆合金纳米晶材料的蠕变行为及富铌沉淀相-刃位错相互作用开展了分子动力学模拟计算。通过含铌锆合金纳米晶的蠕变行为研究，本文得到了温度、载荷和晶粒尺寸对材料热蠕变机制的影响，发现相比晶粒尺寸，温度和应力是影响锆合金蠕变速率的主要因素，其中低应力下的蠕变机制以扩散蠕变为主，高应力下则体现为晶界滑动或位错蠕变。通过刃位错与富铌沉淀相的相互作用模拟计算，分析了位错及含铌沉淀物的相互作用微观过程，获得沉淀物尺寸及含 Nb 量对 CRSS 的影响规律，发现在位错均通过剪切机制脱离直径小于 6 nm 富铌沉淀相，障碍强度也与位错类型有关。



基于 JMatPro 的材料性能优化设计与联合仿真应用

潘露

中仿智能科技（上海）股份有限公司

随着材料科学和工程领域的快速发展，材料性能的优化设计与集成计算仿真在提高产品性能和降低成本方面发挥着至关重要的作用。

本报告介绍了 JMatPro 软件的基本功能和特点，包括热力学计算、材料性能预测、高通量计算、优化设计等功能。

在此基础上，介绍了 JMatPro 与 CAE 联合多物理场耦合分析中的应用流程，通过将 JMatPro 与 CAE 软件集成仿真，实现材料性能预测与制造工艺的同步优化，从而在设计阶段就预测产品在实际工作条件下的表现。最后，本报告分享了 JMatPro 在铸造、焊接等行业的集成仿真应用案例。



将注意力机制移到黑盒子外：“中心-环境”特征模型

刘轶

上海大学

以 Transformer 架构为核心技术的大语言模型（LLM）的成功巧妙利用了多头自注意力机制，但是实践中需要昂贵的大数据和大模型的训练。基于图论的晶体结构表征成为材料机器学习模型的主要选择，但是基于图特征的深度学习模型也需要大量数据训练才能获得较高的精度。为了解决材料数据稀缺昂贵情景下的进行机器学习的问题，我们首次提出了基于物理的预设注意力机制（Pre-Attention Mechanism, PAM）思想，以局域“中心-环境”（Center Environment, CE）核壳结构为预设架构构建机器学习特征模型，其中的环境原子通过近邻或原子环境类型（Atom Environment Type, AET）进行定义。CE 机器学习模型可以大大减少对训练数据的刚性需求，同时实现模型的高精度和迁移性，与基于图特征的深度学习方法相比，在模型预测的效率、精度和迁移性等方面均有提高。本报告以铌硅基高温合金掺杂元素合金化效应为例进行介绍说明，结合第一性原理计算和机器学习方法讨论了合金化对多元铌硅合金的稳定性和力学性能的影响。基于 CE 特征的机器学习模型可成为合金掺杂效应机器学习研究的普适方法和工具。



增材制造马氏体不锈钢显微组织和相变研究

张聪、尹海清

北京科技大学

增材制造通过逐层堆积实现复杂组件的快速制造。然而，激光粉末床熔融过程中胞状微结构对力学性能的影响研究仍较为有限。本文系统探讨了激光粉床熔融对马氏体不锈钢胞状微观组织及其力学性能的影响。研究发现，增加激光扫描速度不会显著改变相分数，但能够将胞状结构的平均尺寸从 $0.6 \mu\text{m}$ 减小至 $0.35 \mu\text{m}$ 。扫描速度为 400 mm/s 和 1000 mm/s 时，分别由于熔合不充分和匙孔缺陷而对力学性能产生不利影响。通过实验确定，最佳扫描速度为 800 mm/s ，在此条件下制备的样品展现出最高的拉伸强度和延伸率，极限抗拉强度达 $1088.3 \pm 2.0 \text{ MPa}$ ，延伸率为 $16.76 \pm 0.2\%$ 。最后，本文阐明了表面形貌、缺陷与能量输入的演化机制，并建立了胞状结构尺寸与力学性能之间的关系。

功能结构一体化点阵多孔材料的仿真及试验研究

陈伟、果春焕、史嵩川、姜风春

烟台哈尔滨工程大学研究院

哈尔滨工程大学

功能结构一体化点阵多孔材料因其在轻量化、高比强度和多功能性方面的独特优势，在航空航天、汽车工程、建筑工程和生物医学等领域得到了广泛研究。本研究采用数值仿真结合实验研究的方法，探究了空心球复合技术和选区激光熔融增材制造两种不同工艺制备的点阵多孔材料的压缩性能、热传递性能和减振性能。结果表明，在准静态压缩过程中，空心球复合点阵多孔材料和增材制造点阵多孔材料都具有很好的吸能特性，但它们的破坏形式不同，前者沿 45° 方向发生剪切断裂，后者呈随机逐层压塌形式破坏，如图 1 所示；在热传导过程中，相比于实体材料，点阵多孔结构材料的有效导热系数有较大幅度的下降，隔热性能显著提升，其主要机理是热通量的大小和传导速率由均匀分布变为不均匀分布，热通量的方向由均匀直线变为复杂路线，热线在孔周围发生明显折弯，延长了热传导路径；在简谐振动过程中，点阵多孔结构的周期性排列和多孔特性，使其能够在多个方向上发生变形和扭转，从而增加了能量的耗散，微观到宏观的多层次变形机制可以有效地将振动能量在不同尺度上进行分散和耗散。最后讨论了点阵多孔材料在减振支撑基座、装甲防弹等多工况下的试验研究。通过数值仿真技术能够全面理解和优化点阵多孔材料的性能，拓展了点阵多孔材料在轻量化结构设计、隔热散热控制和减振控制等领域的应用，具有巨大的潜力和优势。

基于相场模拟对铁电材料的压电性能的电场控制研究

柴景桁、赵云杰、耿立威

四川大学

铁电材料，如 PMN-PT ($\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$)，是应用广泛的功能材料，它以其压电和介电性能而闻名，并因此成为各种电子设备中的重要部件。铁电材料的性能不仅由其相结构决定，而且受到了内部铁电畴结构的影响。在铁电陶瓷中，PMN-PT 由于其优异的压电和介电性能，在近几年来引起了人们的极大关注，这与其内部晶体结构和铁电畴的形成机制密切相关。改变内部晶体结构或调控晶体内部铁电畴取向、尺寸和形状对增强铁电材料的压电和介电性能具有较好的前景，从而增强它的实际应用。然而，对于像 PMN-PT 的一些铁电材料，人们目前仍然难以全面了解内部晶体结构，特别是相共存机制以及畴结构的形成和转变。先前的实验研究已经证明了交流极化 (ACP) 工艺在提高单晶 PMN-PT 材料性能方面具有成效。然而 ACP 对传统多晶陶瓷的性能改善并不理想。在本研究中，我们将铁电朗道理论与相场模拟方法相结合，希望探索 PMN-30PT 陶瓷在温度变化过程中它的微观结构系统内潜在的相共存机制和共存范围。此外，我们还分析了 ACP 工艺对提高相共存区以外的织构化 PMN-30PT 陶瓷的压电和介电性能的影响。与预期相反，我们的计算结果表明，ACP 工艺无法显著提高织构化 PMN-30PT 陶瓷的性能。在进一步的研究里，我们发现材料内部晶界和畴壁之间的相互作用机制在决定极化技术的有效性方面起着至关重要的作用。具体而言，ACP 工艺因晶界的存在而无法有效地在室温下减小 PMN-30PT 多晶材料内的 71° 畴壁，从而限制了织构化多晶陶瓷性能的进一步提高。通过阐明微观结构特征和极化技术之间的复杂相互作用，我们的研究为优化铁电陶瓷在实际应用中的性能提供了有价值的见解。



Zr-Nb-Sn 合金辐照损伤介观尺度数值模拟软件

信天缘、吴璐、赵光、莫华均、潘荣剑、覃检涛、赵民、马聪、王青青

中国核动力研究设计院

Cladding is an important safety barrier of the reactor. In order to evaluate the radiation damage mechanism of zirconium alloy materials, we developed a mesoscale numerical simulation software named R2T-REx. Based on the cluster dynamics, rate theory and phase field method, this software is used to predict the radiation damage behavior of zirconium alloy cladding materials in Zr-Sn-Nb system, including the evolution of radiation defects, and predictions of key mechanical properties.



局域化学环境对 AlNbTiZr 高熵合金中点缺陷和氧行为影响的研究

王青青、孔祥刚、吴璐、信天缘

中国核动力研究设计院

The present study is dedicated to the effect of local chemical environment on the point defects and oxygen behaviors in AlNbTiZrHEA using the first-principles method. It has been shown that the randomness of local chemical environments in AlNbTiZrHEAs leads to a wide distribution of vacancy and interstitial formation. One interesting aside here is the vacancies preferred Al-rich and Nb-poor environments. What another worth noticing is that the most stable interstitial defects are in the form of dumbbells. What's more, the Al-Al dumbbell is the easiest interstitial defect while the Zr-Zr dumbbell is the least. The adsorption energy results illustrate that the most stable adsorption sites are those with high content Ti, mainly due to its highest t_2g states near Fermi level. The stronger O-Al than O-Ti interaction will cause outward diffusion of Al, which explains the high concentration Al in oxide layer of AlNbTiZr experimentally. More importantly, Ti atom weakens the O-Al interaction, and thereby may weaken the stability of Al-containing oxides. Consequently, it is necessary to control experimentally by different processing methods to decrease the occurrence of Ti-Ti arrangement on the surface to improve oxidation resistance of AlNbTiZr.



基于分子动力学方法解析 Fe-Mn-C 奥氏体钢低温应变响应

于佳成、丁然、刘永长

天津大学

本研究采用分子动力学方法模拟研究了 Fe-Mn-C 合金的广义层错能 (GSFE)。研究结果表明, 本征层错 (ISF) 在超晶胞边界处形成, 在 0.5 倍肖克莱部分位错的剪切位移后, GSFE 达到局部极大值 UTFE 的, 称为不稳定层错能 (USFE), 代表形成 ISF 的能量壁垒。进一步剪切 1 倍肖克莱部分位错后, 能量达到局部极小值 (ISFE)。我们探讨了两种剪切路径的可能性: 第一种路径在交替的 (111) 平面上剪切, 形成马氏体孪晶 (ME), 在 1.5 倍肖克莱部分位错处达到不稳定马氏体层错能 (UMFE); 第二种路径在同一 (111) 平面上连续剪切, 形成不稳定孪晶层错能 (UTFE)。通过比较 UMFE 和数值发现, 当 UMFE 小于 UTFE 时, 马氏体相变占主导地位; 反之, 变形孪晶占主导地位。

硬/软磁铁氧体交换耦合对磁导率影响的相场研究

徐心语、岳文钦、于跃雳、耿立威

四川大学

Magnetic materials have found widespread application across various electronic devices, including inductors, transformers, antennas, and electronic filters. Among these materials, laminate magnetoelectric composite materials have emerged as key players, offering tunable inductance characteristics that can be controlled by the external electric field to regulate their permeability. These laminated magnetoelectric (ME) composites, composed of magnetostrictive and piezoelectric materials, demonstrate the ability to modulate magnetic permeability in response to an electric field or voltage. This modulation arises from the ME coupling effect, stemming from the elastic coupling between magnetostriction and piezoelectric properties. The anticipated tunability of magnetic permeability via electric fields holds promise for the development of a novel electronic component known as voltage tunable inductors (VTIs), poised to revolutionize power electronic design. In comparison to traditional tunable inductors, VTIs offer low power consumption, enhanced tunable performance, and reduced volume. Consequently, the controllable inductance characteristic of these materials underscores their vast potential in electronic applications. This work aims to design the voltage tunable inductors (VTIs) of magnetoelectric composites, systematically investigating the particle microstructure of magnetostrictive and ferroelectric polycrystalline composites using domain-level phase modeling and computer simulation. For the challenge of residual stress arising from the co-firing process, the hard magnetic phase particles are introduced to gain a better tunability of permeability. Exchange coupling effect between hard and soft ferrite happens during the addition of the hard magnetic particles. This effect will have a remarkable influence on the permeability. To study the mechanism of the exchange coupling effect on permeability, the paper explores the impact of incorporating hard magnetic hexagonal ferrite on magnetic anisotropy energy, thus predicting changes in the easy axis under strong interaction conditions. Emphasis is placed on analyzing critical dimensions as a guide for studying permeability. Specifically, the project delves into the factors affecting permeability, including the magnetic crystal anisotropy, particle morphology, size, volume fraction of hard magnetic ferrite particles, and the rotation of orientation. The trends of magnetic permeability in each case are analyzed in detail, as well as the process of magnetic domain evolution. Drawing upon phase field simulation and established theoretical models, the research aims to propose optimal design schemes for achieving high tunability in magnetoelectric composite VTIs. This study holds significance as it offers novel insights into inductor design and provides a roadmap for controlling VTI tunability effectively.



Al-Mg-Si 合金 CMT 焊接接头的软化机理及软化区的有限元模拟预测

朱轩、杨书汉、杨晓益

昆明理工大学材料学院

摘要：本研究详细阐述了 Al-Mg-Si 合金 CMT 焊接接头热影响区（HAZ）和焊缝区（WZ）内软化区（分别命名为 SZ1 和 SZ2）的软化机理，并分析了软化区对接头断裂行为的影响。结果表明，造成 SZ1 和 SZ2 力学性能软化的主要原因是在焊接过程中大量的强化相 β' 发生了溶解，引起软化区中沉淀强化机制显著削弱。但是由于填充金属 ER5087 向熔池中补充大量 Mg 元素，SZ2 中固溶强化得到增强，该区域的软化程度较 SZ1 降低。接头拉伸断裂在 SZ1 处，这是因为 SZ1 中沉淀强化和固溶强化等机制的削弱，导致该区域阻碍位错移动的能力下降。而裂纹会萌生于凹坑、晶界中，并会沿晶界、微孔及滑移带进一步生长。同时建立了 SZ1 的有限元模型预测，实现了 SZ1 软化区域及软化程度的精确预测。



探究应变状态对中锰 TRIP 钢奥氏体稳定性的影响

高启涵、朱浩坤、邹宇明、丁桦

东北大学材料科学与工程学院

东北大学轧制技术及连轧自动化重点实验室

东北大学辽宁省轻量化用关键金属结构材料重点实验室

为了研究应变状态对中锰 TRIP 钢奥氏体稳定性的影响，本文以 Fe-6Mn-0.9Al-0.15C 钢为研究对象，选取三种在板料成形过程中常见的应变状态：单轴拉伸、双轴拉伸及平面应变对试样进行了力学测试。首先，结合数字图像相关(DIC)技术和 XRD 分析，测量了实验钢的应变和奥氏体体积分数。其次，对不同应变状态的试样进行了微观组织表征，并分析了应变状态对奥氏体稳定性的影响。最后，基于实验数据，建立了考虑应变状态影响的 α' -马氏体相变动力学模型。结果表明：奥氏体稳定性与应变状态密切相关，应变状态变化造成的应变配分行为与 α' -马氏体相变行为的改变是不同应变状态下奥氏体稳定性产生差异的原因。相变动力学模型的计算结果与实验数据基本一致，验证了模型的准确性。



铝合金溶质原子在特殊晶界处的晶界偏析行为及其力学性能的分子动力学模拟研究

樊善明、彭明军

昆明理工大学

随着汽车、航空航天以及包装材料的不断发展，材料的轻质化变得越来越重要。铝合金因其具有低密度、良好的塑韧性以及优异的耐蚀性逐渐被广泛应用。铝合金中存在大量的孪晶，例如 $\Sigma 5$ ， $\Sigma 3$ ， $\Sigma 11$ 等特殊晶界的存在会使材料性能受到影响，本文采用分子动力学方法选取了具有代表性的 $\text{Al}\Sigma 5[001](210)$ ， $\text{Al}\Sigma 3[1-10](111)$ 晶界进行研究，通过在晶界处掺杂不同的溶质原子（Cu，Fe，Mg，Ni，Ti，V，Zn和Zr）进行计算，发现不同晶界受不同溶质原子的作用不同，对 $\text{Al}\Sigma 5(210)$ 晶界而言Ti，V，Zr掺入可以有效地降低 $\text{Al}\Sigma 5(210)$ 晶界的晶界能，并且掺杂含量越高，对晶界能的影响越大，掺杂Cu，Ti元素时在晶界中产生了良好的偏析能力。在 $\text{Al}\Sigma 3[1-10](111)$ 晶界中发现当掺杂超过2%Cu和Ti，以及V、Zr、Ni等元素时，可以显著降低 $\text{Al}\Sigma 3(111)$ 晶界的能量，掺杂Cu，Fe，Mg元素时随着含量的增加会使得晶界偏析能力升高，掺杂Cu元素时在该晶界处产生偏析，会提高层错的数量，层错越多使得位错运动受阻，从而提高了材料的抗拉强度。在探究温度对晶界性能影响时，在900K下 $\Sigma 5(210)$ 晶界中位错受到温度的影响最大，基本在该温度下位错已经发生了湮灭，没有观察到位错的产生，并且随着温度升高 $\Sigma 3$ ， $\Sigma 5$ 两种晶界的晶界能均升高使得材料性能降低。



合金元素对铍铝合金界面性质影响的第一性原理研究

谢焱、王东新、殷亚军、李文、刘振伟、计效园、沈旭、周建新

华中科技大学材料成形与模具技术全国重点实验室

西北稀有金属材料研究院宁夏有限公司稀有金属特种材料国家重点实验室

本研究构建了 Be/Al 界面原子结构模型，基于第一性原理计算探究了合金元素对 Be/Al 界面性质的影响。研究表明，Be(001)/Al(100)界面具有最大的粘附功(2.48J/m²)及最低界面能(0.08 J/m²)，是最稳定的界面结构。基于此，进一步构建了 Ni、Ag、Co、Ge 元素掺杂的 Be(001)/Al(100)复合界面结构。偏析热与界面粘附功计算结果显示，Ni、Ag 和 Co 掺杂有利于提高 Be(001)/Al(100)界面强度。其中，Ag 和 Co 元素掺杂效果相似，其次是 Ni，而 Ge 元素掺杂将导致 Be/Al 界面性能下降。分波态密度(PDOS)及差分电荷密度计算表明，在纯 Be(001)/Al(100)界面结构中，界面附近 Be 和 Al 原子之间形成了金属键。随着掺杂元素的引入，Be 和 Al 原子之间的电荷被重新分配。Be-X 或 Al-X (X=Ni, Ag, Co)形成较强的新金属键，而 Ge 元素的掺杂形成较弱的 Be-Ge 金属键，不利于 Be/Al 合金性能的提高。

316H 奥氏体钢在不同保载时间下的高温疲劳-蠕变行为与本构模型研究

仝雪岩, 徐连勇, 赵雷

天津大学材料科学与工程学院

天津市现代连接技术重点实验室

摘要: 本研究通过高温疲劳-蠕变试验彻底研究 316H 奥氏体钢在高温下的应力-应变响应。通过应力分割法确定有效应力和背应力的演变, 并与累积塑性应变相关。讨论了移动位错密度、位错结构和亚晶粒结构, 以揭示微观结构对疲劳过程中应力-应变响应的影响。此外, 通过引入峰值塑性应变相关松弛因子、累积塑性应变修正运动硬化模型和修正的各向同性硬化模型, 建立了统一的粘塑性框架。根据最大应力演变、应力速率因子和滞后回线讨论了统一模型的有效性。实验结果与有限元预测结果之间具有良好的一致性, 表明其能够将连续软化、硬化-软化和硬化-软化-二次硬化行为集成到一个本构模型中, 并且准确的描述了不同保载时间下应力应变响应及松弛行为。

关键词: 疲劳-蠕变; 本构模型; 有限元



基于机器学习 Fe-Cr-Ni-Al/Ti 多主元合金的成分设计及性能优化

徐康, 涂坚, 罗晋如

苏州实验室

重庆理工大学

摘要: 多元主元合金 (Multi-Principal Element Alloys, MPEAs) 作为一种新的合金设计理念, 突破了传统合金单主元的限制, 并表现出优异的综合性能。然而, 由于其巨大的成分设计空间, 传统的合金设计方法, 难以实现其高效设计。近年来, 机器学习作为一种数据驱动的设计方法, 在合金设计领域得到了广泛应用, 并为高效开发具有优异性能的 MPEAs 提供了有效的方法。在本工作中, 我们使用机器学习方法, 对 Fe-Cr-Ni-Al/Ti MPEAs 展开成分高效设计和性能优化。针对穷举法在面临高维特征时指数爆炸的风险, 使用一种随机穷举的特征筛选方法, 用于筛选特征子集。此外, 对多种机器学习算法模型在预测强度和塑性方面的精度进行了评估。最后, 组织表征和性能测试结果表明, Al₅(Fe₁₀Cr₃₅Ni₅₅)₉₅ 和 Al₂Ti₁(Fe₁₀Cr₃₅Ni₅₅)₉₇ 经过 900°C/15min 退火处理后, 实现了高强度和高延伸率。其中, Al₅ 合金的屈服强度达到 620.66 MPa, 断裂延伸率为 32.67%; Al₂Ti₁ 合金的屈服强度达到 588.29 MPa, 断裂延伸率为 33.79%。

关键词: 多主元合金; 机器学习; 成分设计; 力学性能