

# 基于高通量计算的成形过程分析

卓柏呈, 李培杰, 宋立博

(清华大学 新材料国际研发中心, 北京 100084)

**摘要:** **目的** 介绍一种来自材料基因组计划的方法, 由高通量计算、高通量实验与数据管理构成, 并以 45<sup>#</sup> 钢为例, 介绍高通量计算与高通量实验的优势。**方法** 先以模拟软件与理论结合, 预测研发方向, 再设计合适高通量的实验方案, 最后将所得数据建立数据库, 方便管理。以 45<sup>#</sup> 大型钢铸锭为例, 以 COMSOL 软件模拟 3 种不同钢锭成形过程, 设计实验方案, 记录过程参数, 并记录于数据库中。**结果** COMSOL 软件在高通量计算中扮演重要角色, 其强大的耦合功能让模拟精度更高, 各项参数也较为准确。透过模拟得知, 约 2.9 h 后, 20 t 钢锭凝固厚度最厚达约 500 mm, 此时将中间液芯挤出, 可减少划痕等缺陷的产生, 并将凝固过程的缺陷挤出。**结论** 材料基因组计划在材料研发的进程中能起到较大的指导作用, 因此在国家支持下国内已有多个项目开展, 将此研究方法用于传统浇铸工业的步骤中具有一定的推广价值。

**关键词:** 材料基因组计划; 高通量计算; 高通量实验; COMSOL 软件; 凝固模拟; 力学挤压

**DOI:** 10.3969/j.issn.1674-6457.2019.02.001

**中图分类号:** TG244 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-6457(2019)02-0001-08

## Forming Process Based on High Throughput Calculation

CHO Po-chen, LI Pei-jie, SONG Li-bo

(National Center of Novel Materials for International Research, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**ABSTRACT:** This paper aims to present an approach from the materials genome project, which is composed of high-throughput computing, high-throughput experiment and data management, and to introduce the advantages of high-throughput computing and high-throughput experiment with 45<sup>#</sup> steel as an example. First, simulation software and theory were combined to predict the direction and plan of research and development (high-throughput computing); then, suitable high-throughput experiment scheme were designed; finally, a database was established with the data obtained to be convenient for management. With 45<sup>#</sup> steel as an example, COMSOL software was used to simulate three different ingot forming processes. This subject designed the experiment plan and recorded the process parameters in the database. COMSOL software played an important role in high-throughput computing. Its powerful coupling function enabled higher simulation accuracy and more accurate parameter. Through the simulation, it was known that after about 2.9 h, the maximum solidification thickness of 20 t ingot is about 500 mm. At this time, extruding the intermediate liquid core could reduce scratches and other defects, and extrude the defects in the solidification process. As the material genome project plays a significant guiding role in the process of material research and development, there have been a number of projects in China under the support of the state. Therefore, it is of great value to popularize this research method in the traditional casting industry.

**KEY WORDS:** materials genome project; high throughput computing; high throughput experiment; COMSOL software; solidification simulation; mechanical extrusion

收稿日期: 2019-03-04

作者简介: 卓柏呈 (1993—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为材料成形制造。

通讯作者: 李培杰 (1962—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为轻金属材料凝固组织控制与成形制造。

材料基因组计划 (MGI) 是美国 2011 年启动的项目, 目标是以快速且系统的研发方式来研究新材料, 并将人工智能与材料结合, 收集管理获得的成果, 使研发过程更有效率。国内虽然起步较晚, 但是规模并不输给西方国家。材料基因组计划主要是由高通量计算、高通量实验与数据管理组成, 高通量计算是由理论方法摸索实验, 再利用模拟软件模拟出工艺过程或方法, 例如成形过程中, 利用热力学原理等理论, 计算出材料各项基本参数、凝固时间与浇注时间, 并配合有限元软件模拟结果, 以缩小实验搜索范围; 高通量实验是通过设计实验过程, 获得大量结构与性能表征, 例如设计一次实验, 浇注多个不同参数钢锭, 再一次对多个钢锭分析得到所需参数; 数据管理组成是把实验获取的结构表征、成分与性能做后处理, 建立材料数据库。

本课题利用 COMSOL 软件模拟大型锻件的成形过程, 分析空心钢锭、实心钢锭与液芯挤压锭的各项参数, 如温度、表面应力、内部缺陷与偏析等, 实现以高通量技术指导工艺的研发过程。根据模拟结果, 设计高通量实验方案, 并建立材料数据库。

材料高通量实验概念为通过一次实验完成多个材料参数的测定, 并以简单、快速、无损及全面的方式采集与分析材料的参数及性能。

现代材料高通量实验首先强调设计组合实验, 并制备材料库与需表征的材料参数, 最后建立数据库与模拟对比优化, 最终达到舍弃复杂实验, 降低研发成本的目的, 因此除了结合传统的实验设计方法外, 再利用模拟, 更有效地降低实验成本, 最后将得到的结果建立数据库, 因此高通量制备课题利用了一套更系统的流程, 加快了中国材料的研发进展。

## 1 高通量计算

为了适应新兴产品与先进材料的快速开发, 高通量计算 (High-throughput computing) 解决了研发过程中时间浪费与成本浪费等问题。利用理论知识得到的参数可以用来验证与优化工艺过程, 因此模拟结果对指导工艺过程起到了重要作用。例如通过模拟成形过程, 能对工件的可加工性作出预判, 减少模具调试次数与时间, 并对模具与产品材料作评估, 以提升可靠性。在多种工艺选择下, 更能模拟出最佳工艺过程, 增加稳定性, 降低生产成本, 并能预测缺陷, 以便安排合理解决方案。

以往工艺上多数新产品都是靠师傅经验去完成开发, 需经过不断试错才能开发出产品, 生产成本较高, 周期较长, 产品质量也不好, 甚至有些缺陷无法避免, 而模拟软件解决了这些问题, 利用数据库与参数调控大幅度降低了生产成本, 并且开发周期变短, 产品精度也在正确的设定网格、参数与耦合等条件后, 与真

实产品误差越来越小, 使生产工艺大幅度进步。

### 1.1 辅助软件介绍

目前市面上商用模拟软件很多, 选择合适的模拟软件可以减少开发时间, 降低模拟难度。在成形过程中, 常用 ProCAST, Magma, ANSYS 等软件辅助, 能够对凝固过程做流体分析、应力分析、温度等参数的分析; 铸造过程常用 ProCAST, AnyCasting, Magma 等, 对于砂型铸造、消失模铸造、挤压铸造等, 可以利用软件内部数据库与软件功能分析过程与结果; 锻造过程常用 FORGE, Deform, Abaqus 来模拟冲压、拔长、冲孔、镦粗过程。

### 1.2 COMSOL 软件介绍

COMSOL Multiphysics 是一款由 MATLAB 发展过来的商用模拟软件, 除了有多个模块类型可以模拟外, 更有强大的耦合能力, 能够精准模拟热力耦合、固液耦合、气体运移耦合等多场耦合, 由于其界面易操作、数据库完善且具备大规模运算能力, 因此在各领域中都有不错的应用实例。

COMSOL 软件是 2014 年引入中国的商业软件, 具备多物理场建模的功能, 能耦合多个物理场, 具有多个模块, 并能连接多个外部接口, 对于产品材料的数据库种类也很多, 界面操作简单, 容易入手, 是能使所有物理现象在计算机上呈现的强大商用软件。

在成形方面, COMSOL 软件提供了专业的热传递模块与结构力学模块, 可以更精确地模拟成形过程中凝固、力学等过程, 其中特点有以下几个: 可以定义不同偏微分方程来耦合多物理场问题; 能精确模拟瞬态、稳态过程; 可轻易控制求解参数、材料属性、边界条件、载荷等; 数据库专业齐全, 用户可以利用内置物理模型修改; 丰富的 CAD 建模工具, 可直接二维、三维建模, 也支持 CAD 与 SolidWorks 等第三方绘图工具导入; 支持多种网格剖分方法; 后处理功能模块丰富, 可进行各种数据、曲线、图片、动画的输出。

COMSOL Multiphysics 在模拟成形过程中, 能够耦合多物理场模型, 例如凝固与挤压的结合, 固液转变的过程, 相比于其他模拟软件, 能得到更精确的结果。与 ABAQUS 相比, 二者都能够在锻造方面有较好的模拟成果, 但 ABAQUS 在加工成形过程的数值模拟受到材料、几何和边界非线性的影响, 计算难度很大, 需简化为准静态过程, 才能计算结果, 而 COMSOL 的庞大数据库让模拟结果更加精确。

ProCAST 软件是主要针对铸造过程开发的一套专业软件, 没有 CAD 建模功能与网格划分等缺点是 COMSOL 优于 ProCAST 的原因, 在耦合方面 COMSOL 能更好地耦合力学与凝固过程, 使模拟工艺的过程更加多元。模拟软件优缺点比较见表 1。

表 1 模拟软件优缺点比较  
Tab.1 Comparison of advantages and disadvantages of simulation software

软件	优点	缺点
ProCAST	1. 网格精度高 2. 具热力学模块, 可按成分建构应力模型	1. 网格划分繁琐 2. 计算复杂, 运算耗时长
Magma	1. 网格划分简单 2. 常用材料专用模块	1. 网格易失真 2. 建模大小不易更改
ANSYS	1. 有限元划分网格, 精度高 2. 可自定义材料属性	1. 建模复杂 2. 没有自己材料库
COMSOL	1. 网格化分选择多, 精度高 2. 诸多模块可以使用, 并有强大耦合能力	1. 材料库不足 2. 求解器效率较低, 所占内存较大

## 2 成形过程案例

以模拟大型钢锭 (约 20 t) 的成形过程为例, 同时浇注实心钢锭、空心钢锭与液芯挤压锭 3 种形状, 待其冷却后, 取出钢锭, 并比较这 3 种钢锭的温度、界面移动过程、表面应力、残余应力、疏松、缩孔、偏析等差别, 再用这些参数优化工艺, 其中模拟材料为 45<sup>#</sup>钢锭, 其参数如下: 起始温度为 1823.15 K, 泊松比为 0.269, 弹性模量为 210 GPa, 密度为 7833 kg/m<sup>3</sup>, 液态热容为 580.61 J/(kg·K), 固态热容为 465 J/(kg·K), 固态导热系数为 319.52 W/(m·K), 液态导热系数为 309.05 W/(m·K), 凝固温度为 1773.15 K, 模具热传系数为 320.7 W/(m<sup>2</sup>·K), 凝固潜热为 205 kJ/kg, 液相线温度为 1768.15 K。

目前有两种凝固方式, 定向凝固与体积凝固, 此次模拟属于体积凝固 (四面八方一起凝固)。

$$q = (R_v \rho \Delta h - c \rho \varepsilon) \left( \frac{V}{A} \right) \quad (1)$$

式中:  $q$  为界面热流密度 (J/(m<sup>2</sup>·s));  $R_v$  为体积凝固速率 (m/s);  $\rho$  为平均密度 (kg/m<sup>3</sup>);  $\Delta h$  为凝固潜热 (kJ/kg);  $c$  为热容 (J/K);  $\varepsilon$  为冷却速度 (K/s);  $V$  为钢锭体积 (m<sup>3</sup>);  $A$  为钢锭界面面积 (m<sup>2</sup>)。

45<sup>#</sup>钢在高温下的凝固过程是由液相转为固相, 因此需要考虑相变传热, 由式 (2) 推得其相变过程热的传递。

$$\rho C_p \frac{\partial T_2}{\partial t} + \rho C_p u \cdot \nabla T_2 + \nabla \cdot q = Q_{\text{total}} \quad (2)$$

式 (2) 中  $q$  和  $\rho$  的计算见式 (3) 和式 (4)。

$$q = -k \nabla T_2 \quad (3)$$

$$\rho = \theta \rho_{\text{phase1}} + (1 - \theta) \rho_{\text{phase2}} \quad (4)$$

式中:  $C_p$  为常压热容 (J/(kg·K));  $k$  是热导率;  $T_2$  为温度 (K);  $t$  为时间 (s);  $u$  为速度场 (m/s);  $\theta$  为固液态比例;  $\nabla$  表示对函数在各个正交方向上求导数以后再分别乘上各个方向上的单位向量。

在完成方程设定与网格设定后, 再设定钢锭的运算过程, 将时间范围设定在开始凝固到 1000 s 的过程, 并且以每次 0.1 s 为一步长做迭代计算。

此次主要模拟瞬态过程中 45<sup>#</sup>钢的三维温度分布情形, 假定其瞬间充型, 并同时开始冷却, 其中模具传热面为侧面与上盖, 下侧有一钢水浇入口, 假定其不断给予热源, 使钢水下侧恒温。

### 2.1 实心钢锭凝固分析

模拟内容为 45<sup>#</sup>钢锭成形过程中, 先将钢水浇注至模具中待其冷却至凝固后, 将钢锭取出分析。钢锭上底直径为 1358 mm, 下底直径为 1158 mm, 高为 2000 mm, 约 20 t, 其形状尺寸见图 1。



图 1 实心钢锭  
Fig.1 Solid steel ingot

COMSOL 模拟结果见图 2, 由外壁向外散热, 由于浇筑由小边 (直径为 1158 mm 边) 浇注, 因此设定小边 (直径为 1158 mm 边) 不断提供热源。图 2 为在凝固 2.9 h 后的温度纵切面。

### 2.2 空心钢锭凝固分析

模拟内容为 45<sup>#</sup>钢锭成形过程, 先将钢水浇注至中空模具中, 待其冷却至凝固后, 将钢锭取出分析。钢锭上底直径为 1358 mm, 下底直径为 1158 mm, 高为 2000 mm, 约 20 t, 中孔直径为 350 mm, 其形状尺寸见图 3, 并得到在 2.9 h 温度见图 4。

### 2.3 液芯挤压锭凝固分析

模拟内容为 45<sup>#</sup>钢锭成形过程, 先将钢水浇注至模具中, 待其冷却至一定程度后, 将液芯挤压出。钢

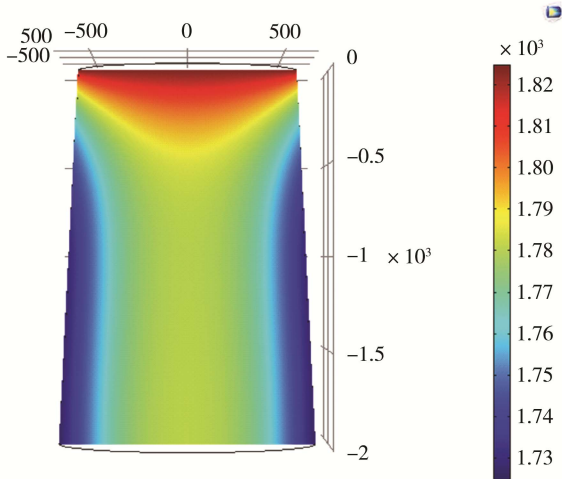


图2 实心钢锭温度(K)  
Fig.2 Temperature of solid steel ingot

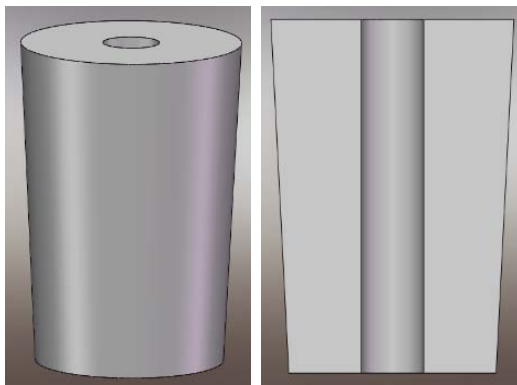


图3 空心钢锭  
Fig.3 Hollow steel ingot

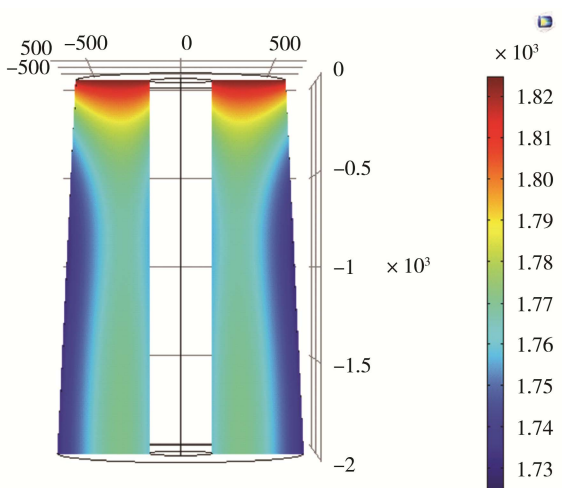


图4 空心钢锭温度(K)  
Fig.4 Temperature of hollow steel ingot

锭上底直径为 1358 mm，下底直径为 1158 mm，高为 2000 mm，中孔直径为 350 mm，约 20 t，其形状尺寸见图 5。

得到在 2.9 h 温度见图 6。核心部分仍处于熔融态（在后续工艺中将会挤压去除此部分），边界向外

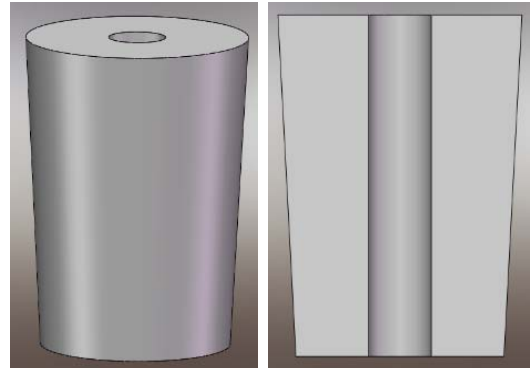


图5 液芯挤压锭  
Fig.5 Core extrusion ingot

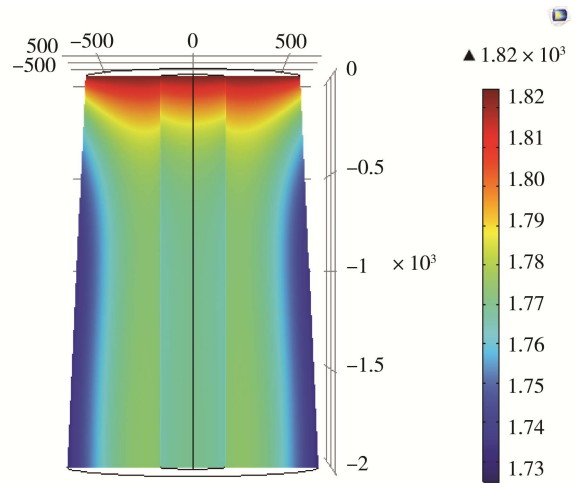


图6 液芯挤压锭温度(K)  
Fig.6 Temperature of core extrusion ingot

为固态部分。凝固过程属于连续过程，无明显固液态界面，因此仅能以宏观层面判断何时开始施以外力最佳。实验发现凝固过程在 2.9 h 时，外层凝固厚度达 500 mm，可以开始进行挤压。

### 2.4 液芯挤压锭力学耦合分析

把加工对象视为一个组合体，分为内外两部分，内层为尚未凝固的熔融态钢液，具有流动性，外环为已完成凝固的固态钢锭，由上方施予一外力在内层钢液上，使中间液芯从上至下挤出，其受力方程见式(5)和式(6)。

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot S + Fv \tag{5}$$

$$F = 1 + \nabla u \tag{6}$$

式中： $F$  代表受力 (N)； $u$  是位移场 (m)； $v$  为速度场 (m/s)； $S$  为施力所移动的距离 (m)。在挤压过程中段，受力面需考虑摩擦力造成的影响，其方程见式(7)。

$$T_t \leq \min(\mu T_n + T_{cohe}, T_{t,max}) \tag{7}$$

式中： $u = u_{start}$  是静摩擦因数； $T_{t,max}$  是最大切引力 (N/m<sup>2</sup>)； $T_{cohe}$  是抗滑阻力 (N/m<sup>2</sup>)。

在考虑摩擦后,模拟精度将会大大提升,但仍存在液态与固态间摩擦不同的差异,而在模拟过程中也假设挤压界面刚好为液、固态分界面,且挤压过程无凝固发生。

在力学挤压模拟完成后再设定耦合参数,此次模拟的 45# 钢铸锭凝固过程的对流热通量见式(8)。

$$q_0 = h \cdot (T_{\text{ext}} - T_2) \quad (8)$$

式中:  $q_0$  是对流热通量;  $(T_{\text{ext}} - T_2)$  是上下钢锭温度差; 热传系数  $h$  分为模具对钢锭的传热  $h_{\text{mold}}$ 、自由面与空气间的对流  $h_{\text{spray}}$ 、钢锭在凝固与未凝固界面间的对流  $h_{\text{solid-liquid}}$ 。其他边界与初始值包含温度、固液态两相的密度、热容、导热率、导热系数。

挤压过程与凝固过程的耦合部分,首先设定材料为 1500 °C 初始温度的线弹性钢锭,在耦合前,先假设固液态界面在加工过程中是快速受力且不再有凝固的发生,并且一开始并无任何位移的发生,即耦合前受力过程是不受其他因素影响的独立过程。其中边界载荷计算方程见式(9)。

$$F_A = \frac{F_{\text{tot}}}{A} \quad (9)$$

式中:  $F_A$  是每平方公尺所受的力 ( $\text{N}/\text{m}^2$ );  $F_{\text{tot}}$  为载荷总力 ( $\text{N}$ )。

耦合完成后,细化网格划分,将时间范围设定在开始凝固到 1000 s 的过程,并且以每次 0.1 s 为一步长做迭代计算,以+y 方向将液芯挤出。

目前定义挤压过程受力面为无摩擦之自由面,将会造成一定误差,待优化过程做后续改善。

在上方受到一个 30  $\text{kN}/\text{m}^2$  的外力时,中央液态逐渐向外挤出约 1500 kg 钢水,并完成挤压工序。

利用 COMSOL Multiphysics 软件中固体传热、流体传热与固体力学接口的各公式间相互转换与耦合,可获得工序的工艺过程模拟,到现场与实际生产之钢锭进行对比与优化后,可以得到符合工序的模拟结果。

## 2.5 成形案例小结

实心钢锭缺陷主要分布在中心部分,此处最晚凝固,且会产生较大缺陷,空心钢锭在中心边缘易产生疏松现象,可以根据设定合适工艺参数与冒口位置来解决此问题,液芯挤压锭可以将中心缺陷较多的位置去除,减少缺陷在钢锭中的比例。

模拟完成后分析缺陷位置是优化工艺的重要环节,钢锭在成形过程中将产生大量缺陷,由于尺寸较大的缺陷在后续工艺中难以消除,因此若不在成形过程中解决此问题,将会影响工件质量,严重缺陷甚至造成工件报废的问题。此次把中间液芯挤出,除了符合工件形状要求外,还能将大型缺陷如气泡、气孔最易形成的区域挤出,增加成形强度,更能在后期,将此材料的本构模型与工件其他参数汇入材料基因组

计划中,并且得到有效利用。

中心疏松是钢锭凝固过程中常会出现的缺陷之一,是由气体、低熔点杂质、偏析组元组成的不致密组织,会明显影响铸坯质量,和浇铸速度、浇铸温度、铸坯断面形状有关。气孔是凝固过程常见缺陷,由于温度下降,气体析出形成气孔,会对工件产生较明显影响。液芯挤压后,将会减少疏松、气孔等缺陷,工件质量将大幅提升。

偏析在工艺过程中也会严重影响铸锻件强度,而偏析主要可以从晶内偏析、晶界偏析和宏观偏析开始分析,而模拟能针对宏观偏析来做分析。

## 3 高通量实验

### 3.1 高通量实验介绍

1970 年, Hanak 将多样品实验方法应用于薄膜超导材料,方法是一次测量多个样品阵列中的样品成分、结构及性能,在经过计算机处理后,呈现出相关技术,但当时由于计算机性能不够强大,造成此技术受到限制,直到 1990 年代末期,高通量方法才较广泛地应用于金属、陶瓷、高分子等材料中。

材料高通量实验初步概念为通过一次实验完成多个材料参数的测定,并以简单、快速、无损及全面的方式采集与分析材料的参数及性能,最后经过计算机数据处理,建立表格、图形等形式,表示实验结果。

现代材料的高通量实验首先强调设计组合实验,并制备材料库与需表征的材料参数,最后建立数据库与模拟对比优化,最终达到舍弃复杂实验,降低研发成本的目的。其中高通量设计过程有 3 个基本原则:

清晰定义目标、目的、待解决问题与可获得信息; 找出相关参数,并利用计算模型作为指导,缩小实验范围,即理论与实验协作; 清晰定义材料制备与表征能力。

高通量实验在各领域都能够有合适的应用,在生物医疗领域可以利用高通量方式测序,可以得到新生突变 (DNMS) 或遗传疾病等关键问题; 材料化工领域利用高通量实验研发新材料配方,取代传统试错法; 在新能源科学领域能够找出合适稳定结构来制作新能源材料。

钢铁成形过程可以测量到的参数很多,温度、应力、缺陷、微观组织、密度等都可以通过实验与理论的对比,建立高通量数据库,而在锻造过程中,墩粗、拔长、冲孔、扩孔、弯曲、轴心拔长、错移、扭转、刹切等道工序间的材料参数也可以通过理论设计,建立起庞大的高通量参数。

COMSOL 在高通量领域主要的应用是模拟工艺过程,设计出参数测量方案并用于工艺上,进而实现

高通量的制备。在高通量实验过后,COMSOL 软件的耦合特性更能验证高通量实验的正确性,并设计出测量多参数的工艺方案。

### 3.2 组合实验设计(凝固与成形过程案例)

本课题利用 COMSOL 软件建立的高通量实验主要体现在成形过程与锻造过程。在成形过程,主要设计实验方法来检测成形过程的部分参数,设计实验方案使浇注过程能获得温度、界面移动过程等多个参数,在凝固完成后,检测并建立材料的微观组织、缺陷数据库,包含表面应力、残余应力、疏松、缩孔、偏析等。在锻造过程中,COMSOL 软件可以模拟锻粗、拔长、冲孔和弯曲过程中的实验过程,针对实验过程中常用且易出现缺陷的工序进行模拟,建立起各道工序的缺陷数据库。

成形过程中,实验设计为先利用 COMSOL 软件模拟生产过程,利用凝固过程温度的变化与力学过程相耦合判断缺陷位置,再到工厂中生产出工件并测量,算出密度,将热电偶安置在模具上,浇注后

直接实时检测温度变化,并以 X 光机检测疏松、缩孔、偏析等多项缺陷参数,最后在切片检测微观组织、光谱、极谱、晶粒度,收集图片,建立高通量数据。

锻造过程首先利用软件模拟锻粗、拔长、冲孔和弯曲过程中应力应变的分布,再针对模拟结果对工序后工件易出现的缺陷部分进行缺陷分析,以 X 光机检测疏松、缩孔、偏析等多项缺陷参数,最后在切片检测微观组织、光谱、极谱、晶粒度,收集图片,建立高通量数据。

实验过程所需设备为模拟软件 COMSOL,用以减少实验过程的时间与成本;电偶、X 射线检测设备、相机、显微镜等用以检测各项参数以建立数据库。而对材料的成分与特性的测定,通常采用 X 射线、紫外线等各种波段的波谱来实现,其中硬 X 射线(波长在 0.01~0.1 nm 能量较高的 X 射线)具有高穿透性等优点,能动态观察材料的微观尺寸的物理化学性质,并能较好检测固、液界面性质与材料的缺陷问题,实验参数、设备与检测原因见表 2。

表 2 实验参数、设备与检测原因  
Tab.2 Test parameters, equipment and testing reasons

参数	设备	检测原因
温度	热电偶	钢锭成形重要参数,温度变化影响钢锭缺陷数量
表面应力	X射线	造成表面缺陷,改善工艺过程
残余应力	X射线	判断缺陷位置,改善工艺过程
疏松	X射线或超声检测	检测出缺陷可优化工艺,并可建立高通量数据库
缩孔	X射线或超声检测	改善工艺过程,可建立高通量数据库
偏析	金相、X射线或超声检测	改善工艺过程,可建立高通量数据库
微观组织(无缺陷)	显微镜	建立高通量数据库
微观组织(有缺陷)	显微镜	建立高通量数据库
光谱分析	光电比色分析	建立高通量数据库
晶粒度检测	金相实验	建立高通量数据库

## 4 数据管理

美国材料基因组计划核心理念是将以往纯靠实验的工艺过程,利用理论与模拟,减少实验所消耗的资源,将成本与周期降低的一种方式,其中数据库占整个计划中重要的环节,且由于工艺过程的许多问题与关键步骤都在前期成形过程就产生,本课题期望利用成形过程与锻造过程所得的参数与缺陷微观组织等资料,构建合适数据库,为材料基因组计划做一个铺垫。

数据库是电子化管理数据的系统,主要有储存、保障、方便搜寻等优点,常用的数据库有 MySQL, SQL Server, Oracle, Sybase, DB2 等,其中 MySQL 是开源软件且服务器可靠、易于使用;SQL 是微软公司开发的软件,常用于 web 储存;Oracle 的数据面较广,

共用性与可靠性较高。

计划中数据管理是以数据库技术为基础,对材料的成分、工艺、结构、性能进行设计分类,满足工艺过程设计、性能研制与选材等不同层次的需求,建立专业数据库系统,除了搜索功能外,提供各种后处理数据及工艺选择,并提供管理与共享方案,为材料开发提供更专业化的解决方案。

## 5 结语

研发新材料时利用高通量来预测实验过程与结果,可以减少实验试误成本,指导新工艺来达到材料参数要求。在实验过程中,利用高通量实验,一次获得多个参数,更能大大降低研发周期,最后再将所获得的参数记录在数据库中,构建材料基因数

据库。

模拟软件的使用, 使工业研发周期大大降低, 针对不同的工艺过程, 挑选合适的模拟软件可以事半功倍。在模拟多参数与多工艺的工艺过程, COMSOL 软件提供许多有利条件, 强大的耦合效果更能使模拟精确度提升, 因此在本课题方面 COMSOL 软件带来了许多优势, 其一是凝固过程可轻易控制几何模型与数学模型, 使凝固过程精确度提升, 而多种后处理模块更可以判断缺陷与其他特征。再者, 凝固与挤压的良好耦合使模拟更精准判断挤压过程各项参数。

#### 参考文献:

- [1] ANNALISA P, MARCELLO G, GIOVINA L V. Comprehensive Numerical Simulation of Filling and Solidification of Steel Ingots[J]. *Materials*, 2016, 9(9): 769—782.
- [2] 魏鑫燕, 朱荣, 林腾昌. 大钢锭凝固过程的数值模拟研究[J]. *铸造技术*, 2011, 32(11): 1576—1579.  
WEI Xin-yan, ZHU Rong, LIN Teng-chang. Numerical Simulation on Temperature Field in Ingot Solidification Process[J]. *Foundry Technology*, 2011, 32(11): 1576—1579.
- [3] 金泉林. 大型锻件锻造与工艺数值模拟[C]// 2011 年全国塑性力学会议, 2011.  
JIN Quan-lin. Numerical Simulation on Forging and Process in Large Forgings[C]// 2011 National Conference on Plastic Mechanics, 2011.
- [4] 董洁. 锻造用钢锭凝固过程温度场、应力场的数值模拟及其应用[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2005.  
DONG Jie. Numerical Simulation of Temperature and Thermal Stress Field in Steel Ingot Solidification Process and Application[D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2005.
- [5] 柳百成. 铸件充型凝固过程数值模拟国内外研究进展[J]. *铸造*, 1999(8): 40—45.  
LIU Bai-cheng. Research Progress on Numerical Simulation of Casting Filling Solidification Process at Home and Abroad[J]. *Casting*, 1999(8): 40—45.
- [6] 柳百成. 铸件凝固过程的宏观及微观模拟仿真研究进展[J]. *中国工程科学*, 2000, 2(9): 29—37.  
LIU Bai-cheng. Progress in Macro and Micro Modeling of Solidification Process of Shaped Casting[J]. *Engineering Science*, 2000, 2(9): 29—37.
- [7] R W. The Finite Element Method in Plane Stress Analysis[J]. *Conference on Electronic Computation*, 1960, 87: 345—378.
- [8] ZIENKIEWICZ O C. The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics: Numerical Solution of Problems in Structural and Continuum Mechanics[M]. McGraw-Hill Publishing Company Limited, 1967.
- [9] 李昊. 空心钢锭凝固过程的温度场模拟[D]. 沈阳: 沈阳大学, 2015.  
LI Hao. Temperature Field Simulation of Hollow Ingot Solidification Process[D]. Shenyang: Shenyang University, 2015.
- [10] 王开坤, 曾攀. 半固态 A356 铝合金触变锻造成形过程有限元模拟[J]. *特种铸造及有色合金*, 2007, 27(7): 518—521.  
WANG Kai-kun, ZENG Pan. FEM Simulation on Thixoforging of Aluminum Alloy A356[J]. *Special Casting & Nonferrous Alloys*, 2007, 27(7): 518—521.
- [11] 杜艳梅, 王开坤, 张鹏, 等. 半固态挤压铝/镁合金双金属复合管的有限元模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2009, 19(2): 208—216.  
DU Yan-mei, WANG Kai-kun, ZHANG Peng, et al. FEM Simulation on Extrusion of Double-layer Tube of Aluminum and Magnesium Alloys[J]. *Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2009, 19(2): 208—216.
- [12] 张博, 朱花, 赵晓东, 等. 空心钢锭凝固过程缺陷的模拟研究[J]. *太原科技大学学报*, 2018(1): 35—41.  
ZHANG Bo, ZHU Hua, ZHAO Xiao-dong, et al. Simulation of Solidification Processes of Hollow Ingots[J]. *Journal of Taiyuan University of Science & Technology*, 2018(1): 35—41.
- [13] 林海, 郑家新, 林原, 等. 材料基因组技术在新能源材料领域应用进展[J]. *储能科学与技术*, 2017, 6(5): 990—999.  
LIN Hai, ZHENG Jia-xin, LIN Yuan, et al. The Development of Material Genome Technology in the Field of New Energy Materials[J]. *Energy Storage Science & Technology*, 2017, 6(5): 990—999.
- [14] 向勇, 闫宗楷, 朱焱麟, 等. 材料基因组技术前沿进展[J]. *电子科技大学学报*, 2016, 45(4): 634—649.  
XIANG Yong, YAN Zong-kai, ZHU Yan-lin, et al. Progress on Materials Genome Technology[J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology of China*, 2016, 45(4): 634—649.
- [15] 王海舟, 汪洪, 丁洪, 等. 材料的高通量制备与表征技术[J]. *科技导报*, 2015, 33(10): 31—49.  
WANG Hai-zhou, WANG Hong, DING Hong, et al. Progress in High-throughput Materials Synthesis and Characterization[J]. *Science & Technology Review*, 2015, 33(10): 31—49.
- [16] 赵继成. 材料基因组计划简介[J]. *自然杂志*, 2014, 36(2): 89—104.  
ZHAO Ji-cheng. A Perspective on the Materials Genome

- Initiative[J]. Chinese Journal of Nature, 2014, 36(2): 89—104.
- [17] 关永军, 陈柳, 王金三. 材料基因组技术内涵与发展趋势[J]. 航空材料学报, 2016, 36(3): 71—78.  
GUAN Yong-jun, CHEN Liu, WANG Jin-san. Materials Genome Technology and Its Development Trend[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2016, 36(3): 71—78.
- [18] 杨小渝. 加快材料基因组工程信息化基础设施的建设[J]. 科技导报, 2016, 34(8): 13—14.  
YANG Xiao-yu. Accelerate the Construction of Informatization Infrastructure of Material Genome Project[J]. Science & Technology Review, 2016, 34(8): 13—14.
- [19] ZHAO J C, ZHENG X, CAHILL D G. High-throughput Measurements of Materials Properties[J]. JOM, 2011, 63(3): 40—44.
- [20] LIU J, LIU R, CHEN L, et al. Numerical Simulation of Solidification Microstructure and Effects of Phase-field Parameters on Grain Growth Morphologies[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2005, 21(6): 921—924.