

数值模拟技术在高温合金中的应用

刘孝山^{1, 2}, 宋 旻¹, 夏圣旭², 郭建政^{1, 2}

(1. 中南大学 粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙 410083;
2. 深圳市万泽中南研究院有限公司, 广东深圳 518000)

摘要: 在航空、航天及能源等尖端科技领域, 高温合金凭借其在极端环境下的优异性能已成为不可或缺的关键材料。然而, 其复杂的化学成分及多尺度精细组织结构给传统试验研究带来了巨大挑战。此类研究普遍存在周期长、成本高、难以系统解析多重影响因素协同作用等问题, 导致研究效率受限, 难以满足现代工业对高温合金材料开发与性能优化的迫切需求。随着计算技术和算法的不断进步, 基于数值模拟的高温合金研究体系应运而生, 并迅速成为材料科学领域的关键研究方法。通过构建高保真度的多物理场耦合模型, 该技术能够深入探索高温合金的微观组织演化机制、宏观力学行为响应特性以及复杂工艺参数间的定量关联, 从而为材料成分设计、工艺参数优化和服役性能预测提供科学依据。本文概述了数值模拟技术在高温合金研究领域的一些具体应用, 并对其未来的发展趋势进行了展望。

关键词: 高温合金; 数值模拟; 微观组织; 力学性能; 工艺过程

作者简介:

刘孝山 (1987-), 男, 博士生, 主要研究方向为镍基高温合金热端部件工艺过程仿真研究。E-mail: liuxs@wedge.com.cn

通信作者:

郭建政, 男, 教授, 博士, 博士生导师。电话: 0755-83013744, E-mail: 218062@csu.edu.cn

中图分类号: TG132.3

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977 (2025) 07-0880-15

基金项目:

国家重点研发计划 (2021YFB3702900); 国家科技重大专项 (2024ZD0600900); 深圳市科技重大专项 (JZD20230923113900001)。

收稿日期:

2025-03-13 收到初稿,
2025-04-09 收到修订稿。

在航空航天和能源等战略科技领域, 高温合金作为关键性结构材料, 其综合性能直接影响尖端装备的可靠性指标与能效水平^[1-2]。高温合金凭借其卓越的高温力学强度、高温抗氧化特性及抗蠕变性能, 在航空发动机热端部件和发电设备的核心组件等极端工况环境中广泛应用, 已成为支撑现代工业技术革新的战略性基础材料^[3-4]。

然而, 高温合金复杂的多组元合金体系与多尺度微观组织特征, 给传统试验研究方法带来了极大挑战。传统“试错法”研究路线存在试验周期长、经济成本高和变量控制困难等局限性, 难以系统解析多因素耦合作用机制, 严重制约材料研发进程, 已无法适应工业界对高温合金快速开发与性能优化需求的迭代升级。

近年来, 随着材料科学与计算机技术的深度融合, 数值模拟技术在高温合金的研究、开发与应用中, 正逐步凸显出无可替代的价值, 成为推动高温合金性能飞跃和创新应用的核心驱动力。通过构建精准的数学模型与物理模型, 数值模拟能够深度探究高温合金在不同条件下的微观组织演变、力学性能响应以及加工工艺过程, 可以进行包括合金设计、加工过程中的缺陷形成和组织演变预测、性能计算直至服役寿命评估, 可实现材料全寿命周期预测的技术闭环。

1 合金设计

1.1 计算热力学与相图计算

计算相图法 (Calculation of Phase Diagrams, CALPHAD) 是高温合金材料研发的关键技术方法^[5]。其核心在于以热力学原理为根基, 将高温合金体系内的自由能精准地表示为温度、成分以及相结构等变量的函数。通过构建包含各类纯组元及化合物热力学参数的数据库, 运用特定算法与专业软件, 能够精确计算不同条件下合金体系中各相的平衡状态, 进而绘制出相图^[6]。

在镍基高温合金的设计过程中, 采用CALPHAD方法结合计算机模拟技术, 可

高效获取相平衡信息与相图数据,从而有效预测多元复杂体系的相演化规律,为新型高温合金的成分配比设计和工艺参数优化提供理论支撑。基于相图计算结果,可依据高温服役环境特征明确界定合金成分的优化区间,系统性地规避拓扑密堆相等亚稳有害相的形成风险,确保合金在极端工况下的组织稳定性与服役可靠性^[7-8]。

吴磊等基于 CALPHAD 方法,依托 Thermo-Calc 软件平台,结合相图热力学理论及配套数据库,系统开展了 GH3230 高温合金瞬态液相扩散连接的中间层合金设计研究^[9]。通过系统分析中间层材料的固/液相线温度及金属间化合物析出规律,最终优选出以硼为降熔元素,钴和钨作为强化相的新型镍基中间层合金体系。试验结果表明,该合金体系成功实现了 GH3230 高温合金的高质量连接,显著提升了焊接接头的综合性能。

CALPHAD 方法对热力学数据库具有高度依赖性,其计算结果的可靠性直接受限于数据库的准确性和完整度^[10-11]。针对部分新型高温合金体系,由于相关基础研究数据积累不足,数据库中部分热力学参数存在精度不足或缺失问题,导致该体系下热力学模型的准确性及相图计算的可靠性亟待提升^[12]。

1.2 高通量计算

高通量计算凭借强大的计算能力,能够在短时间内对海量的合金成分组合进行性能计算。利用第一性原理计算和分子动力学模拟等方法,在超大规模的成分空间中进行扫描,快速筛选出具有潜在优异性能的合金成分^[13-14]。机器学习可在高通量计算所产生的海量数据以及过往试验数据的基础上,充分发挥其独特的数据挖掘优势。通过构建深度神经网络和集成决策树等多元算法模型,机器学习算法可深度解析合金成分、微观组织与宏观性能间复杂的非线性映射关系。二者的深度融合构建了一种高效协同的研究范式:高通量计算实现材料空间的全局探索,机器学习完成多维关联的智能解析,最终形成涵盖材料设计、性能预测及工艺优化的完整技术链条,显著提升新材料研发效率并降低创新成本。

祝亚亮等将热力学计算与机器学习方法相结合,构建了镍基高温合金热力学性能导向的逆向设计框架^[15]。针对目标热力学性能建立了多个成分-性能关联模型,并基于机器学习驱动筛选方法完成合金成分逆向设计,最终推荐的8种合金成分方案均满足预设性能指标。汪东红等针对航空发动机涡轮机匣类结构件对高温合金材料性能及铸造成形工艺的特殊需求,开发了基于并行计算架构的高通量热动力学模拟

平台^[16]。通过整合镍基铸造高温合金的多元筛选判据,系统评估了520万种合金成分组合,最终成功开发出一种新型镍基铸造高温合金。试验数据显示,该合金在815 °C/400 MPa高温应力条件下的持久寿命优于国外的Inconel 939合金。

2 组织模拟

高温合金的微观组织,包括晶粒尺寸、晶体取向、析出强化相分布及再结晶等,对其材料性能具有至关重要的影响。

2.1 晶粒组织

合金成形过程涵盖一系列耦合物理现象,如化学变化、相变行为、传热机制、熔体流动、显微结构演变以及残余应力演化等^[17]。建立晶粒组织模型的主要目标在于实现对材料显微组织的定量预测,如晶粒尺寸分布和晶体取向等,为后续建立力学性能与寿命预测模型奠定理论基础^[18-20]。在凝固过程组织生长数值模拟领域,相场法与元胞自动机(Cellular Automata, CA)作为两类主流数值模拟方法,已形成较为完善的技术体系^[21]。

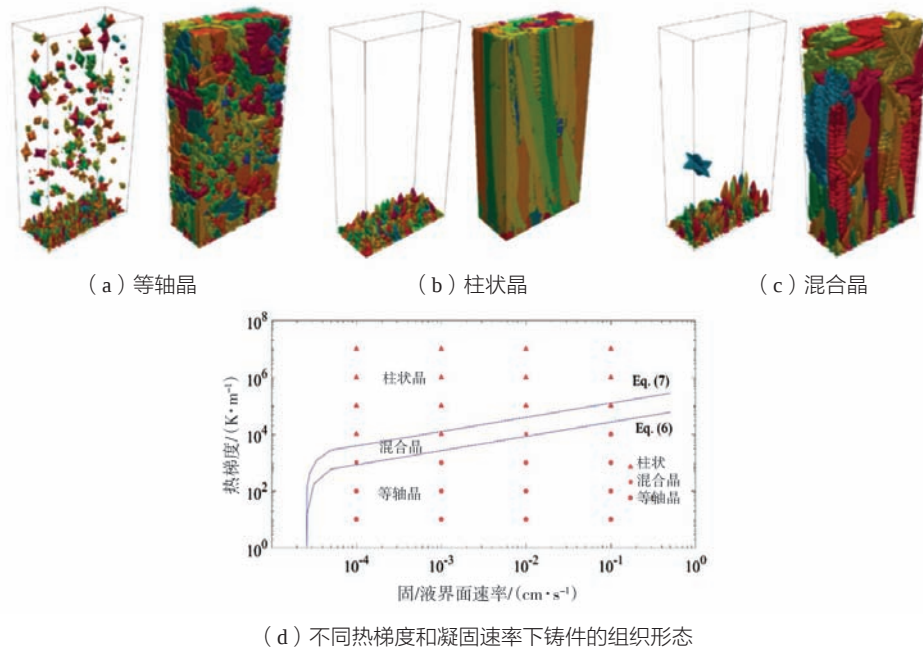
相场法通过相场变量构建的控制方程组,将材料固液两相的空间分布表征为时空连续函数,并耦合求解热量传输与溶质扩散方程^[22-23]。该方法在铸件凝固过程数值模拟中有两大理论优势:一是采用连续扩散界面机制,界面捕捉更精确,能清晰分析枝晶形状和溶质分布;二是基于热力学自由能模型,可直接模拟固液相变和溶质迁移。但工程应用存在两个难点:数值计算量急剧增加,高精度网格划分使计算复杂度大幅提升;内存消耗过大,现有技术难以实现厘米级铸件宏观凝固模拟,限制了工业应用。

许庆彦等开发了耦合热力学数据库的相场模型,用以模拟多元镍基高温合金的枝晶生长过程^[24]。为实现大尺度范围内的多元高温合金枝晶生长的相场数值模拟,其采用了基于图形处理器的并行计算构架,显著提升了数值模拟的计算效率。针对定向凝固过程中单晶枝晶的形貌演化开展了数值模拟研究,结果表明:自基底形成的枝晶臂经历了由瞬态生长向稳态生长转变的过程,其演化机制受传热过程与溶质扩散机制共同调控。

NABAVIZADEH等为深入解析柱状晶-等轴晶转变机制,建立了基于相场-晶格玻尔兹曼耦合的三维数值模型,对Inconel 718镍基高温合金的定向凝固过程进行高精度数值模拟。研究中采用相场法精确表征固-液相变行为,在求解多组元溶质扩散方程时创新性地引入晶格玻尔兹曼方法^[25]。通过系统研究,成功构建了温

度梯度与生长速率双变量参数空间下的凝固组织演化相图，并系统分析了等轴晶、柱状晶及混合晶区的枝

晶形貌动态演变规律。图1展示了Incone1718合金凝固过程的组织演变图^[25]。



(d) 不同热梯度和凝固速率下铸件的组织形态

图1 Incone1718合金凝固过程的组织演变图

Fig. 1 Evolution diagram of the structural morphologies during solidification processes of the Inconel 718 alloys

CA模型是一种通过网格单元模拟复杂系统演变的算法。它将确定性或概率性规则应用到每个网格单元，实现系统状态的离散化计算^[26]。该方法优势在于计算速度快、复杂度低，适用于宏观尺度的数值模拟，并能灵活结合热传导、流体流动等物理过程。但CA模型也存在不足：一是网格精度限制导致难以精确描述凝固界面形态和动力学行为，二是简化物理机制后难以准确反映相变过程中的热力学与动力学耦合规律^[27]。

CA模型可与有限元热流求解器耦合使用。例如由Rappaz及其合作者开发的CAFé (Cellular Automaton-

Finite Element) 模型，能够有效模拟金属凝固过程中晶粒的形核与生长行为。基于此方法，研究人员可对合金凝固过程中的胞状晶-等轴晶转变进行数值模拟预测^[28]。迄今为止，铸造合金凝固组织形成机制的数值模拟领域已开发出多种模型体系^[29-31]。

Cameron等使用三维元胞自动机有限元方法，对316L钢和IN625高温合金在金属增材制造所产生的微观结构进行数值模拟研究^[29]。提出了一种基于三维元胞自动机的仿真计算方法，用于快速高通量合成多晶微观结构，并用于评估弹塑性特性的晶体塑性模型。IN625合金微观组织数值模拟结果见图2^[32]。通过建立

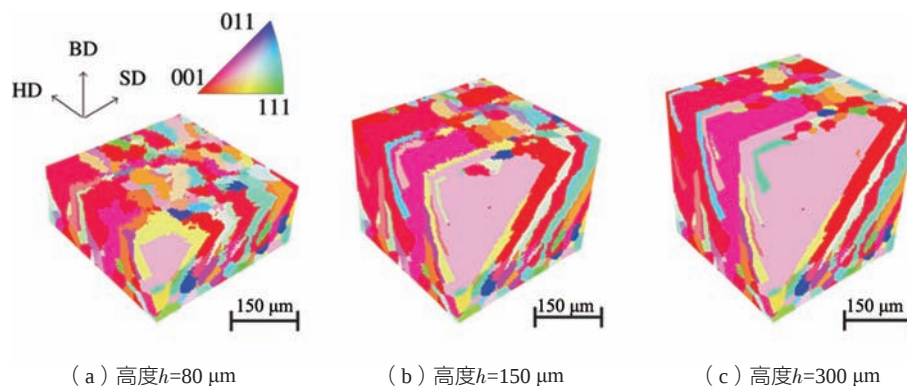


图2 IN625合金微观组织数值模拟结果

Fig. 2 Numerical simulation results of the microstructure of IN625 alloy

加工工艺参数与力学性能测试之间的映射关系,成功实现了对激光粉末床熔融关键工艺参数(包括激光功率、光斑直径、扫描速度及舱口宽度)影响微观结构特征的定量表征。

相场法与元胞自动机方法在凝固组织数值模拟领域各具特色且优势互补。相场法凭借其严格的物理场方程描述能力,在微观相变机制与界面演化的精确表征方面具有不可替代的理论优势;而元胞自动机方法则以其高效的网格化计算特征,在宏观尺度数值模拟中表现卓越,占据主导地位。未来,随着跨尺度耦合技术的突破性进展和机器学习算法的多维度嵌入,以及高性能并行计算架构的持续提升,这两种方法正在向多物理场耦合和跨尺度协同的集成化数值模拟范式

演进。

2.2 强化相演化模拟

模拟析出强化相演化可以为揭示微观结构演变与宏观性能之间的关联提供理论支持,尤其在镍基高温合金和高熵合金等体系中被广泛应用^[33-34]。目前广泛采用的方法包括相场法和分子动力学方法^[35-36]。

相场法适用于研究沉淀相的形核、生长及多相竞争过程。Zhang等基于微观相场模型,研究了 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{4.2}\text{V}_{20.8}$ 相变过程中 $\text{Ni}_3\text{V}-\text{DO}_{22}$ 相中合金元素占位几率演化规律与 $\text{Ni}_3\text{Al}-\text{L}_{12}$ 相长大之间的内在关联^[34]。结果表明, L_{12} 相长大过程可以分为两个阶段。相转变的原子微观结构演变见图3^[37]。

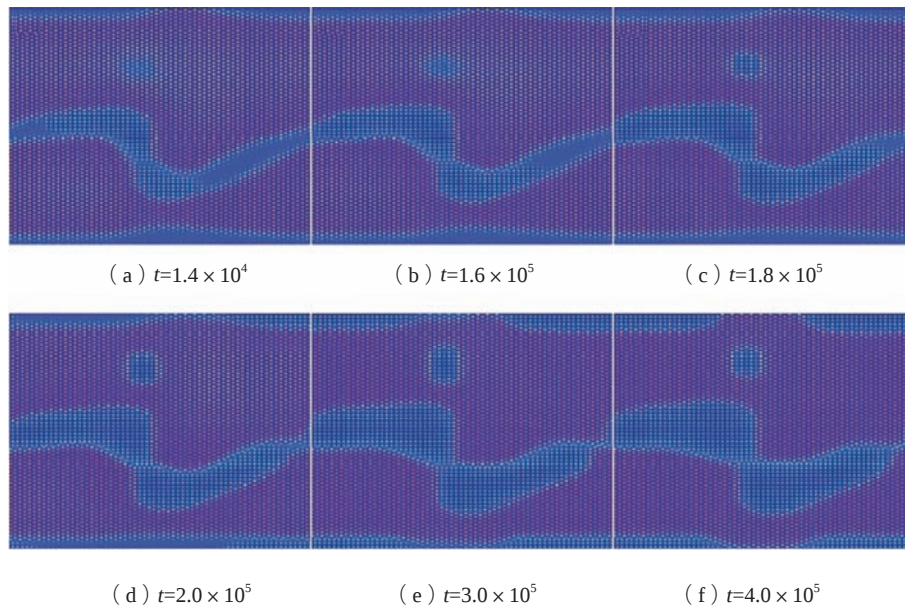


图3 1185 K温度下 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{4.2}\text{V}_{20.8}$ 从无序(FCC-A1)相转变为有序(L_{12} 和 DO_{22})相的过程中模拟的原子微观结构演变

Fig. 3 Simulated atomic microstructural evolution during the transformation from the disordered (FCC-A1)

phases to the ordered (L_{12} and DO_{22}) phases of $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{4.2}\text{V}_{20.8}$ at a temperature of 1185 K

镍基高温合金中 γ' 相的粗化行为对合金的性能有显著影响。Zhou等人通过建立合适的相场模型,对镍基高温合金中的 γ' 相粗化进行了计算^[35]。研究表明,不同化学成分的含量变化会显著影响 γ' 相的粗化动力学;热机械载荷可能会加速或减缓 γ' 相的粗化过程;弹性场也会影响镍基高温合金中 γ' 相的粗化行为。在沉淀析出过程中,动力学因素起着关键作用,动力学模型考虑了原子扩散、形核和长大等过程^[38]。徐聪等基于微观相场动力学模型,研究原子间相互作用能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ 合金孕育期的影响。结果表明,先析出相为 DO_{22} 时, $\text{Ni}-\text{Al}$ 最近邻原子间作用能 $\text{VNi}-\text{Al}$ 增大, L_{12} 相的孕育期缩短, DO_{22} 相的孕育期变化不

明显; $\text{Ni}-\text{V}$ 最近邻原子间作用能 $\text{VNi}-\text{V}$ 增大, L_{12} 相和 DO_{22} 相的孕育期均缩短。先析出相为 L_{12} 相时, $\text{VNi}-\text{Al}$ 增大, L_{12} 相和 DO_{22} 相孕育期均缩短; $\text{VNi}-\text{V}$ 增大, L_{12} 相孕育期变化不明显, DO_{22} 相的孕育期缩短^[39]。在复杂多元高温合金体系中,存在多种元素,如镍基高温合金中的镍、铬、铝和钛等。这些元素之间的相互作用复杂,包括形成各种化合物和影响扩散速率等^[40-42]。例如,在 $\gamma'-\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$ 沉淀相的析出过程中,铝和钛的扩散行为会受到其他元素(如铬)的影响。铬可能改变基体的晶格参数,进而影响铝和钛原子的扩散通道和扩散速率。

2.3 再结晶过程模拟

在微观结构演变方面,再结晶过程引发显著的晶粒形貌重构^[43-44]。在未发生再结晶时,高温合金可能具有变形的晶粒结构,如拉长的晶粒形态。而经过再结晶后,新的无畸变等轴晶会形成。例如,在热轧后的镍基高温合金中,再结晶会使原本沿轧制方向拉长的晶粒逐渐转变为尺寸相对均匀的等轴晶,从而使晶粒结构更加均匀^[45-46]。当前主流的Monte Carlo方法和有限元模型虽能一定程度模拟再结晶行为,但在处理实际高温合金中复杂的晶粒交互作用时,其模拟精度仍存在显著不足^[47-48]。

Monte Carlo 方法在模拟再结晶过程中,主要是基于概率统计的原理^[49]。它将晶粒结构抽象为晶格模型,每个晶格点代表一个晶粒或者晶界区域。通过定义不同的能量状态(如晶界能和储存能等)和状态转变规则(如晶界迁移和晶粒吞并等),利用随机数生成器来模拟晶粒的生长和再结晶过程。在实际高温合金中,晶粒间的相互作用是非常复杂的^[50-52]。例如,Sarma等人提出了一种新的模拟金属静态再结晶的方法,该方法将冷变形的有限元模拟与恢复和晶粒生长的蒙特卡罗模拟相结合^[52]。采用基于晶体塑性的模型模拟晶粒集合体的变形,以捕捉单个晶粒的不均匀变形,以及集合体中的应变硬化和织构演变。然后将取向和存储能量的非均匀分布映射到蒙特卡罗网格上以模拟静态再结晶。该方法已被应用于计算不同冷变形量后的动力学和微观组织演变。

在再结晶数值模拟中,有限元模型可以考虑材料的应力-应变状态和温度分布等因素对再结晶的影响。有限元模型在模拟再结晶时,对于复杂的晶粒间相互作用的精度也有待提高。一方面,建立有限元模型需要大量的材料参数,而对于实际高温合金中的一些微观结构参数(如晶界扩散系数和晶界迁移激活能等)往往很难准确获取。另一方面,有限元模型在处理晶粒的拓扑变化(如晶粒的合并和分裂等复杂过程)时较为困难,这导致在模拟实际高温合金复杂的再结晶行为时与真实情况存在一定的偏差。

3 性能预测

3.1 力学性能

晶体塑性理论以晶体微观结构和位错运动为基础,能够模拟单晶高温合金在高温条件下的变形行为,如位错滑移和攀移^[53-54]。在单晶高温合金中,位错滑移是主要的变形机制之一^[55]。模型通过考虑晶体的晶格取向、滑移系(晶体中允许位错滑移的晶面和晶向组合)以及位错的运动阻力(如晶格摩擦力和溶质原子的钉扎作用等)来模拟位错滑移过程。例如,对

于镍基单晶高温合金,其具有面心立方结构,模型会考虑{111}<110>滑移系。位错攀移主要发生在高温条件下,此时原子的扩散能力增强,模型会考虑空位扩散对位错攀移的促进作用,根据空位浓度、扩散系数以及位错线的能量状态等来模拟位错攀移过程。

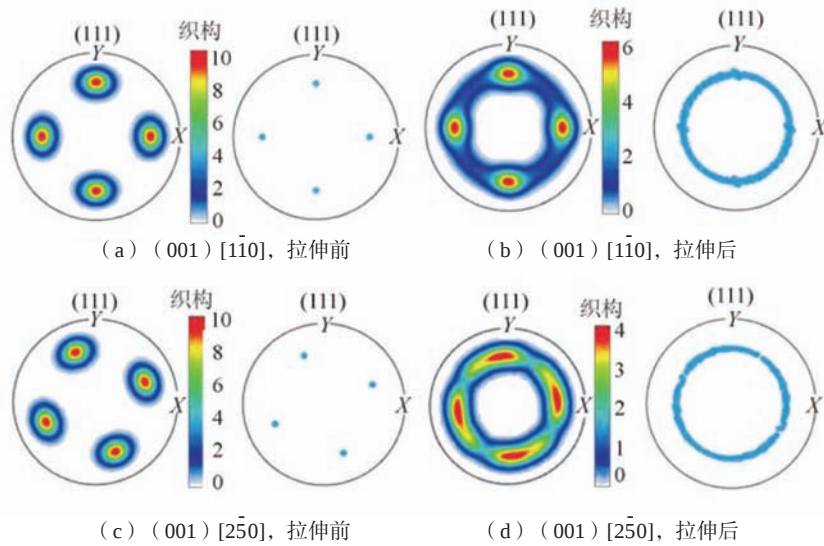
WANG等针对DD6合金在[001]取向进行了不同应力的受控低周疲劳试验,并结合各向异性损伤建立了新的晶体塑性模型,发现各向异性损伤模型可准确预测不同应力下的棘轮应变及确定不同损伤的演化模式^[56]。熊宇凯等采用基于位错机制的非局部晶体塑性本构模型对含冷却孔镍基单晶薄板的单拉变形进行了数值模拟,发现单孔和多孔的[110]薄板抗拉强度均低于[100]薄板,多孔薄板的塑性变形过程比单孔薄板更为复杂且受次级取向影响更大,同时发生滑移梯度位置主要位于冷却孔附近以及塑性滑移带区域^[57]。Yan等为了研究结晶取向对单晶超级合金纳米压痕行为的影响,在原子力显微镜下用Berkovich压头对[001]、[011]和[111]取向的镍基单晶超级合金进行了纳米压痕试验^[58]。试验结果表明,压痕载荷-深度曲线、硬度和弹性模量受结晶取向的显著影响。发现 γ 强化相的形状和体积分数依赖于结晶取向,这将影响力学性能。

单晶高温合金具有明显的各向异性,其不同晶体取向上的力学性能不同。在多轴加载时,这种各向异性会使材料的变形行为更加复杂。赵等采用晶体塑性有限元方法对DD6镍基单晶合金高温力学性能进行了研究^[59]。结果表明,一定加载速率下,不同取向单晶合金(223)[110]取向的屈服应力和弹性模量最大;不同取向滑移系的激活程度不同,其最大累积剪切应变数值也不同,材料不同取向的晶粒均发生了旋转,而(001)[110]取向的偏转角度最大。相同取向条件下,应变速率对弹性模量影响很小,而屈服应力与应变速率呈正相关。拉伸前后不同取向下的织构演化分别见图4^[59]。

晶体塑性理论模型中有许多参数需要通过试验来确定。例如,位错运动的激活能和滑移系的临界分切应力等参数对于模拟位错的滑移和攀移行为至关重要。这些参数很难通过理论计算得到准确值,必须依靠大量的试验,如拉伸试验、压缩试验和高温蠕变试验等来获取。而且,不同的单晶高温合金成分和制备工艺会导致这些参数有所差异,所以需要针对具体的合金体系进行试验数据收集。此外,模型中涉及的晶体微观结构信息,如初始位错密度和晶粒取向分布等也需要试验来确定。

3.2 寿命预测

高温条件下的蠕变和疲劳是高温合金的关键失效

图4 (001) $[1\bar{1}0]$ 和(001) $[2\bar{5}0]$ 方向拉伸前后不同取向下的织构演化Fig. 4 Texture evolution under different orientations before and after tension in the (001) $[1\bar{1}0]$ and (001) $[2\bar{5}0]$ directions

机制。基于蠕变动力学理论的数值模拟方法,如基于Norton-Bailey和 θ 投影法的模型,能够较好地描述蠕变行为^[60]。Norton-Bailey模型是基于幂律关系来描述蠕变应变率与应力和时间的关系。这个模型假设在恒定应力下,蠕变应变率与应力的幂次方成正比,与时间也存在幂律关系。在镍基高温合金的蠕变研究中,使用Norton-Bailey模型可以模拟在高温和一定应力水平下合金的最小蠕变率阶段。余等基于Norton本构模型,根据材料实测蠕变数据,建立了一种可以考虑局部应力集中的涡轮叶片蠕变寿命分析方法^[61]。针对某涡轴发动机燃气涡轮工作叶片开展有限元蠕变分析,计算得到涡轮叶片考虑蠕变松弛后的应力应变,明确了叶片危险部位位于尾缘气膜孔处。通过开展模拟铸件全寿命蠕变试验,验证该方法的有效性。研究表明,该方法可以考虑涡轮叶片危险部位应力集中情况,有效解决局部应力松弛的数值模拟,且拟合参数少,计算效率高,预测寿命与试验结果误差在1.5倍分散带内,具备工程适用性。对涡轮叶片进行了100 h下的蠕变数值模拟分析,叶身和气膜孔部位的蠕变应变分布见图5和图6^[61],根据计算结果可知,涡轮叶片蠕变变形最大部位为尾缘气膜孔处,需针对尾缘气膜孔开展模拟件设计工作。

θ 投影法是一种经验性的蠕变方程,它以多项式的形式描述蠕变应变随时间的变化。这种方法能够很好地拟合蠕变曲线的三个阶段(减速、稳态和加速阶段)。它考虑了蠕变过程中的初期应变积累、稳态蠕变和后期加速蠕变阶段,比Norton-Bailey模型更全面地描述了蠕变过程。张等在不同温度和不同应力条件下,对GH4169高温合金进行了蠕变试验,得到不同参

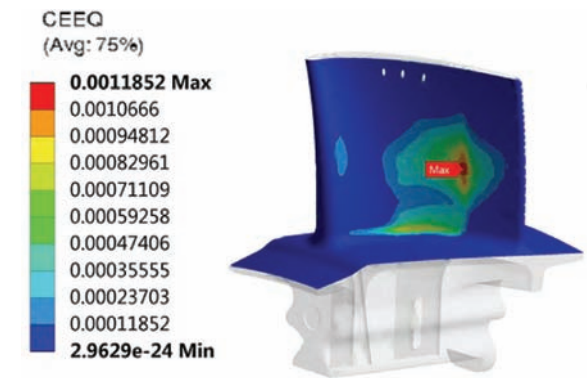


图5 叶身蠕变应变分布

Fig. 5 Creep strain distribution of the blade airfoil

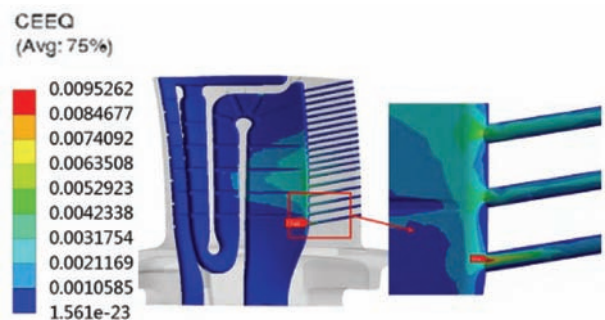


图6 气膜孔处蠕变应变分布

Fig. 6 Creep strain distribution at the film hole

数下的蠕变数据并绘制了相应的蠕变寿命曲线^[62]。利用修正 θ 投影法,对得到的试验寿命曲线进行非线性拟合,建立了温度、应力相关的蠕变方程。用所建立的蠕变方程验证了GH4169高温合金蠕变寿命曲线,结

果表明吻合性较好, 达到了蠕变寿命预测的效果。

LI 等在 980 °C 下对 DD5 镍基高温合金进行了不同取向角的疲劳试验和晶体塑性有限元分析, 定量分析了实际取向偏差对 DD5 合金疲劳寿命的影响, 发现疲劳寿命随着取向角的增大而减小^[63]。

在预测单晶高温合金的疲劳寿命方面, 机器学习方法可以结合合金的微观结构特征(如晶界特征和析出相分布等)和加载条件(如应力幅值和加载频率等)来建立预测模型。通过对大量疲劳试验数据的学习, 模型可以预测在给定条件下合金的疲劳寿命。并且, 机器学习方法还可以用于优化合金的成分和工艺, 根据预测的力学性能目标, 寻找最佳的合金成分和加工工艺参数组合。

刘等以高温合金 K4169 为基础, 采用机器学习的方法建立了材料微观组织和力学性能之间关系的模型^[64]。结果表明, 多层感知器模型对合金室温拉伸强度的预测结果均方误差为 0.17、平均绝对误差为 0.32、相关系数为 0.95、决定系数为 0.85, 对合金高温拉伸强度的预测结果均方误差为 0.14、平均绝对误差为 0.29、相关系数为 0.97、决定系数为 0.91, 与其余 3 种算法建立的模型相比, 多层感知器模型的预测结果更准确。

在实际服役环境中, 高温合金面临着复杂的加载条件, 如多轴非比例加载和随机加载等^[65]。例如, 航空发动机叶片在旋转过程中, 受到离心力、气动力和热应力的综合作用, 这些应力的方向、大小和频率随时间变化。这种复杂的加载情况使得在微观尺度上晶体塑性模型中的位错运动变得更加复杂, 滑移系之间的交互作用难以准确描述^[66-67]。在宏观尺度上, 裂纹扩展模型中的应力强度因子计算也变得困难, 因为裂纹尖端的应力场受到多轴复杂应力的影响。

4 加工工艺过程模拟

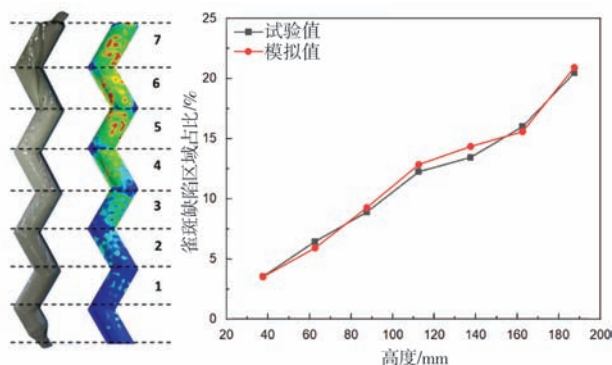
高温合金的加工工艺体系涵盖凝固成形、塑性变形及热处理等多个环节。这些工艺过程对材料的组织演变、缺陷形成以及最终性能具有决定性影响。通过数值模拟各个加工工艺过程, 可实现工艺参数的精准优化、微观组织的定向调控以及加工缺陷的有效抑制, 进而实现材料综合性能的显著提升。

4.1 凝固成形

铸造过程中的凝固行为直接决定铸件的微观组织与缺陷分布。在凝固速度较快的情况下, 合金可能会形成细小的等轴晶组织; 而凝固速度较慢时, 可能会出现柱状晶组织^[68]。此外, 凝固过程中的收缩现象是导致铸件缺陷的重要原因, 凝固过程中杂质和气体的上浮或卷入也会导致铸件出现夹杂和气孔等缺陷^[69-70]。

在航空航天领域, 缺陷直接影响构件的力学性能, 导致服役寿命缩短与耐久性下降。系统研究缺陷的形成机理和微观组织对性能的影响至关重要。

铸造缺陷, 主要包括缩孔缩松、雀斑、热裂和宏观偏析等, Guo 等详细讨论了这些缺陷的形成原理及预防措施^[71]。Liu 等通过构建凝固过程雀斑缺陷形成的计算模型, 实现了镍基单晶高温合金铸件雀斑缺陷的定量化预测^[72]。铸件雀斑缺陷的数值模拟结果和试验结果对比见图 7^[72], 研究结果表明, 随着铸件高度的增加, 铸件雀斑缺陷区域的面积均呈上升趋势, 模拟结果与试验检测数据具有较高的一致性。



(a) 模拟图

(b) 曲线图

图7 铸件雀斑缺陷的数值模拟结果和试验结果对比

Fig. 7 Comparison between the numerical simulation results and experimental results of the freckle defects in the casting

商业铸造模拟软件在凝固过程数值模拟方面表现出色, 具有强大的功能^[73-75]。杨等对第二代单晶高温合金 DD6 不同模组结构在高速凝固工艺下的温度场分布及晶粒演化规律进行了数值模拟研究, 系统分析了模组结构对叶片温度场演变特征及抽拉速率对杂晶缺陷的影响机制^[76]。单层模组结构示意图及其温度场及不同抽拉速率的晶粒组织演化模拟结果见图 8^[76]。研究表明: 单层模组因其中柱结构保温性能较弱, 导致叶片近中柱侧散热速率较快, 凝固过程中固液界面呈现显著弯曲特征, 易引发杂晶产生; 通过对单层模组添加套筒, 可有效改善温度场, 减小固液界面弯曲程度, 避免杂晶形核。

Xia 等研究了液态金属冷却工艺中模组内部凝固传热与外部自然对流的耦合作用机制^[77]。研究结果表明: 在凝固模组持续浸入液态金属冷却剂的过程中, 其与冷却介质间的等效传热系数呈现显著递减趋势。该衰减现象的主要原因在于冷却介质在导热与自然对流协同作用下产生温升效应, 导致其与高温合金模组之间的温度梯度持续减小, 进而削弱了系统的传热驱动力。图 9 展示了底座上方 7.5 cm 处参考点的温度变化曲线^[77]。蓝色和绿色虚线分别对应两种恒定传热系数

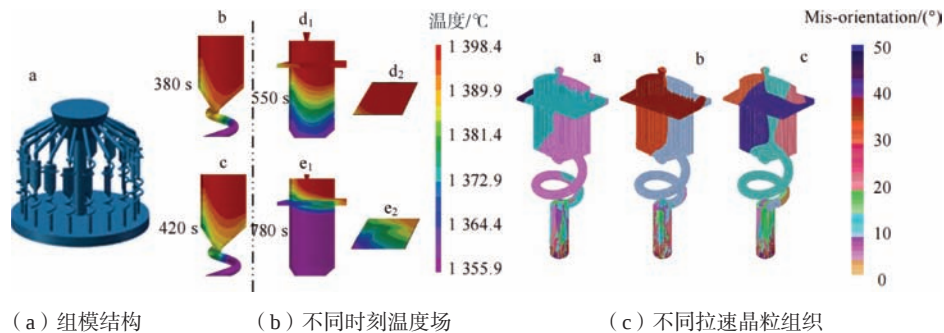
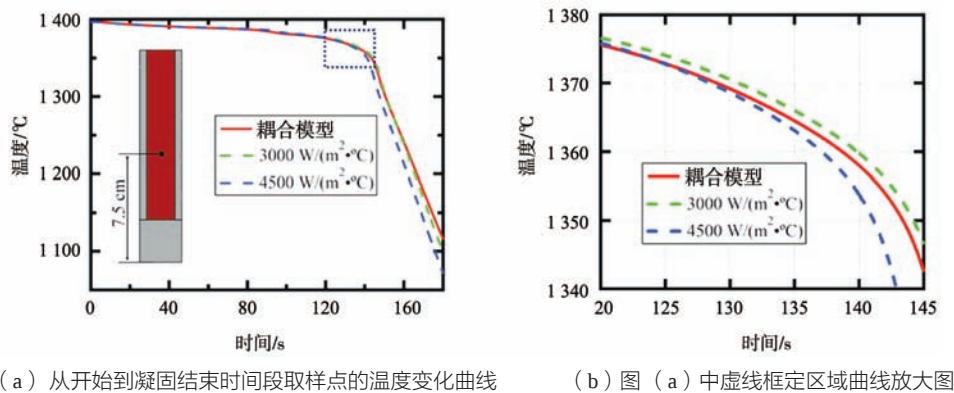


图8 单层模组结构示意图及其温度场及不同抽拉速率的晶粒组织演化模拟结果

Fig. 8 Schematic diagram of the single-layer module structure, its temperature field, and the simulation results of the grain structure evolution at different drawing rates



(a) 从开始到凝固结束时间段取样点的温度变化曲线

(b) 图 (a) 中虚线框定区域曲线放大图

图9 三种工况条件下取样点的温度变化曲线

Fig.9 The temperature variation curves of the sampling points under three working conditions

工况下的温度变化曲线，而红色实线则表征了仿真模型的预测结果。

此外，凝固过程中产生的热应力和相变应力会导致铸件出现裂纹等缺陷。在复杂合金体系中，由于合金成分的复杂性和凝固过程的不均匀性，应力场的数值模拟更加困难。需要建立更精确的本构模型来描述合金在不同温度和相变状态下的力学行为。同时，应力场与热传导、相变过程相互耦合，需要开发更高效的数值算法来处理这种强耦合关系，以准确预测应力场的分布和变化，从而优化铸造工艺，减少铸件的缺陷。目前，商业化软件已具备对大部分铸造过程开展相对精准模拟的能力。不过，针对复杂合金体系中热传导、相变以及应力场的多场耦合模拟，这些软件仍存在提升空间，亟待进一步优化完善。

4.2 塑性变形

锻造工艺通过塑性变形不仅能够实现对合金材料形状与尺寸的调控，还能够有效改善其微观组织结构。在微观层面，锻造促使合金晶粒细化，碳化物破碎，实现了显微组织的优化。而这些结构上的积极变化，可显著提升合金的力学性能^[78-79]。在塑性变形过程中，微观组织的动态演变规律与残余应力的空间分布

特征，是决定最终产品服役性能的关键因素。

基于精确几何建模与材料本构关系构建，可实现锻造过程中材料应力-应变场的数值模拟。例如，李等运用有限元仿真平台，系统研究了锻造态GH4169合金在多元变形参数下的温度场分布特征，不同应变速率变形时的应变场及应力场分布^[80]。其研究表明：当合金在低温高应变速率条件下变形时，材料内部将产生显著的热力学效应，该效应强度随变形温度升高与应变速率降低呈现单调递减趋势。马等通过Gleeble等温热压缩试验平台，结合OM、SEM和EBSD等先进表征技术，研究了新型第三代镍基粉末高温合金FGH4113A (WZ-A3) 在超塑性压缩变形过程中的流变特性与微观组织演化机制^[81-82]。该研究成功构建了描述高温合金热变形行为的本构方程，通过解析不同变形参数下的流变曲线，阐明了动态再结晶与晶界滑移的竞争机制，获得均匀细小的热变形组织，并进行了热挤压试验验证。

温等采用有限元数值模拟与试验验证相结合的方法，系统研究了新型镍基粉末高温合金包覆挤压工艺中关键参数的影响规律，并对工艺参数窗口进行系统优化^[83]。研究表明：挤压速度与坯料初始温度对应变场分布未呈现显著相关性；挤压比与变形程度存

在正向线性关系。通过增大挤压比和减小模具角度可有效提升径向应变分布均匀性；图10展示了在优化参数条件下，试验所得温度场、应变场与数值模拟结果的对比情况。从图10中可以发现^[83]，两者呈

现良好一致性，充分验证了数值模型的可靠性。此外，通过建立温度梯度控制、临界变形量保障和组织均匀性评价三项准则，成功实现了包覆挤压工艺窗口的科学优化。

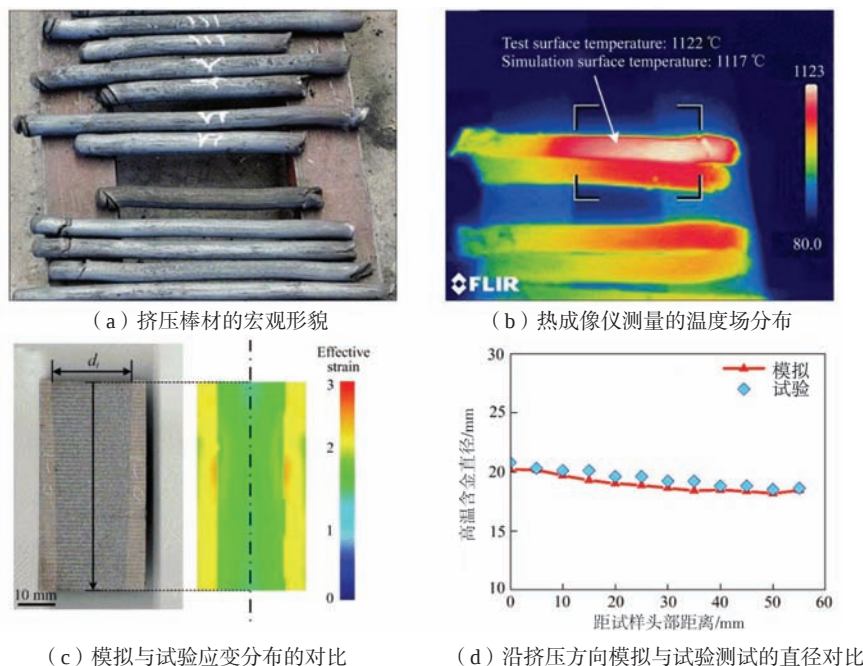


图10 WZ-A3合金包覆挤压工艺试验与数值模拟验证

Fig. 10 Experimental and numerical simulation verification of the cladding extrusion process for the WZ-A3 alloy

在利用有限元法模拟锻造过程时，对微观组织演变分析仍存在不足。现阶段，尽管能够依托经验公式或者简易模型，对晶粒尺寸的变化进行大致估算，然而面对复杂的微观组织演变进程，诸如动态再结晶时晶核的形成位置、晶核生长速率，以及不同取向晶粒间的相互作用等关键环节，依旧难以开展详尽且精准的数值模拟。这一状况不仅制约了有限元法在深入探究锻造微观机制层面的应用，还在一定程度上削弱了其对锻造工艺优化的精确指导作用。因此，迫切需要更为先进的方法或模型来打破这一困局，从而实现

4.3 热处理

在热处理数值模拟方面，有限元法可以很好地模拟温度场的变化^[84]。根据热处理炉的加热和冷却特性，以及高温合金的热物理性质，能够计算出零件在热处理过程中的温度分布随时间的变化。

程等采用真空感应熔炼+制粉+热等静压+热挤压+等温锻工艺制备试验盘坯^[85]。通过对试验盘坯进行取样分析，系统开展热处理工艺参数优化与力学性能表征研究，成功得到镍基粉末高温合金FGH4113A的亚固溶与过固溶热处理制度及其力学性能演变规律。研究

过程中通过温度场实测对数值模拟的热边界条件进行校准与验证。基于试验数据和有限元分析，提出了一种基于试验和有限元分析方法设计盘轴一体化镍基粉末高温合金涡轮盘的热处理工艺方法。运用该工艺方法成功制备出满足设计要求的大尺寸双性能涡轮盘。

高温合金在实际加工过程中，可能会经历复杂工艺，如多级热处理等^[86]。在这些复杂工艺过程中，应力的产生和释放是一个动态过程，受到前面工艺步骤的影响。目前的数值模拟方法在考虑这种复杂工艺历史对应力释放的影响方面还不够完善，难以准确预测在复杂工艺过程后材料内部最终的残余应力分布。

LIU等把有限元仿真与试验结果进行了对比验证，深入研究了不同热处理制度下盘件各区域的微观组织差异以及微观组织与力学性能之间的内在关系^[87-88]。基于研究结果，设计了满足双性能需求的热处理工装和热处理工艺制度。梯度热处理温度场及晶粒度的计算结果见图11^[87]，通过有限元仿真计算了梯度热处理过程中盘件的温度分布，并结合晶粒生长模型，成功预测了盘件的晶粒度分布情况^[87]。借助仿真研究了盘件在固溶热处理后采用不同冷却速度时析出相尺寸的演变规律，见图12^[88]。这些研究为明确微观组织与力学性能的关系、优化热处理工艺提供了重要的理论支持

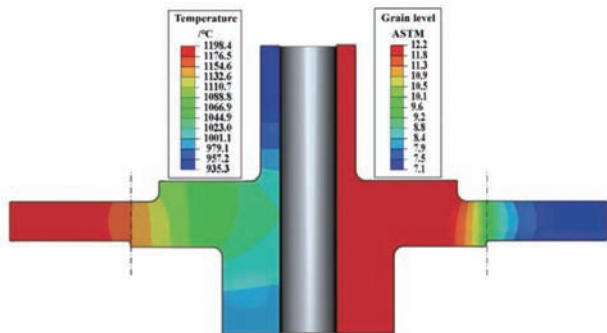


图11 梯度热处理温度场及晶粒度的计算

Fig.11 Calculation of the temperature field and grain size during the gradient heat treatment

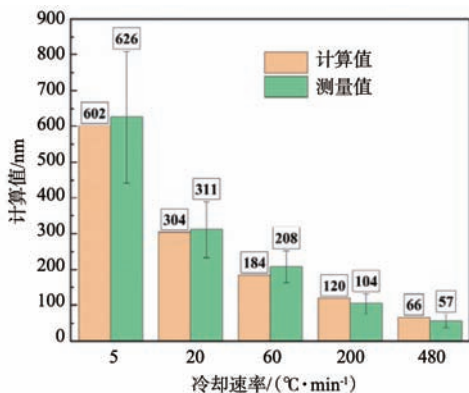


图12 固溶热处理淬火过程强化相的计算

Fig.12 Calculation of the strengthening phases during the quenching process of the solution heat treatment

和依据。

对于热处理过程中微观组织的转变,有限元法的模拟精度还有待提高。对于热处理过程中微观组织变化的其他方面,如沉淀相的析出、溶解以及它们对晶粒取向和生长的影响等,基于晶粒取向的模型还不能很好地进行数值模拟。在处理复杂的热处理工艺时,该模型在描述微观组织的累积变化和对最终性能的影响方面,还需要更高的精度。

4.4 增材制造

增材制造作为一种能够将数据模型直接转化为构件的先进技术,相比传统的高温合金加工过程,具有生产周期短和材料利用率高等优势^[89]。可以实现近净成形,减少材料浪费和后续加工工序,为高温合金复杂零部件的制造提供了新的途径^[90]。增材制造技术的发展仍面临若干关键性挑战与技术瓶颈。例如,材料成形过程中气孔与裂纹缺陷的形成难以完全抑制、材料性能呈现显著各向异性等突出问题^[91-93]。

在激光增材制造过程温度场数值模拟中,主要采用熔池宽度、熔池深度、熔池中心最高温度、沿宽度

方向的温度梯度、沿深度方向的温度梯度和搭接率共6个特征参数进行描述^[94-95]。赵等为研究金属激光增材制造过程的温度场特征,实现温度场的准确预测和调控,研究和选取了激光增材过程数值模拟所涉及的几何模型、材料模型、热源模型、边界条件和二次开发算法^[96]。通过深入剖析激光扫描速度对单层单道次激光熔化工艺中熔池温度场的影响规律,进而揭示了多层多道次增材制造过程中熔池温度场的分布特性。研究成果为精确预测增材制造过程中激光熔池状态及温度场特征提供了坚实的理论支撑。温度场数值模拟的特征参数见图13^[96]。激光增材制造过程的第30层温度场分布特征模拟结果见图14^[96]。

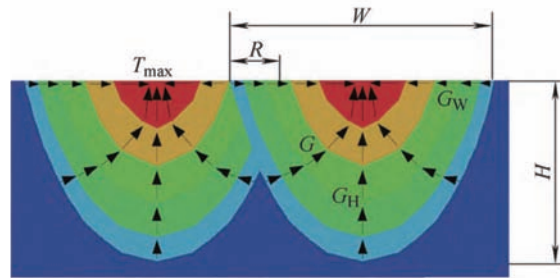


图13 温度场数值模拟的特征参数

Fig.13 Characteristic parameters obtained by the numerical simulation of temperature field

郝等介绍了新兴的磁场辅助增材制造技术,借助磁场无接触式控制的特性,能够对熔池对流和凝固动力学产生影响,进而改变材料的凝固组织,优化材料力学性能^[97]。该论文详细阐述了磁场对金属凝固过程中熔体流动以及组织凝固的影响机制,全面综述了磁场在高温合金增材制造领域的研究进展,深入分析了磁场对高温合金增材制造过程中缺陷、微观凝固组织及力学性能的影响效果。

金属增材制造的孔隙缺陷问题对增材制造构件的性能有较大影响,如何设置工艺参数以减少此类缺陷是金属增材制造的关键性难题。孟等将最优运输无网格法与粉末尺度模型结合,模拟同轴送粉工艺中的流固热耦合过程,预测成形件的孔隙分布与形貌,并通过试验验证准确性^[98]。随后基于数据驱动方法分析工艺参数对孔隙的影响规律,利用多岛遗传算法优化工艺参数。优化后的仿真结果显示构件形貌完整且孔隙率显著降低,与试验测量的孔隙率、宽度和高度误差不超过5%,证明该数值仿真与优化方法可有效指导金属增材制造工艺。

增材制造是一个逐层堆积的过程,多层叠加会使微观组织进一步复杂化。每一层的热历史会影响下一层的凝固过程,导致微观组织在层与层之间发生变化。SIRIN等采用激光粉末床熔合增材制造技术对

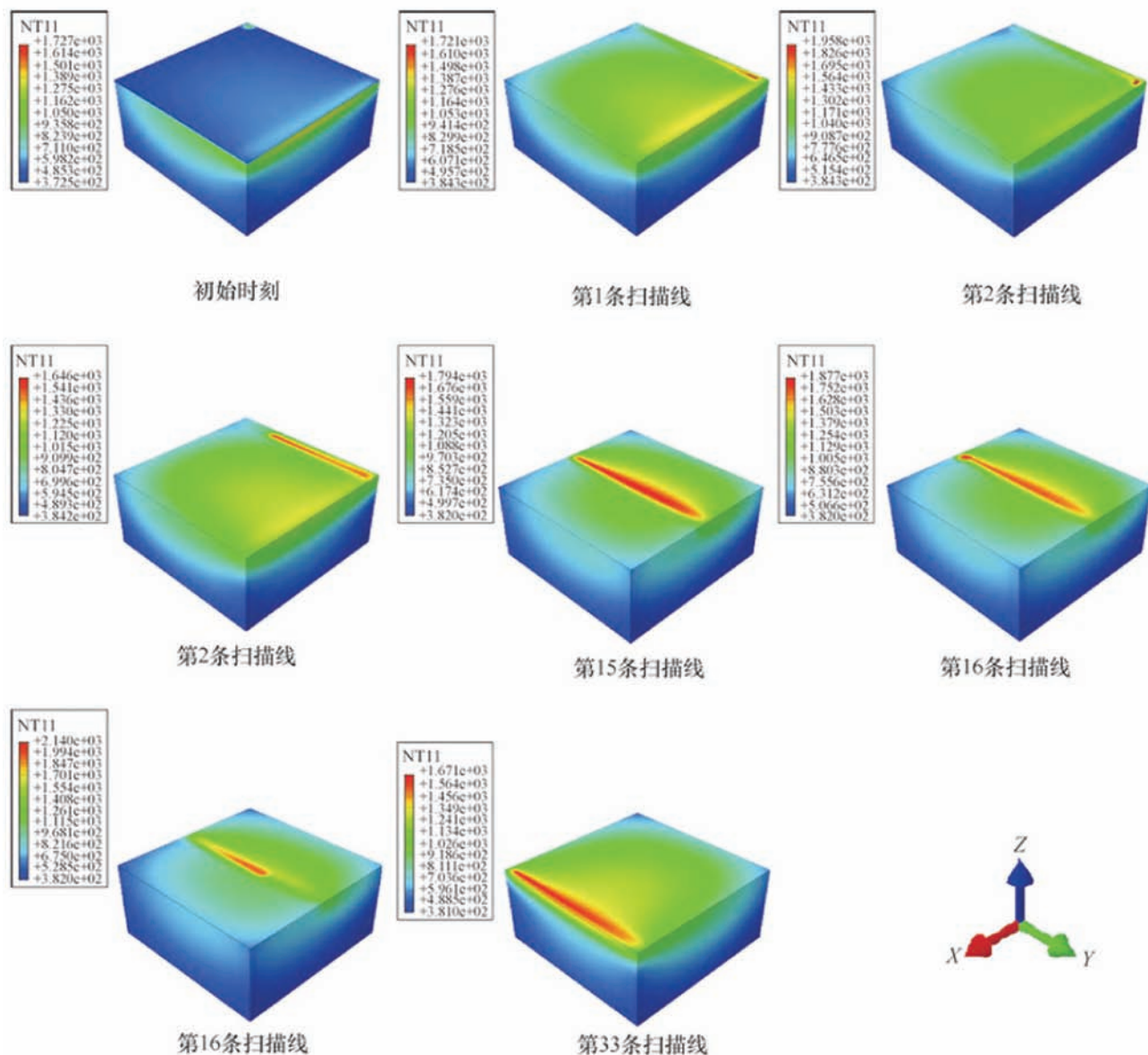


图14 激光增材制造过程的第30层温度场分布特征

(注: 图中2个“第2条扫描线”和“第16条扫描线”代表2个不同时刻。)

Fig.14 Distribution characteristics of the temperature field of the 30th layer during the laser additive manufacturing process

Inconel 718合金的成形过程进行了数值模拟研究^[99]。通过建立拱形结构件的残余应力与变形预测模型,系统探究了激光功率、扫描速度、铺粉层厚及扫描策略等工艺参数对构件残余应力场分布与变形行为的影响规律,并通过与文献报道的试验数据进行对比验证了模型的可靠性。

5 结束语

当前,高温合金数值模拟已经成为现代材料研究的重要工具,其应用已涵盖了合金成分设计、微观组

织演化、力学性能预测和制备工艺参数优化等关键领域。通过深化多尺度建模技术融合、提升模型的预测精度和计算效率,并有机融合数据驱动的新型研究方法,该技术将持续在高温合金材料的研发和生产中发挥重要作用。

在高温合金成分设计方面已取得显著进展,但仍面临诸多挑战。未来研究需要从以下方向实现突破。

首先需构建更为完善的热力学基础数据库系统,其次应开发低资源消耗的高效计算方法,同时需建立标准化的试验验证体系以提高检测效率,并着力研发智能化的数据采集与处理集成技术。

在微观组织演化数值模拟方面,相场法和元胞自动机法等已被广泛应用于高温合金凝固过程中的枝晶生长及晶粒演变的数值再现。然而,对于复杂多元合金体系中多相之间的交互作用及微观结构的精确刻画仍面临挑战。

在力学性能预测方面,基于晶体塑性理论构建的模型,在单晶高温合金变形模拟方面已较为成熟。然而,这类模型在多轴加载情境下,预测精度欠佳,并且对试验数据存在较强依赖性,这些显著局限性制约了其进一步应用。分子动力学模拟虽能够深入揭示位错运动等原子尺度下的微观机制,但分子动力学模拟受困于计算规模,难以大规模开展。机器学习技术为性能预测提供了数据驱动新范式,然而,机器学习技术则因自身的黑箱特性,在物理可解释性方面存在明显不足。

在加工工艺过程数值模拟方面,尽管针对铸造、锻造、热处理及增材制造等典型工业场景的数值模拟与工艺参数优化研究已取得显著进展,但仍还存在一些不足。具体而言,铸造过程模拟对于复杂多元合金

体系的温度场-应力场-微观组织多物理场耦合建模方面仍需深化;锻造与热处理过程数值模拟方面,现有模型在微观组织演化动力学和应力松弛机制的表征精度方面仍存在局限性;增材制造模拟方面,在微观组织演化和力学性能的耦合预测方面仍存在技术难点。

尽管高温合金数值模拟技术已取得显著进展,但仍面临多尺度耦合(参数传递与模型耦合有待优化)、多物理场模拟(计算精度和运行效率需同步提升)、数据与模型结合(高效利用试验数据和机器学习算法深度融合)以及计算效率(高分辨率模拟对计算资源需求巨大)等挑战。未来,可通过以下路径实现突破:不断推进多尺度耦合技术研究,完善微观-介观-宏观尺度的物理过程映射与参数传递体系;创新多物理场耦合模型架构,发展兼具精度与效率的数值算法;构建标准化材料数据库,实现数据驱动方法与传统物理模型的有机融合。通过上述技术迭代,高温合金数值模拟将持续赋能材料研发体系,为实现材料性能的定向优化与工业应用场景的拓展提供关键技术支持。

参考文献:

- [1] 冯南平,向巧,沈荣骏,等.航空发动机关键核心技术攻关的组织策略研究[J].中国工程科学,2022,24(4):222-229.
- [2] 杜金辉,吕旭东,董建新,等.国内变形高温合金研制进展[J].金属学报,2019,55(9):1115-1132.
- [3] 张安琴,王江,张林嘉.航空发动机先进材料发展现状和趋势研究[J].内燃机与配件,2024(14):130-136.
- [4] 史振宇,刘晓文,宋来聪,等.航空发动机应用领域粉末高温合金的研究进展[J].中国粉体技术,2025,31(1):46-60.
- [5] REED R C, MOTTURA A, CRUDDEN D J. Alloys-by-design: towards optimization of compositions of nickel-based superalloys [C]// Superalloys 2016. 2016: 13-23.
- [6] REED R C, TAO T, WARNKEN N. Alloys-by-design: application to nickel-based single crystal superalloys [J]. Acta Materialia, 2009: 5898-5913.
- [7] 吴昊,吴松,聂丽萍,等.镍基高温合金设计研究现状与展望[J].大型铸锻件,2024(6):26-33.
- [8] HOU Y, LI X, CAI W, et al. Research progress in CALPHAD assisted metal additive manufacturing [J]. China Foundry, 2024, 21(4): 295-310.
- [9] 吴磊,滕俊飞,吕彦龙,等.GH3230合金TLP扩散连接动力学实验研究[J].北京航空航天大学学报,2024,50(8):2595-2600.
- [10] ZENG G, HU B, SHI Y, et al. Corrosion resistance investigation of the Ti-Al-Mo system supported by CALPHAD approach and key experiments [J]. Corrosion Science, 2024, 229.
- [11] YIN L, LI X, BAO X, et al. CALPHAD accelerated design of advanced full-Zintl thermoelectric device [J]. Nature Communications, 2024, 15(1): 1468.
- [12] 刘兴军,陈悦超,卢勇,等.新型钴基高温合金多尺度设计的研究现状与展望[J].金属学报,2020,56(1):1-20.
- [13] 孙国璨,王林静,徐凯,等.基于相图计算与高通量试验的AlNbTaTiVZr多元合金涂层设计及筛选[J].中国表面工程,2024,37(6):332-342.
- [14] 崔壮,刘满平,曾迎,等.镍基单晶高温合金发展趋势:新型研究技术驱动合金化设计[J].稀有金属材料与工程,2024,53(8):2375-2389.
- [15] 祝亚亮,雍维,杨杰,等.热力学计算与机器学习相结合逆向设计镍基高温合金[J].材料工程,2024,52(6):167-176.
- [16] 汪东红,孙锋,疏达,等.数据驱动镍基铸造高温合金设计及复杂铸件精确成形[J].金属学报,2022,58(1):89-102.
- [17] 许庆彦,夏鸽翔.镍基高温合金叶片定向凝固过程宏观数值模拟研究进展[J].航空发动机,2021,47(4):141-148.
- [18] RAPPAZ M, BOETTINGER W J. On dendritic solidification of multicomponent alloys with unequal liquid diffusion coefficients [J]. Acta Materialia, 1999, 47(11): 3205-3219.
- [19] GUO J, SAMONDS M T. Microstructures and mechanical properties prediction for Ti-based alloys [J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2007. DOI: 10.1007/s11665-007-9099-y.

- [20] KERMANPUR A, MEHRARA M, VARAHRAM N, et al. Improvement of grain structure and mechanical properties of a land based gas turbine blade directionally solidified with liquid metal cooling process [J]. *Materials Science and Technology*, 2008, 24 (1) : 100–106.
- [21] BOETTINGER W J, CORIELL S R, GREER A L, et al. Solidification microstructures: recent developments, future directions [J]. *Acta Materialia*, 2000, 48 (1) : 43–70.
- [22] KURZ W, FISHER David J. Fundamentals of Solidification [M]. *Phase Diagrams*. 2012: 429–445.
- [23] BOETTINGER W J, WARREN J A, BECKERMANN C, et al. Phase-field simulation of solidification [J]. *Annual Review of Materials Research*, 2002: 163–194.
- [24] 许庆彦, 杨聪, 柳百成. 镍基高温合金定向凝固过程枝晶组织相场模拟研究 [J]. *航空制造技术*, 2019, 62 (19) : 14–20.
- [25] NABAVIZADEH S A, ESHRAGHI M, FELICELLI S D. Three-dimensional phase field modeling of columnar to equiaxed transition in directional solidification of Inconel 718 alloy [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2020: 125879.
- [26] ŁACH Ł, SVYETLICHNYY D. New platforms based on frontal cellular automata and lattice boltzmann method for modeling the forming and additive manufacturing [J/OL]. *Materials*, 2022, 15 (21) : 7844.
- [27] CUSATO N, NABAVIZADEH S A, ESHRAGHI M. A review of large-scale simulations of microstructural evolution during alloy solidification [J/OL]. *Metals*, 2023, 13 (7) : 1169.
- [28] NABAVIZADEH S A, ESHRAGHI M, FELICELLI S D. Three-dimensional phase field modeling of columnar to equiaxed transition in directional solidification of Inconel 718 alloy [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2020: 125879.
- [29] RAPPAZ M. Modelling of microstructure formation in solidification processes [J]. *International Materials Reviews*, 1989, 34 (1) : 93–124.
- [30] GANDIN C A, RAPPAZ M. Coupled finite element-cellular automation model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes [J]. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 1994, 42 (7) : 2233–2246.
- [31] GANDIN C A, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M, et al. A three-dimensional cellular automation-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. *Metallurgical & Materials Transactions A*, 1999, 30 (12) : 3153–3165.
- [32] CAMERON Mcelfresh, JAIME Marian. Investigation of microstructures produced by metal additive manufacturing using 3D cellular automata finite element modeling in 316L steels and IN625 superalloys [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2025, 35: 4301–4314.
- [33] 李爱红, 任娟娜, 黄志伟, 等. 镍基合金沉淀过程相场法界面演化规律研究进展 [J]. *热加工工艺*, 2011, 40 (14) : 1–3+6
- [34] 白曦, 方伟, 常若斌, 等. 沉淀强化高熵合金研究进展 [J]. *材料导报*, 2022, 36 (21) : 117–123.
- [35] 张玉祥, 王锦程, 杨根仓, 等. 相场法模拟弹性场对沉淀相变组织演化及相平衡成分的影响. *物理学报*, 2006, 55 (5) : 2433–2438.
- [36] LU Yanli, CHEN Zheng, LI Yongsheng, et al. Microscopic phase-field simulation coupled with elastic strain energy for γ' (Ni_3Al) Precipitation in Ni-Al alloy [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2007, 43 (3) : 291–296.
- [37] ZHANG M Y, ZHI-GANG L I, ZHANG J L, et al. Site occupation evolution of alloying elements in Ni3V phase during phase transformation in Ni75Al4.2V20.8 [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2015, 25 (5) : 1599–1604.
- [38] ZHOU N. Phase-field simulation of γ' coarsening in Ni-based superalloys [J]. *Acta Materialia*, 159: 299–310. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.08.022
- [39] 徐聪, 陈铮, 王永欣, 等. 原子间相互作用能对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ 合金孕育期影响的微观相场模拟 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2009, 38 (11) : 5.
- [40] CHEN J, GUO M, YANG M, et al. Phase-field simulation of γ' coarsening behavior in cobalt-based superalloy [J]. *Computational Materials Science*, 2021, 191: 110358.
- [41] TSUKADA Y, MURATA Y, KOYAMA T, et al. Phase-field simulation on coarsening of the γ' phase particles in Ni-based superalloys considering elastic inhomogeneity [J]. *Defect and Diffusion Forum*, 2010, 297–301: 376–383.
- [42] ZHANG M Y, CHEN Z, WANG Y X, et al. Effect of atomic structure on migration characteristic and solute segregation of ordered domain interfaces formed in $\text{Ni}_{75}\text{Al}_x\text{V}_{25-x}$ [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2011, 21 (3) : 604–611.
- [43] 徐福泽, 蔺永诚, 马德新, 等. 两种镍基单晶高温合金组织演变和再结晶行为 [J]. *材料工程*, 2025, 53 (1) : 110–120.
- [44] 罗锐, 盛冬华, 王资兴, 等. 一种Ni-Mo系高温合金的热变形行为及其组织演变 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2024, 53 (11) : 3111–3120.
- [45] 张文文, 冯阳, 李虎成, 等. GH4742高温合金热变形过程中动态再结晶动力学研究 [J]. *塑性工程学报*, 2024, 31 (11) : 123–130.
- [46] 王志刚, 李凤艳, 王艾竹, 等. 高温合金棒坯锻造过程的热变形和动态再结晶行为 [J]. *大型铸锻件*, 2024 (6) : 1–9.
- [47] HUMPHREYS F J, HATHERLY M. Recrystallization and related annealing phenomena [M]. Elsevier eBooks, 2004.
- [48] ROLLETT A D. Overview of modeling and simulation of recrystallization [J]. *Progress in Materials Science*, 1997: 79–99.
- [49] RADHAKRISHNAN B, SARMA G B, ZACHARIA T. Modeling the kinetics and microstructural evolution during static recrystallization—Monte Carlo simulation of recrystallization [J]. *Acta Materialia*, 1998: 4415–4433.
- [50] QIN L, KUBACKA D, SPIECKER E, et al. Atomistic simulations of diffusion in strengthened Co-based superalloys and its connection to

- selective alumina formation in early-stage oxidation [J]. *Physical Review Materials*, 2023, 7: 013403
- [51] SUWA Y. Recent developments in modeling microstructural evolution during recrystallization [J]. *Tetsu-to-Hagane*, 2011, 97 (4): 173–186.
- [52] SARMA G, RADHAKRISHNAN B, ZACHARIA T. A coupled monte carlo-finite element approach to modeling microstructural evolution during static recrystallization [J]. *Office of Scientific & Technical Information Technical Reports*, 1996.
- [53] 蒋安琪, 霍元明, 周子鑫, 等. 晶体塑性理论及其在金属高低周疲劳寿命预测中的应用 [J]. *塑性工程学报*, 2025, 32 (1): 1–15.
- [54] 赵帅, 王素娟. 晶体塑性变形机理及其数值模拟方法的研究进展 [J]. *制造技术与机床*, 2025 (2): 99–107.
- [55] 缪勇. 基于晶体塑性理论的镍基合金高温低周疲劳寿命预测方法 [J]. *理化检验-物理分册*, 2024, 60 (4): 25–30.
- [56] WANG J, LU H, WEN Z, et al. Crystal plasticity theory coupled with meso-damage to predict the ratchetting behavior of nickel-based single crystal superalloy [J]. *International Journal of Fatigue*, 2022, 165: 107220.
- [57] 熊宇凯, 赵建锋, 饶威, 等. 含冷却孔镍基合金次级取向效应的应变梯度晶体塑性有限元研究 [J]. *力学学报*, 2023, 55 (1): 120–133.
- [58] YAN Wuzhu, LI Youliang, WEN Zhixun, et al. Effect of crystallographic orientation on nano-indentation behaviors of Nickel based single crystal super alloys [J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2020, 49 (6): 1854–1859.
- [59] 赵宏伟, 杨贤楼, 张嵩, 等. 基于晶体塑性的DD6单晶合金力学性能及织构演化 [J]. *特种铸造及有色合金*, 2024, 44 (10): 1382–1387.
- [60] EVANS R W, WILSHIRE B. *Creep of metals and alloys* [M]. 1985.
- [61] 余嘉伟, 汪文君, 杨旭峰, 等. 基于Norton模型的涡轮叶片蠕变寿命分析方法 [J]. *航空发动机*, 1–10 [2025-02-13]. [http: //kns.cnki.net/kcms/detail/21.1359.V.20240813.1723.006.html](http://kns.cnki.net/kcms/detail/21.1359.V.20240813.1723.006.html).
- [62] 张爽, 刘峰, 李荣华, 等. 基于修正 θ 投影法的GH4169高温合金蠕变寿命预测 [J]. *辽宁石油化工大学学报*, 2020, 40 (3): 69–73.
- [63] LI P, JIANG W, RUI S S, et al. Effect of misorientation on the fatigue life of nickel-base single crystal superalloy DD5 at 980 °C [J]. *International Journal of Fatigue*, 2021, 153: 106479.
- [64] 刘芳宁, 王越, 孙瑞侠. 针对高温合金微观组织-拉伸性能关系的机器学习预测模型 [J]. *中国材料进展*, 2022, 41 (11): 938–946.
- [65] 沈将华, 周宇亭, 王秀霞. 服役工况下镍基单晶高温合金的损伤机制研究进展 [J]. *国防科技大学学报*, 2023, 45 (4): 55–65.
- [66] CHAN K S. Roles of microstructure in fatigue crack initiation [J]. *International Journal of Fatigue*, 2010: 1428–1447.
- [67] SAJU T, VELU M. Fracture toughness and fatigue crack growth rate studies on rotary friction weldments of nickel-based superalloys [J]. *Materials Letters*, 2022: 133027.
- [68] RAPPAZ M. Modelling of microstructure formation in solidification processes [J]. *International Materials Reviews*, 1989, 34 (1): 93–124.
- [69] SAJU T, VELU M. Fracture toughness and fatigue crack growth rate studies on rotary friction weldments of nickel-based superalloys [J]. *Materials Letters*, 2022: 133027.
- [70] CAMPBELL John B. *Complete casting handbook: metal casting processes, techniques and design* [M]. 2018.
- [71] GUO J, SAMONDS M. Modeling of alloy casting solidification [J]. *JOM*, 2011, 63 (7): 19–28.
- [72] LIU Xiaoshan, MA Dexin, GUO Jianzheng. Freckle defect prediction for single crystal solidification of superalloys [C]// *The 75th World Foundry Congress*, deyang, 2024.
- [73] 王倩, 吴亚夫, 吴剑涛, 等. PROCAST数值模拟在高温合金精密铸造中的应用 [J]. *金属功能材料*, 2019, 26 (6): 32–36.
- [74] 刘朝峰, 郭建政, 刘孝山, 等. 基于ProCAST的熔模铸造叶片模壳预热过程分析及试验验证 [J]. *热加工工艺*, 2020, 49 (9): 59–62.
- [75] 胡鹏, 李军, 李建国. 基于ProCAST的镍基单晶高温合金数值模拟 [J]. *热加工工艺*, 2018, 47 (1): 117–120.
- [76] 杨文超, 撒世鹏, 郝文硕, 等. 不同模组结构高效制备单晶叶片定向凝固过程的温度场及组织模拟 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2023, 52 (11): 3847–3856.
- [77] XIA S, LU Y, LIU Z, et al. A coupled numerical scheme for simulating liquid metal cooling process in the production of superalloys [J]. *International Journal of Metalcasting*, 2025, 19 (1): 496–510.
- [78] 曾祥, 廖润泽, 徐雪峰, 等. GH6159高温合金热变形行为及动态再结晶建模与仿真研究 [J]. *精密成形工程*, 1–20[2025-02-14]. [http: //kns.cnki.net/kcms/detail/50.1199.tb.20250103.1049.002.html](http://kns.cnki.net/kcms/detail/50.1199.tb.20250103.1049.002.html).
- [79] 王彦菊, 姜嘉赢, 沙爱学, 等. 新型高温合金材料建模及涡轮盘成形工艺模拟 [J]. *材料工程*, 2020, 48 (7): 127–132.
- [80] 李帮松, 曾祥帅, 曾梦婷, 等. 锻造态GH4169高温合金热变形行为的有限元模拟 [J]. *热处理*, 2023, 38 (3): 18–24.
- [81] 马向东, 何英杰, 李远, 等. 一种新型镍基粉末高温合金等温热压缩过程中的超塑性变形行为研究 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2022, 51 (9): 3307–3315.
- [82] 马向东, 肖磊, 杨金龙, 等. 新型第3代镍基粉末高温合金的热变形行为及本构方程 [J]. *塑性工程学报*, 2022, 29 (5): 143–152.
- [83] 温红宁, 金俊松, 滕庆, 等. 新型镍基粉末高温合金包覆挤压数值模拟与工艺窗口优化 [J]. *中国有色金属学报*, 2022, 32 (9): 2664–2679.
- [84] 姜煜霞. 航空发动机高温合金材料热处理研究 [J]. *中国设备工程*, 2025 (2): 142–144.

- [85] 程俊义, 刘朝峰, 马向东, 等. 一种新型镍基粉末高温合金涡轮盘的双性能热处理工艺研究 [J]. 稀有金属材料与工程, 2024, 53 (9): 2614–2623.
- [86] 毕中南, 秦海龙, 刘沛, 等. 高温合金锻件残余应力量化表征及控制技术研究进展 [J]. 金属学报, 2023, 59 (9): 1144–1158.
- [87] LIU Z, WANG C, CHENG J, et al. An improved grain growth model and its application in gradient heat treatment of aero-engine turbine discs [J]. Materials, 2023, 16 (19): 6584. <https://doi.org/10.3390/ma16196584>.
- [88] LIU Z, CHENG J, WANG C, et al. Quantitative microstructure prediction of powder high-temperature alloy during solution heat treatment and its validation [J]. Metals, 2024, 14 (7): 769. <https://doi.org/10.3390/met14070769>.
- [89] 马金超, 刘纪德, 张志鹏, 等. 激光增材制造镍基高温合金研究现状及展望 [J]. 金属加工 (热加工), 2025 (2): 1–11.
- [90] 胡勇, 张文格, 马好放, 等. 增材制造镍基高温合金成形过程数值模拟研究进展 [J]. 中国有色金属学报, 2024, 34 (12): 3923–3946.
- [91] 任庆国, 姚志浩, 董建新, 等. 激光增材制造高温合金复合材料研究进展 [J]. 稀有金属材料与工程, 2023, 52 (10): 3617–3629.
- [92] 王楠, 李金国, 刘纪德, 等. 选区激光熔化镍基高温合金组织及缺陷研究进展 [J]. 稀有金属材料与工程, 2024, 53 (1): 257–269.
- [93] CHENG B, LOEBER L, WILLECK H, et al. Computational investigation of melt pool process dynamics and pore formation in laser powder bed fusion [J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2019, 28 (11): 6565–6578.
- [94] PARRY L, ASHCROFT I A, WILDMAN R D. Understanding the effect of laser scan strategy on residual stress in selective laser melting through thermo-mechanical simulation [J]. Additive Manufacturing, 2016: 1–15.
- [95] BRUNA-ROSSO C, DEMIR A G, PREVITALI B. Selective laser melting finite element modeling: Validation with high-speed imaging and lack of fusion defects prediction [J]. Materials & Design, 2018, 156: 143–153.
- [96] 赵蒙, 侯熙硕, 程明贤, 等. 金属激光增材制造过程温度场模拟研究 [J]. 金属加工 (热加工), 2025 (1): 13–26.
- [97] 郝铭泓, 李金国, 卢楠楠, 等. 磁场作用下高温合金增材制造技术的研究进展 [J]. 中国材料进展, 2024, 43 (10): 879–890.
- [98] 孟庆泽, 樊江, 袁庆浩. 基于粉末级成型模拟的金属增材制造工艺优化 [J]. 中国有色金属学报, 2025, 35 (1): 196–208.
- [99] ŞIRIN T B, KAYNAK Y. Prediction of residual stress and distortion in laser powder bed fusion additive manufacturing process of Inconel 718 alloy [J]. Procedia CIRP, 2021, 99: 330–335.

Numerical Simulation Technology Applications in Superalloys

LIU Xiao-shan^{1,2}, SONG Min¹, XIA Sheng-xu², GUO Jian-zheng^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, Hunan, China; 2. Shenzhen Wedge Central South Research Institute Co., Ltd., Shenzhen 518000, Guangdong, China)

Abstract:

In cutting-edge technological fields such as aerospace and energy applications, superalloys hold a critical position due to their exceptional performance under extreme thermal-mechanical conditions. Nevertheless, the complex chemical compositions and multi-scale hierarchical microstructures of superalloys present formidable challenges to conventional experimental research. These studies are not only time-consuming, labor-intensive and costly, but also suffer from difficulties in comprehensively controlling numerous interacting factors, resulting in inefficient progress that cannot meet modern industry's urgent demands for superalloy development and performance optimization. With continuous advancements in computational technologies and algorithms, superalloy simulation techniques have emerged as a crucial method in materials science research. By establishing multi-physics field coupling models with high-fidelity, this approach enables profound exploration of the microstructural evolution mechanisms, the macro mechanical response characteristics, and the quantitative correlation between complex process parameters in superalloys, providing scientific basis for material composition design, process parameter optimization, and service performance prediction. This paper outlines representative applications of numerical simulation technologies in superalloy research and discusses future development trends in this field.

Key words:

superalloy; numerical simulation; microstructure; mechanical properties; processing
