

# 相图计算技术在铸造不锈钢中的应用现状与展望

吴 铸, 成京昌, 魏彦鹏, 关书文, 时 坚, 高 鹏, 于 波

(沈阳铸造研究所有限公司, 高端装备轻合金铸造技术国家重点实验室, 辽宁沈阳 110022)

**摘要:** 相图计算技术作为一种较为成熟的获得相图的方法, 已在铸造合金开发设计方面取得一定进展, 但是远没有得到充分的开发与应用, 建立准确有效的铸造合金相与组织预报系统还面临巨大的困难与挑战。概述了相图计算技术以及常用软件, 综述了相图计算在铸造不锈钢组织成分设计、相转变温度计算、析出相分析以及成分偏析控制等方面的应用, 展望了相图计算技术在铸造不锈钢中的应用前景。

**关键词:** 相图计算; 铸造不锈钢; 材料设计

相图在新材料设计和制定加工工艺过程中起到重要作用。相图计算技术根据已知热力学数据, 建立各相的热力学模型和吉布斯自由能表达式, 通过外推计算出多元体系热力学相图<sup>[1]</sup>, 是一种较为成熟的建立相图的方法。目前, 相图计算技术已在不锈钢、铝合金、镁合金、高温合金以及钛合金等多种材料体系中获得应用, 利用相图计算技术可以快速高效获得多元体系相图<sup>[2-4]</sup>, 为合金的成分设计、力学性能、物理性能判断以及铸造性能判断提供参考。

本研究针对铸造不锈钢的组织成分设计、热处理工艺设计, 介绍了相图计算技术在铸造不锈钢中研究与应用, 展望了相图计算技术未来的发展。

## 1 相图计算简介

相图在材料设计中可以用来预测钢中的组织以及相变过程, 其缺点是多元体系实验相图绘制困难、耗时长且成本高。随着计算机技术与热力学计算的发展, 计算机技术开始应用于材料的设计中, 相图研究从实验测定为主发展到与计算机计算相图的新阶段<sup>[5]</sup>。发展成为热力学计算与计算技术相结合的新技术——相图计算(CALPHAD: Calculation of phase diagram)<sup>[6-7]</sup>。随着材料科学及计算机科学的不断进步, 相图计算成为计算材料学中的重要组成部分, 改变了传统材料研究与开发模式, 有效减少了材料的研发时间和成本, 成为材料设计与研究的重要工具<sup>[8-9]</sup>。

随着相图计算的发展, 科研人员对热力学数据库和计算机软件的开发做了大量工作。自19世纪70年代Lukas<sup>[10]</sup>开发出了第一代软件LUKAS起, 一系列基于不同的数学方法和计算机语言的商业软件被开发并应用于科研和工业生产<sup>[11-12]</sup>。目前最常用的相图计算软件是Thermo-Calc、JMatPro、FactSage和PANDAT<sup>[13-16]</sup>。

利用相图计算软件, 可以计算不锈钢对应成分的相种类、相比比例、相转变温度、溶质分配等一系列重要信息, 从而根据需求设计出合适的组织成分, 制定工艺参数。目前国内众多不锈钢生产企业都已引进相图计算软件, 并广泛应用于新型不锈钢材料的研究设计<sup>[17-18]</sup>。

## 2 铸造不锈钢的合金设计

不锈钢由于良好的强度和塑性、较高的耐磨性、优良的耐蚀性等特性, 广泛应用于石油、化工、航海和航天领域等, 其中一些大型复杂结构件通常采用铸造成形

作者简介:

吴 铸 (1995-), 男, 硕士, 主要研究方向为先进工程材料。E-mail: wuqi572021@163.com

通讯作者:

于 波, 男, 研究员。电话: 024-25852311-268, E-mail: yubo@chinasrif.com

中图分类号: TG113.14

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2021)

07-0777-06

收稿日期:

2021-06-01 收到初稿,

2021-06-16 收到修订稿。

的方式<sup>[19]</sup>。相图计算用于指导铸造不锈钢的设计，可以有效减少研发时间和成本。

## 2.1 铸造不锈钢成分设计

不锈钢中的合金元素含量高且种类多，对不锈钢的性能有很大影响，铸造不锈钢中通过添加合金元素改善合金的铸造性能，例如添加Si、Mn等元素改善流动性。

哈尔滨工业大学孙郅闯<sup>[20]</sup>利用JMatPro、Thermo-Calc两款软件，研究了添加不同元素后钢的热力学平衡相图以及合金元素对钢热物性和力学性能的影响。并且以304不锈钢成分为基础，通过调整合金元素的含量，优化出具有良好力学性能的铸造合金成分。

Santos等<sup>[2]</sup>通过添加硼提高不锈钢的耐磨性，利用Thermo-Calc软件绘制不同硼含量时的相组成变化。硼的添加量设计为1%，显微组织由 $M_2B$ 、 $M_3B_2$ 硼化物和铁素体基体组成，与316L比具有较好的耐磨性和耐腐蚀性。

## 2.2 铸造不锈钢相设计

不锈钢的组织对性能有着很大影响，利用相图计算的方法，可以快速计算出不同合金元素含量与温度变化时的相组成以及所占的比例。根据相组成对合金性能的影响规律，设计出符合需求的成分范围<sup>[21]</sup>。

Hayes等<sup>[22]</sup>通过相图计算软件，计算了复杂合金体系的铸造双相不锈钢的热力学相图，并通过实验验证发现观察到的组织与计算结果吻合较好，证明了不锈钢相图计算组织的可行性。

Yamamoto<sup>[23]</sup>等在研究 $\alpha$ 相和 $\gamma$ 相比对铸造双相不锈钢耐蚀性影响时，利用相图计算软件，计算了不同Ni含量时的热力学相图，得到了不同的 $\alpha$ 相和 $\gamma$ 相的比例。

瑞典Sandvik钢铁公司为了获得含量相同的 $\alpha$ 相和 $\gamma$ 相，借助Thermo-Calc软件计算优化不锈钢的化学成分，通过调整合金元素含量，并且将析出相的比例减少到最低，获得了 $\alpha$ 相和 $\gamma$ 相含量相同且具有良好性能的双相不锈钢<sup>[24]</sup>。

通过上述实例可以看出，相图计算技术能够计算不锈钢中的相组成、相比以及不同合金元素的影响，对铸造不锈钢的合金设计和优化起到很好的指导作用。

## 3 铸造不锈钢的热处理工艺制定

不锈钢采用铸造成形后易出现组织粗大、溶质不均匀、力学性能低等情况，因此铸造不锈钢需要在严格控制成分的基础上，进行热处理来改善铸造不锈钢

的性能。

### 3.1 相转变温度计算

相变过程主要取决于热力学状态，相变点在不锈钢的热处理设计中具有重要作用。液相线温度、 $A_3$ 、 $A_1$ 温度都可以通过相图计算出。另外，结合相关经验公式，相图计算还可以计算一些非平衡相变的相变点，如马氏体转变开始温度为 $M_s$ 以及奥氏体发生30%应变导致50%马氏体转变的温度为 $M_{d50}$ <sup>[25]</sup>。

在不锈钢中，合金元素在各相中分配的变化影响相稳定性，导致相转变温度变化。虽然相转变温度可以通过实验进行测量，相中合金元素含量也可以通过电子探针等检测手段进行测量，但是这些方法无法在成分设计时给出直接指导。利用相图计算软件，可以计算出不同成分、不同温度下各相中合金元素的含量，并且计算出对应的相转变温度，指导合金成分设计及热处理工艺制定，缩短开发周期。

马跃<sup>[26]</sup>等在研究Fe-Cr-B合金时，利用DSC测得了相变温度，并与Thermo-Calc相图计算软件计算出的相变温度进行了比较，差值比均小于5%，证明了软件计算结果较为可靠。

陈雷等<sup>[27]</sup>在设计一种亚稳奥氏体不锈钢时，通过Thermo-Calc软件计算了不同温度时奥氏体中的合金元素含量变化，得到不同温度条件下的 $M_{d50}$ 以判断奥氏体的稳定性，得到 $M_{d50}$ 随热处理温度的变化曲线，如图1、2所示。确定了固溶处理温度为1 050 °C时，不锈钢中具有亚稳奥氏体组织。

### 3.2 第二相析出控制

铸造不锈钢在不同温度下发生组织转变，会生成影响最终性能的析出相。主要的析出相有 $M_{23}C_6$ 型碳化物、 $Cr_2N$ 氮化物和 $\sigma$ 相等。析出相的种类与数量对性能有很大的影响，掌握第二相的形核析出规律，控

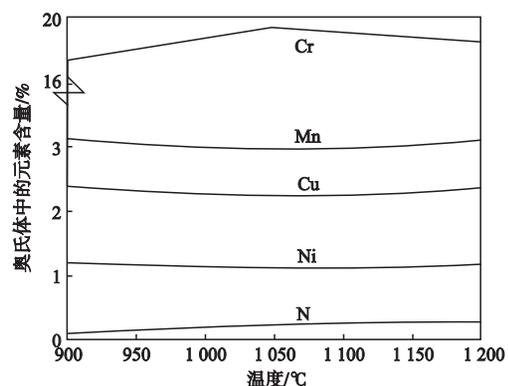


图1 奥氏体中合金元素含量随温度的变化曲线

Fig.1 Change of alloy element content in austenite with temperature

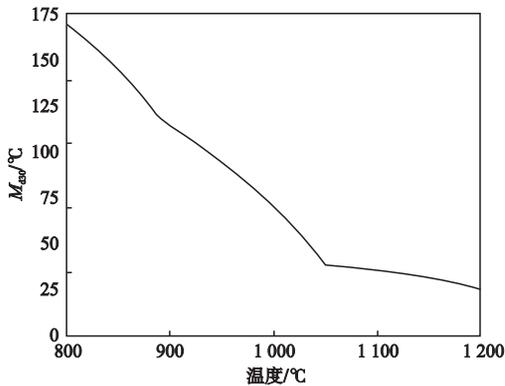


图2  $M_{d30}$ 随加热温度的变化曲线  
Fig. 2 Change curve of  $M_{d30}$  with temperature

制第二相的析出, 对于热处理工艺优化具有重要指导意义。选择合适的热处理工艺, 避开有害相的析出温度, 可以使不锈钢具有更优异的性能。利用相图计算技术, 可以从相图中得到在不同温度条件下不锈钢析出相的数量和类别, 也可以得到不同合金元素对析出相的影响, 为不同成分不锈钢的热处理工艺设计提供先期性的指导。

朱泽华等<sup>[28]</sup>研究 $\sigma$ 相对铸造双相不锈钢组织和性能的影响时, 利用Thermo-Calc软件计算了各温度下相含量及相比例, 并通过相图确定了热处理温度获得了不同含量的 $\sigma$ 相,  $\sigma$ 相比例增加, 试样耐腐蚀性、塑性下降。

杨维宇等<sup>[29]</sup>利用Thermo-Calc软件对00Ni14Cr3Mo3Ti马氏体不锈钢在750~1 050 °C固溶温度下的析出相变化进行了模拟计算, 发现低温固溶时有未溶的Laves相, 未溶的Laves相降低了钢固溶、时效态冲击韧性。通过相图得到该相在相图中805 °C完全溶解, 确定了最佳固溶温度为850~950 °C。实验验证结果表明, 在850 °C时未检测到Laves相, 并且在固溶温度为900 °C时, 钢的强韧性配比最佳。

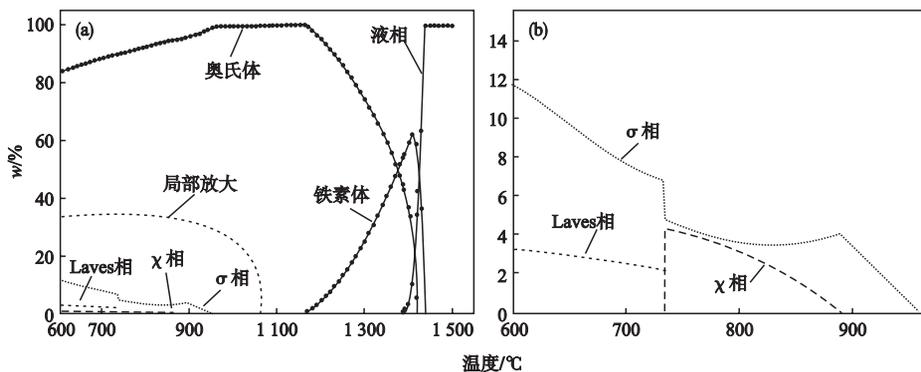
李阳<sup>[30]</sup>等采用热力学模拟软件Thermo-Calc对1C-18Cr-1Al-1Si铁素体铸造不锈钢进行热力学计算, 得到平衡状态下平衡相由铁素体相、AlN相、 $M_7C_3$ 相、 $M_{23}C_6$ 相等组成, 同时计算了不同析出相的元素组成随温度的变化规律, 为热处理工艺制定提供了指导。

金传伟等<sup>[31]</sup>用JMatPro热力学计算软件对不锈钢在平衡条件下合金组织随温度变化规律进行计算。图3为热力学平衡状态下析出相含量与温度之间的关系。根据相图可以得出, 在960~600 °C凝固过程中可能出现的析出相有 $\sigma$ 相、 $\chi$ 相和Laves相。最终确定了热处理温度为850 °C, 显微组织以奥氏体为主, 存在的析出相类型为 $\chi$ 相和 $\sigma$ 相。

Liu等<sup>[16]</sup>利用热力学计算软件Thermo-Calc, 对不同合金元素Cr、Co、Mo对S280超高强度不锈钢析出相的影响进行了研究。结果表明, 钢中析出相主要由 $M_{23}C_6$ 型碳化物、 $M_6C$ 型碳化物、Laves相和 $\sigma$ 相。 $M_{23}C_6$ 型碳化物的析出不受温度和合金元素含量影响, 而Laves相和 $\sigma$ 相的析出受温度和合金元素含量影响较大。通过热力学模拟, 降低元素含量和调整热处理温度, 减少了合金中 $\sigma$ 相的析出。通过实验验证, 材料经550 °C回火后, 主要析出相为 $M_{23}C_6$ 碳化物和Laves相金属间化合物, 与相图计算结果吻合较好。

李文权<sup>[32]</sup>在研究具有TRIP效应双相不锈钢时, 利用相图计算软件计算出各温度时的相组成, 得到了 $M_{23}C_6$ 析出温度范围, 通过调整固溶温度, 控制 $M_{23}C_6$ 析出, 最终确定固溶温度为1 100 °C, 并获得了最佳的性能。

Wendle等<sup>[33]</sup>利用Thermo-Calc软件对不同C、N含量且具有TRIP效应的19Cr-4Ni-3Mn-C-N铸造不锈钢进行相图计算, 通过分析不同C、N含量时的相组成, 得到不同C、N含量时 $M_{23}C_6$ 碳化物和 $M_2N$ 氮化物析出温度, 制定了固溶处理温度为1 050 °C, 可有效抑制析出物的形成。



(a) 相含量与温度关系

(b) 局部放大

图3 热力学平衡态下316L不锈钢析出相含量与温度之间的关系

Fig. 3 Relationship between precipitation phase content and temperature for 316L stainless steel

### 3.3 成分偏析控制

铸造不锈钢在凝固过程中不可避免发生偏析，造成材料性能特别是韧性和抗腐蚀性下降。利用相图计算技术，可以计算铸造不锈钢在凝固过程中合金元素的分配行为，为实际应用中的偏析控制以及均匀化处理提供理论依据<sup>[34]</sup>。

Zou等<sup>[35]</sup>利用Thermo-Calc软件计算了平衡凝固时不同温度各元素在液相和固相中的含量及平衡分配系数，研究了不同温度条件下Mn、Nb的偏析情况，得到Mn、Nb都为正偏析元素，向枝晶间液相中富集。高建兵等<sup>[36]</sup>利用Thermo-Calc软件计算了超级奥氏体不锈钢654SMO的热力学平衡相图以及非平衡凝固过程中液相分数与元素再分配的关系曲线，并结合动力学计算得到偏析元素的扩散系数，计算出不同偏析程度的超级奥氏体不锈钢654SMO在不同温度下进行均匀化所需要的时间，计算结果如图4所示<sup>[36]</sup>。得到了消除元素偏析所需的均匀化温度为1 200~1 300 °C和均匀化时间为4~16 h，通过实验验证，均匀化条件为1 280 °C × 16 h时，铸锭元素偏析基本消除、枝晶充分消融、析出相充分回溶，塑性得到了显著提升。计算所得的均匀化工艺是较为理想的。

利用相图计算技术研究铸造不锈钢中的相变温度变化、第二相析出规律以及成分偏析倾向，为铸造不锈钢的热处理工艺设计提供指导，使铸造不锈钢获得理想的性能。

## 4 相图计算技术在铸造不锈钢中的应用展望

利用相图计算可以获得材料的相组成，而相组

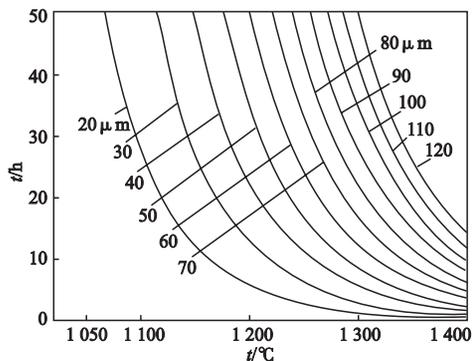


图4 均匀化动力曲线

Fig. 4 Homogenization power curves

成又受到材料的元素组成、加热冷却条件的影响。目前，相图计算技术在合金的高性能化开发方面已经取得一些进展，但在铸造领域中远没有得到充分的开发。铸造过程涉及很多受热、受力过程，凝固过程往往为非平衡凝固，而且铸造过程还需要考虑材料的铸造性能，如流动性、热裂倾向性等参数，要建立一个完整有效的、贴合实际的铸造组织预报体系，还面临着巨大的困难与挑战。

(1) 丰富和完善不锈钢数据库。可靠的热力学参数数据库是进行相图计算的必要条件。通过大量的实验研究，不锈钢的数据库已经建立，但随着不锈钢高性能化发展，合金元素的种类及添加量的控制愈加严格，制备过程需要精细化控制。对于相图计算而言，需要能够精准预测新型不锈钢的相组成，以便指导新型不锈钢的设计。目前数据库的数据精度、广度存在适用性的问题，需要对数据库进行不断的丰富与完善，提高相图计算的精准性。数据库的获取主要通过实验测试和对现有数据进行外推获取。采用高通量模拟、高通量实验可以优化增加实测数据，通过第一性原理、机器学习的方法可以快速计算出数据库所需的热力学参数，从而优化扩充数据库。

(2) 非平衡凝固的计算。相图计算主要进行的是热力学平衡计算，所得的相图中不存在非平衡组织，与实际铸造凝固存在差异。实际凝固过程受外在因素的影响，其凝固过程不完全按照平衡相图转变，而是发生非平衡凝固，形成非平衡相，与平衡凝固组织存在较大差异。将相图计算技术与非平衡凝固理论相结合，开展非平衡条件下的相图计算，也是未来发展方向之一。

(3) 相图计算与铸造数值模拟联合应用。数值模拟技术已经应用于铸造过程的缺陷分析及工艺优化，但铸造过程数值模拟需要大量准确并且可靠的材料热物性参数，如凝固区间、比热容、吉布斯自由能等，实测这些数据往往会花费大量时间、精力。利用相图计算技术能够快速准确得到材料的相与组织热力学参数，再联合数值模拟应用，能够更高效准确地进行铸造过程数值模拟，用于指导铸造材料的成分设计与铸造工艺设计。

加快相图计算技术在铸造不锈钢中的应用不仅是铸造不锈钢研究的迫切需求，也是促进相图计算技术水平不断提高及其应用范围不断扩展的强大动力。

## 参考文献:

- [1] 何燕霖, 李麟, 郑伟森, 等. 相图计算技术在先进汽车钢板材料设计中的应用研究 [C]// 中国金属学会. 第十二届中国钢铁年会论文集. 2019: 1.
- [2] SANTOS E, SILVA W, KOGA G Y, et al. Corrosion resistant boron-modified ferritic and austenitic stainless steels designed by CALPHAD [J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2021, 52 (7): 1-12.
- [3] 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.
- [4] KIM C W, YOO H S, JEON J Y, et al. The effect of Fe addition on microstructure, mechanical properties and electric conductivity of the as-cast Al-Mg-Si alloys [J]. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2021, 21 (3): 1915-1919.
- [5] 岳强, 袁改焕, 李小宁, 等. 相图计算技术及其在核用钎合金研发中的应用前景 [J]. 材料导报, 2015, 29 (5): 135-139.
- [6] ZHAO J C., HENRY M F. CALPHAD—is it ready for superalloy design? [J]. Advanced Engineering Materials, 2010, 4 (7): 501-508.
- [7] SPENCER P J. A brief history of CALPHAD [J]. Calphad, 2008, 32 (1): 1-8.
- [8] LI X, LI Z, CHEN C, et al. CALPHAD as a powerful technique for design and fabrication of thermoelectric materials [J]. Journal of Materials Chemistry A, 2021, 11 (9): 6612-6633.
- [9] LINDWALL G, WEI X. CALPHAD-based methods for alloy additive manufacturing [J]. Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2021, 42 (1): 1-2.
- [10] LUKAS H L, HENIG E T, ZIMMERMANN B. Optimization of phase diagrams by a least squares method using simultaneously different types of data [J]. Calphad-Computer Coupling of Phase Diagrams & Thermochemistry, 1977, 1 (3): 225-236.
- [11] 李一为, 常可可, 王培生, 等. 相图计算及其应用 [J]. 粉末冶金材料科学与工程, 2012, 17 (1): 1-9.
- [12] CHO I S, SSVELYEV K D, GOLOD V M. Development of thermophysical calculator for stainless steel casting alloys by using CALPHAD approach [J]. China Foundry, 2017, 14 (5): 353-358.
- [13] 周立华. 利用JMatPro软件进行合金覆层成分设计及回火工艺制定 [J]. 功能材料, 2021, 52 (3): 3200-3205.
- [14] BALE C W, BELISLE E, CHARTRAND P, et al. FactSage thermochemical software and databases, 2010-2016 [J]. Calphad, 2016, 55 (9): 35-53.
- [15] CHEN Y R, ZHANG F. Pandat simulation of the solidification sequence and microstructure development of the 2 Pct Mg-55 Pct Al-1.6 Pct Si-Zn coating on steel [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2020, 51 (7): 5228-5244.
- [16] LIU M T, ZHONG P, SHENG W, et al. Optimized design of ultra-high strength stainless steel based on thermo-calc calculation [J]. Materials Science Forum, 2020, 993: 585-591.
- [17] 潘世华, 季登平. 宝钢含氮奥氏体不锈钢的开发和应用 [C]// 第十届中国钢铁年会暨第六届宝钢学术年会论文集III. 中国金属学会, 2015: 7.
- [18] 胡锦涛, 江来珠, 张永杰. 数值模拟在宝钢不锈钢研发中的应用 [J]. 宝钢技术, 2013 (5): 8-14.
- [19] 王颖珠. 17-7PH不锈钢低温等离子渗氮层组织结构及性能研究 [D]. 大连海事大学, 2018.
- [20] 孙郅阔. 新型高膨胀双相不锈钢设计与组织性能 [D]. 哈尔滨工业大学, 2019.
- [21] WANG Z, WANG M, YONG Q, et al. Materials informatics and its application in materials research [J]. Materials China, 2017, 36 (2): 132-140.
- [22] HAYES F H, HETHERINGTON M G, LONGBOTTEM R D. Thermodynamics of duplex stainless steels [J]. Materials Science and Technology, 2013, 6 (3): 263-272.
- [23] YAMAMOTO R, YAKUWA H, MIYASAKA M, et al. Effects of the  $\alpha/\gamma$  phase ratio on the corrosion behavior of cast duplex stainless steel [J]. Corrosion -Houston Tx-, 2020, 76 (9): 815-825.
- [24] VENKAT, RAMESH. Sandvik lean duplex SAF2304 a solution for heat exchanger tubings in ammonia condensers and coolers [J]. Indian Journal of Fertilisers, 2014, 10 (12): 54-57.
- [25] 何燕霖, 李梦雨, 李麟, 等. 超高强塑积TRIP钢的合金设计 [C]//重庆大学、钒钛资源综合利用产业技术创新战略联盟, 2017: 7.
- [26] 马跃, 符寒光, 袁园, 等. 铸造Fe-Cr-B-Al合金相图计算及实验验证 [J]. 铸造, 2015, 64 (10): 950-954.
- [27] 陈雷, 李飞, 张英杰, 等. 一种TRIP/TWIP型双相不锈钢的相图及其亚稳奥氏体组织稳定性计算 [J]. 燕山大学学报, 2016, 40 (1): 35-38.

- [28] 朱泽华, 张卫东, 涂小慧, 等. Sigma相对铸造双相不锈钢组织和性能的影响 [C]//中国腐蚀与防护学会, 2017: 14.
- [29] 杨维宇, 杨卓越, 丁雅莉, 等. Thermo-Calc在马氏体时效钢热处理工艺优化中的应用 [J]. 钢铁研究学报, 2009, 21 ( 11 ) : 56-59.
- [30] 李阳, 张威, 王琦, 等. 铁素体耐热不锈钢0.1C-18Cr-1Al-1Si铸造合金析出相研究 [J]. 铸造技术, 2019, 40 ( 6 ) : 540-543.
- [31] 金传伟, 张珂, 吴园园, 等. 奥氏体不锈钢物相的精细结构表征 [J]. 冶金分析, 2019, 39 ( 3 ) : 7-12.
- [32] 李文权. 亚稳奥氏体相特征对节约型双相不锈钢TRIP效应的影响研究 [D]. 燕山大学, 2019.
- [33] HUANG Q, WENDLER M, MOLA J, et al. Design of high alloy austenitic CrMnNi steels exhibiting TRIP/TWIP properties [M]. 2020.
- [34] 王琴. 超高铬高碳双相钢的凝固过程及组织性能研究 [D]. 大连理工大学, 2019.
- [35] ZOU H, ZHANG Y, WANG P, et al. Analysis of element distribution of 310S austenitic stainless steel based on thermo-calc [J]. Journal of Shenyang Ligong University, 2019, 38 ( 1 ) : 39-42.
- [36] 高建兵, 范思鹏, 张树才, 等. 新型超级奥氏体不锈钢654SMO偏析行为及均匀化工艺 [J]. 钢铁, 2018, 53 ( 8 ) : 83-89.

---

## Application Status and Prospect of Phase Diagram Calculation Technology in Casting Stainless Steel

WU Qi, CHEN Jing-chang, WEI Yan-peng, GUAN Shu-wen, SHI Jian, GAO Peng, YU Bo

(Shenyang Research Institute of Foundry Co., Ltd., State Key Laboratory of Light Alloy Casting Technology for High-End Equipment, Shenyang 110022, Liaoning, China)

### Abstract:

As a relatively mature method of obtaining phase diagram, phase diagram calculation technology has made certain progress in the development and design of casting alloys, but it is far from being fully developed and applied. The establishment of an accurate and effective casting alloy phase and structure prediction system still faces huge difficulties and challenges. In this paper, the development of phase diagram calculation technology and the commonly used calculation software are summarized, and the application status of phase diagram calculation in the study of casting stainless steel is reviewed, including the application of phase diagram calculation to the composition design, phase transition temperature calculation, precipitated phase type calculation and homogenization of the composition for cast ingot of stainless steel. Finally, the development direction of phase diagram calculation in the future is proposed.

### Key words:

CALPHAD; casting stainless steel; materials design