

集成计算材料工程及其在镁合金铸造和热处理方向上的应用探索

韩志强

(清华大学材料学院, 北京 100084)

摘要: 集成计算材料工程 (ICME) 是材料开发与应用的革新模式, 其定义为计算工具中获取的材料信息与工程产品性能分析和制造过程模拟的集成。自ICME概念提出以来, 航空航天、汽车和船舶工业在应用ICME方面取得了显著进展。本文对上述进展进行了比较全面的综述, 在此基础上介绍了作者课题组在构建镁合金铸造和热处理ICME框架方面的研究进展, 包括镁合金凝固枝晶生长的元胞自动机 (CA) 和相场 (PF) 建模、共晶和第二相的X射线断层扫描表征、时效过程析出相的相场建模, 以及可用于预测铸态组织晶粒尺寸和第二相体积分数、时效组织中析出相的数量密度、尺寸、体积分数和屈服强度的解析模型。最后对ICME的应用前景进行了展望并提出了建议。

关键词: 集成计算材料工程, 镁合金, 铸造, 热处理, 建模仿真

作者简介:

韩志强 (1968-), 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为铝、镁合金先进铸造成形技术及宏/微观建模仿真的理论与应用。电话: 010-62794616, E-mail: zqhan@tsinghua.edu.cn

中图分类号: TG156;

TG146.2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2024)

03-0290-13

基金项目:

北京市自然科学基金-小米创新联合基金资助的项目 (L223001); 国家自然科学基金联合基金项目 (U1737208); 国家重点研发计划 (2016YFB0701204); 国家科技重大专项 (2017ZX04006001)。

收稿日期:

2023-11-01 收到初稿,

2023-12-20 收到修订稿。

2006年11月矿物金属和材料学会 (TMS) 主办的期刊JOM发表多篇文章, 首次提出集成计算材料工程 (Integrated Computational Materials Engineering, ICME) 的概念并介绍了美国在汽车和航空制造领域探索和应用ICME的情况^[1-4]。2008年美国科学院下属的学术出版机构NAP (The National Academies Press) 出版了国家材料顾问委员会 (National Materials Advisory Board, NMAB) 向美国能源部、国防部、科学基金会、国家标准局 (NIST) 等政府部门建议积极推动ICME的研究与应用的报告^[5]。

为了推动镁合金在汽车上的应用, 从2007年起, 中国、美国、加拿大三国启动了政府资助的国际合作研究项目“镁质车体前端结构研究 (Magnesium Front End Research and Development)”^[6], 其中任务之一就是ICME在镁合金铸件、板材、型材、以及连接中的研究与应用。2013年, 中国工程院启动了“集成计算材料工程在高端成形制造行业应用”的咨询研究项目, 面向航空、航天、汽车、能源装备制造领域, 研究推动ICME应用的路线图及国家层面的政策建议^[7]。

从ICME概念的提出到现在十几年过去了, 这期间笔者参与了中美加国际合作项目ICME研究任务以及中国工程院咨询研究项目, 同时多年来密切关注国内外ICME的研究与发展状况, 并且针对汽车和航天领域镁合金结构件成形制造, 研究相关的工艺-组织-性能模型, 构建ICME框架并探索其应用。本文结合笔者的工作体会, 与读者分享对集成计算材料工程的思考、相关研究进展及未来发展中的挑战。

1 集成计算材料工程的概念及内涵

在美国国家材料顾问委员会的报告中, 集成计算材料工程的定义是计算工具中获取的材料信息与工程产品性能分析和制造过程模拟的集成^[5]。其中有三个要素, 第一个是计算工具中获取的材料信息, 第二个是工程产品性能分析, 第三个是制造过程模拟; 其含义是将材料模型、数据和软件工具, 与产品设计和制造过程模拟整合为一个集成的系统, 实现材料开发 (或选择)、制造工艺优化和产品设计一体化, 在产品制造出来之前通过集成计算使材料选择、制造过程和产品设计优化成为一

个整体。

在ICME概念提出之前，计算材料科学、产品设计的计算机辅助工程、材料成形过程的计算机模拟仿真已有较长时间的发展，而ICME的目的是通过上述三个要素的集成（包括补齐缺失或薄弱的链条环节，如工艺-组织-性能模型等），构建并行、协同的材料-工艺-产品开发环境和软件工具体系，显著缩短研发周期、降低研发成本。

ICME作为一个概念被提出的时候，它是一个新的思想，也是一个重要的方法论，它强调“集成（Integration）”和“工程（Engineering）”。工程，很容易理解，意即面向工程应用；集成，含义很丰富，它包括在材料开发（或选择）、产品设计、工艺优化中，各种软件工具的综合运用和各种计算模型与数据（库）的集成，其中模型与数据的集成包括不同尺度、不同工艺环节、不同功能模型之间的耦合、连接和集成。因此，多尺度、全流程的仿真模型和数据是ICME的核心，而材料、成分、工艺、组织、缺陷、性能以及它们之间的关系是ICME的主线。ICME强调模型和计算的同时也特别强调试验的重要地位，试验是验证模型和检验ICME有效性的重要手段。

2011年美国提出了材料基因组计划（The Materials Genome Initiative, MGI），MGI中阐述了材料创新基础设施的三个平台：计算工具平台、试验工具平台和数字化数据（数据库及信息学）平台，通过集成计算工具、试验工具和数据库加快材料的设计与应用，特别是通过高通量计算、高通量试验发现和开发新材料，可以说ICME是MGI的前奏^[8]，同时它也是MGI的

重要组成部分^[9]。

2 集成计算材料工程的发展现状

2.1 国外集成计算材料工程的发展现状

美国是率先在汽车和航空制造领域探索ICME应用的国家。福特汽车公司开发的虚拟铝铸造方案（Virtual Aluminum Castings, VAC）^[2, 5]是ICME在汽车工业领域成功应用的典型案例，图1^[5]是VAC的ICME流程，从零件的几何模型（CAD数据）开始，开展铸件充型和热模拟（包含凝固和热处理），模拟的输出用于预测微观组织参数，进而预测屈服强度的空间分布。VAC将材料、零件设计和制造集成起来，基于整体方案设计铝合金铸件，将制造工艺导致的材料性能变化引入到零件性能评价中，改变了传统的设计过程。VAC方法已在福特的动力传动系铸铝组件设计、制造和计算机辅助工程（CAE）中实施，带来上亿美元的直接和间接成本节约^[10]。

美国通用汽车公司（GM）建立了虚拟铸件开发系统VCCD（Virtual Cast Component Development）^[11]，该系统基于ICME理念，是一个全面的虚拟过程，它包括合金设计/选择、工艺优化、多尺度缺陷和微观结构模拟，以及零件机械性能和服役性能的分析与预测，如图2^[11]所示。VCCD已成功应用于发动机缸体的虚拟制造过程，通过VCCD将铸件设计、工艺优化、性能预测相结合，缩短研发时间、降低研发成本。

根据公开报道，在航空制造领域，通用电气公司（GE）应用ICME成功开发了用于飞机发动机单晶涡轮叶片的镍基高温合金。在成本上升的情况下为了减少

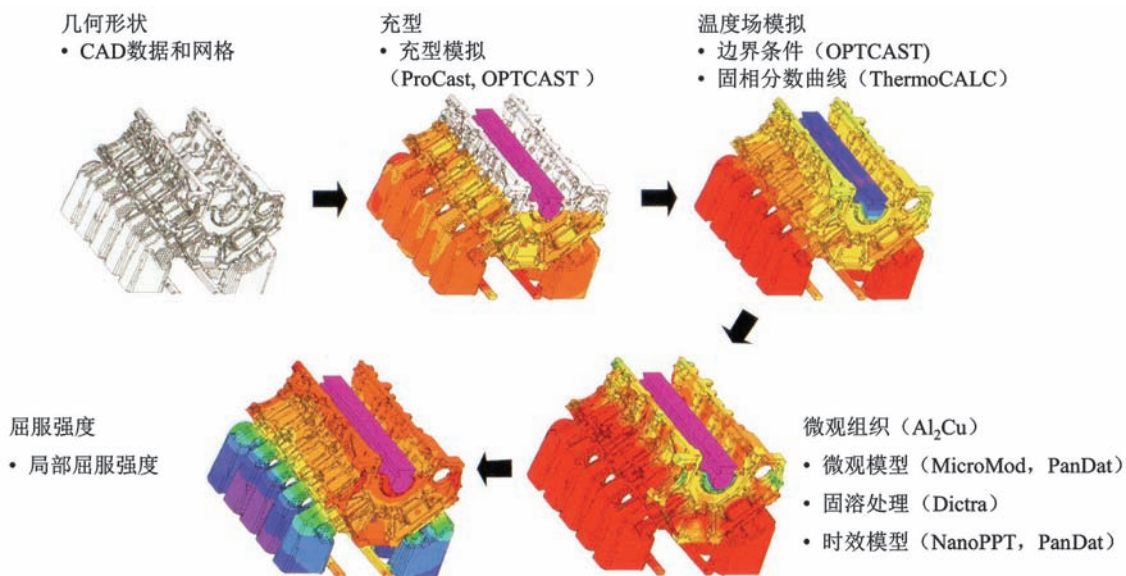


图1 福特汽车公司虚拟铝铸造方案（VAC）的ICME流程

Fig. 1 The ICME process flow for Ford's Virtual Aluminum Castings (VAC) tool

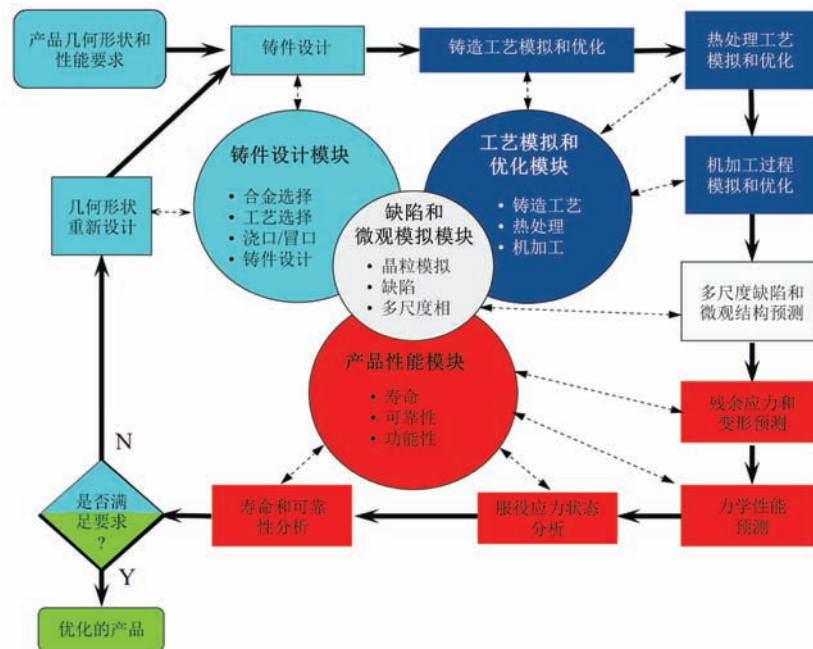


图2 通用汽车公司的虚拟铸件开发系统VCCD

Fig. 2 General motors virtual cast component development (VCCD) system

对镍的依赖，通用电气成功开发并应用了两种低镍高温合金，分别命名为René N515和N500。在合金开发过程中采用计算模拟，将神经网络模型与GE已有的合金数据库相结合，预测数百种成分的合金的性能进而筛选最有前途的成分，采用上述方法使以往需要6年的开发过程缩短为2年，显著缩短了合金开发时间^[10]。

航空制造领域另一个成功的ICME案例是QuesTek公司新型起落架超高强度钢Ferrium S53的设计和开发^[10]。QuesTek在合金开发中与国防部、能源部等政府机构的项目进行合作或获得这些项目的支持。在Ferrium S53的开发中，QuesTek利用多个计算模型，在两年的时间里通过只开发五种原型成分及其热加工方法就成功开发出这种具有优异耐腐蚀性、且没有对环境有害的镉镀层的超高强度钢，节省了约5 000万美元的开发成本。计算模拟手段使合金设计工程师能够考虑制造工艺的影响，并将其集成到合金设计中，在能够获得所需性能前提下尽可能采用熟悉的加工工艺，从而最大限度地提高材料的可加工性。

英国在探索ICME应用方面也有相关案例^[12-14]，英国工程与自然科学研究基金（EPSRC）资助了针对航空发动机涡轮盘制造过程（包含真空电弧熔炼、均匀化热处理、制坯、锻造、热处理等）贯穿各工艺环节的组织与缺陷集成模拟研究，贯穿工艺环节的模拟即为全流程模拟（Through Process Modeling, TPM）。

欧洲的铝工业界开发并应用先进的建模手段，覆盖半连续铸造、轧制/挤压、退火等工艺环节，也称为贯穿工艺环节的模拟（全流程模拟），被认为是ICME

在铝工业中应用的成功案例，如图3所示^[15]。

从2011年起，TMS每隔两年组织召开一次ICME的国际会议，迄今已举办七次^[16-22]。每次大会上都有来自学术界、工业界、软件公司的代表交流ICME相关的模型、数据、应用、人才培养、基础设施等方面的进展及存在的问题。在数次TMS年会、ICME国际会议上，Tresa M. Pollock、John E. Allison等最先倡导ICME的学者以及来自美国GE航空、波音（Boeing）、空军实验室（AFRL）等机构的代表就ICME的发展历程、现状和未来做了主题或邀请报告^[23-28]。

在美国国防部、能源部和国家科学基金的资助下，TMS组织了来自工业界、学术界、政府部门的近50位专家，对ICME在航空、汽车和船舶工业中应用的现状、实施框架、挑战和机遇进行了研究，在2013年形成了“ICME：在航空、汽车和船舶工业中实施ICME”的专题报告^[10]。ICME的实施框架因应用领域、对象以及应用目的会有所差异，以汽车领域铸件、冲压、型材结构制造为例，典型的ICME实施框架如图4所示。其中，“工艺-组织-性能”关系相关的模型、软件、数据库及其可靠性是ICME的关键和难点。

跨尺度（或多尺度）模拟和数据基础设施在ICME和MGI中都是非常关键的要素，在国家标准局（NIST）资助下，TMS组织了来自学术界、工业界和政府部门的40位国际知名专家，开展跨尺度材料模拟路线图研究，在2015年形成了题为“跨尺度模拟：连接跨空间和时间尺度材料模型的路线图研究”的研究报告^[29]。报告阐述了跨尺度模拟的研究现状、存在

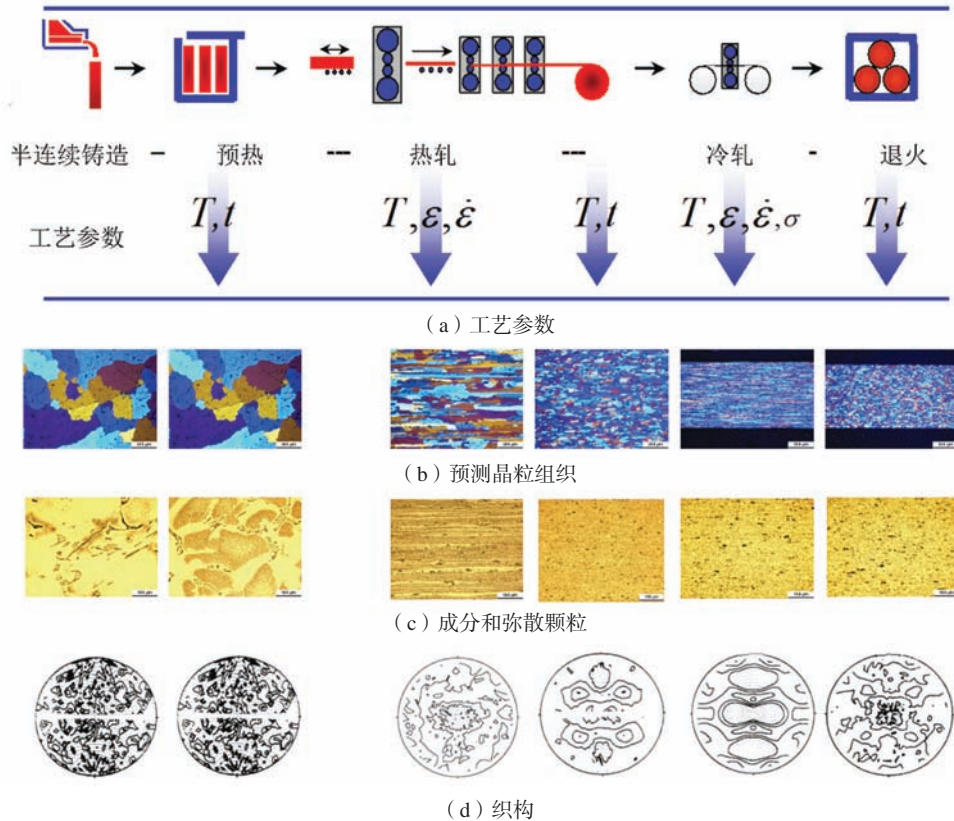


图3 铝板材生产过程全流程建模
Fig. 3 Through process coding (TPM) for aluminum strip/sheet production

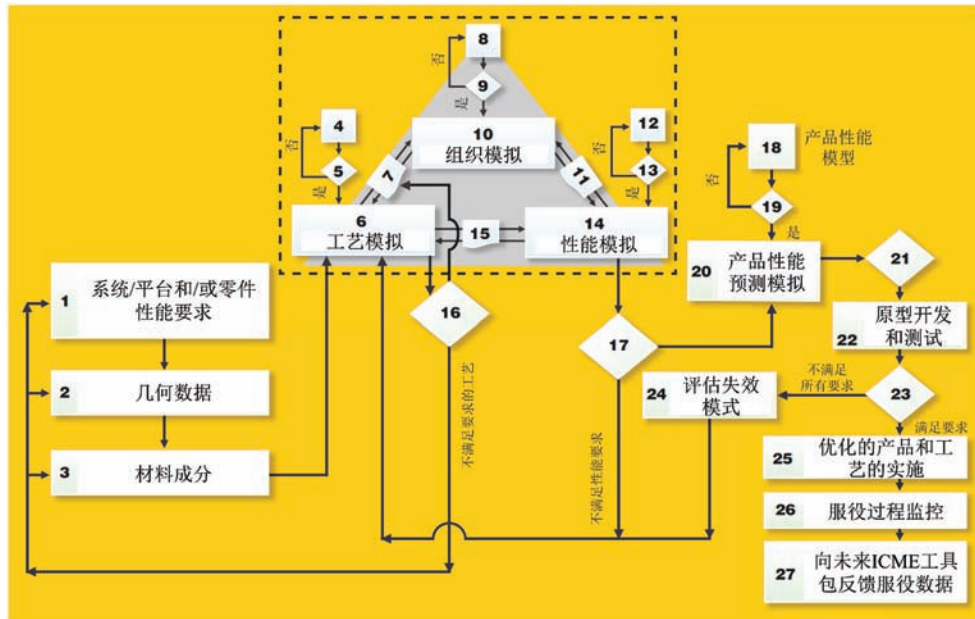


图4 汽车领域ICME的实施框架示例，其中，“工艺-组织-性能”关系是ICME的核心和关键
Fig. 4 Automotive ICME implementation framework, where the ‘Process-Structure-Property’ modeling is the core technology

的差距和挑战，提出了研究跨尺度材料模拟基本理论框架、方法和计算代码的建议。报告还给出了跨尺度材料模拟所涉及的软件名称、简要描述以及部分开源代码的下载链接。此后，在国家科学基金的资助下，

TMS还组织了构建材料数据基础设施的研究，在2017年形成题为“构建材料数据基础设施：打开科学与工程中发现与创新的新途径”的专题报告^[30]。

近十年来，世界范围内对ICME的探索不断走向深

入, 应用的范围也在扩大, 很多研究针对镍基合金^[31]、钛合金^[32]、铝合金^[33]、镁合金^[34]、甚至高熵材料^[35]等等。近期的一些综述论文^[36-39]反映了过去一个阶段ICME的进展及发展过程面临的挑战, 可以很清晰地看到, ICME已经被工业界认可, 成为材料开发、加工和应用的重要方法和理念。值得注意的是, 除了传统的基于机理的材料模型之外, 近年来基于数据的(或数据驱动的)模型是值得关注的新发展, 我们可以将它理解为ICME中材料组织性能模型的新扩展, 因此, 我们可以认为, 凡是在材料开发、工艺优化、产品设计中能够提高开发效率、降低开发成本的各种模型和计算手段, 都属于广义ICME的范畴。

2.2 国内集成计算材料工程发展现状

早在2007年, 我国就参与了包含集成计算材料工程研究任务的国际科技合作项目。为了推动镁合金在汽车领域的应用, 2007年, 中国科技部、美国能源部、加拿大自然资源部联合资助并启动了“中国、美国、加拿大三国政府间科技合作项目“镁质车体前端结构研究与开发”(Magnesium Front End Research and Development)^[6]。该项目首期研究内容包含9个任务, 其中第9个任务就是“集成计算材料工程”(Task 9: Integrated Computational Materials Engineering), 聚集了中国、美国、加拿大三个国家在铸造、板材、型材、焊接等多个领域的建模仿真专家, 合作开展ICME研究^[40-43]。我国清华大学、东北大学、中南大学和重庆大学等高校参与了该任务的研究工作, 并与提出和倡导ICME的国际著名学者、美国工程院院士John E. Allison和Tresa M. Pollock建立了密切的交流与联系, 及时了解和掌握国外ICME的发展动态。

ICME的重要基础之一是成形制造过程的建模与仿真, 经过三十余年的发展, 我国在成形制造模拟仿真方面, 取得了巨大的进步。特别是近一、二十年来, 我国成形制造模拟仿真技术不断向广度、深度发展, 成形制造模拟仿真由以预测温度场、流场、应力场等过程物理量为目的的宏观尺度模拟发展到以预测组织、性能为目的的微观尺度模拟, 由单一尺度模拟发展到多尺度耦合模拟, 由单一环节模拟发展到全过程集成模拟。这些已有的模型、工具和手段在发展中不断完善, 是我国发展ICME的重要基础。

清华大学长期开展先进成形制造多尺度、全流程建模仿真研究, 特别是针对航空航天、汽车、能源装备等领域关键零部件、关键制造工艺开展了系统、深入的研究^[44-45]。在航空航天领域, 通过与中国航发沈阳黎明航空发动机有限责任公司、北京航空材料研究院、上海航天精密机械研究所合作, 开展航空发动机

单晶叶片、航天舱体宏观/微观建模与仿真研究。在汽车工业领域, 与中国第一汽车集团、苏州三基铸造装备股份有限公司、中信戴卡、美国通用汽车公司等国内外知名整车或零部件企业合作, 开发多尺度、全流程建模与仿真技术。在能源装备制造领域, 与中国一重、中信重工等企业合作, 针对第三代核电技术所需600 t级大型钢锭开展了多包合浇、宏观偏析的建模与仿真研究, 积极推动ICME在工业中的应用。

上海交通大学与上海电气集团旗下多家企业合作, 开展了大型件锻造和热处理模拟仿真技术的研究, 特别是针对火电、核电大型锻件等关键部件开展了集成模拟仿真技术在工艺设计优化方面的工业应用研究^[46-47]。北京航空航天大学 and 西北工业大学在增材制造、大型钛合金构件精确成形等方面也开展了建模与仿真研究^[48-50]。此外, 中国科学院金属研究所、华中科技大学等高校院所针对先进成形制造开展了长期、深入的研究, 这些研究积累为我国高端成形制造领域发展和应用ICME奠定了重要基础^[51-53]。

中南大学杜勇教授团队将第一性原理计算、相图热力学、扩散动力学、相场模拟和有限元分析等多种计算方法同试验相结合, 探索和实践ICME的理念和方法^[54-57], 成功应用于梯度硬质合金、化学气相沉积耐磨涂层、锂离子电池电极材料和汽车板材用新型Al-Mg-Si合金的开发。

为了加强我国工业界和学术界在ICME方面的信息交流和学术交流, 积极推动我国ICME技术发展, 2011—2014年, 清华大学先后组织召开了“数字化设计与制造发展战略高层国际论坛”^[58]和“高端成形制造技术及多尺度全流程建模与仿真”^[59]与“集成计算材料工程在高端成形制造行业应用”^[60]两次工程前沿研讨会。会议由中国工程院主办, 清华大学承办, 邀请了来自美国密歇根大学、通用汽车公司、福特汽车公司、英国曼彻斯特大学、莱斯特大学、以及国内第一汽车集团公司、中国一重、上海交通大学、北京航空航天大学、西北工业大学、中国科学院金属研究所、华中科技大学等国内外在多尺度、全流程建模与仿真方面开展研究、应用的高校和企业代表做专题报告, 并探讨中国发展ICME的基础、途径和举措。

3 镁合金铸造和热处理方向上ICME的探索与实践

镁合金是重要的轻量化材料, 在车辆、航空、航天等领域轻量化结构制造中有广阔的应用前景。铸造是镁合金结构件的主要成形方式之一, 铸造之后的热处理是调控材料性能的重要工艺手段, 因此面向镁合

金结构件铸造成形,开展铸造-热处理过程工艺、组织、性能建模仿真和试验研究,探索镁合金铸造-热处理过程ICME实施框架,对于缩短镁合金铸件研发周期、降低研发成本具有十分重要的意义。

清华大学韩志强教授团队面对汽车、航天领域轻量化结构件制造技术需求,从2006年起围绕镁合金铸

造和热处理开展了工艺、组织和性能的建模仿真与试验研究,探索ICME理念在镁合金铸造和热处理中的应用。其中以工艺-组织-性能关系模型为重点,主要集中于图5中④凝固组织模拟、⑤热处理组织模拟和⑥力学性能预测的研究。

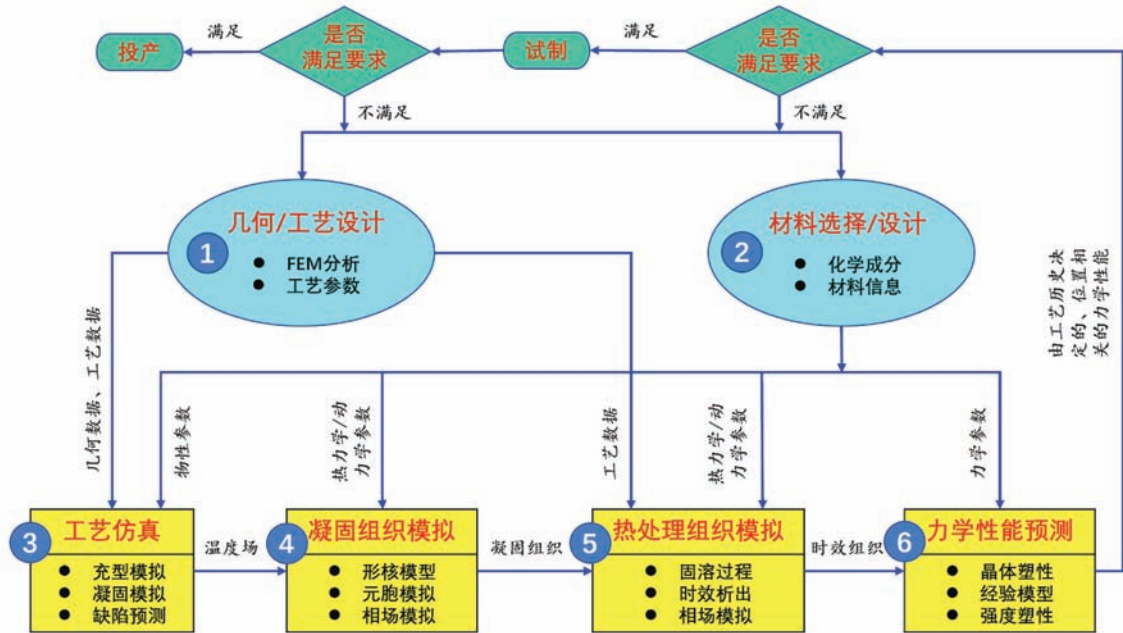


图5 镁合金铸造-热处理ICME框架

Fig. 5 The ICME framework for casting and heat treatment of magnesium alloys

3.1 镁合金凝固组织模拟及试验表征

镁合金具有密排六方的晶体结构特征,其枝晶形貌与具有面心立方(FCC)和体心立方(BCC)晶体结构金属的枝晶形貌有较大不同,在自由生长条件下,镁合金等轴晶在与 c 轴垂直的二维平面上的生长形貌,显示了类似雪花状的六重对称性特征。元胞自动机(Cellular Automaton, CA)是模拟凝固组织常用的计算方法,在正方形网格上采用CA方法模拟枝晶生长时,会在 0° 、 45° 和 90° 方向上引入枝晶生长的“伪动力学”,由于正交网格引入的这种“伪动力学”,使具有六重对称形貌的镁合金枝晶,在 45° 和 90° 方向上的生长受到干扰,且在 60° 和 120° 方向上的生长受到阻碍。笔者团队提出了一种基于两套网格的元胞自动机模型,用来模拟铸造镁合金凝固过程的枝晶形貌演化^[61-64]。模型中采用的两套网格,一套为四边形正交网格,用来求解溶质扩散方程;另一套为正六边形网格,用来进行元胞自动机方法的计算,以反映镁合金枝晶形貌的六重对称性特征。两套网格之间通过插值方法进行耦合。图6^[61-64]为采用上述模型模拟获得的Mg-Al合金凝固过程微观组织的形貌。该模型经改进后

应用于Mg-Gd-Y合金航天舱体凝固过程微观组织演化的模拟,能够根据铸件不同部位凝固过程冷却速率的差异以及合金Zr(晶粒细化剂)含量的差异,模拟这些因素对凝固组织的影响^[65]。

CA方法由于不过分拘泥于物理机制方面的约束而在实际应用方面获得一定优势,不过在希望尽可能考虑物理机制和实际多组元合金体系热力学/动力学特性的情况下,相场方法逐渐成为组织模拟的主流方法。相场方法通过考虑热力学驱动力和引入用于描述固液界面状态的序参量来建立微观组织演化模型。相场方法可以结合热力学、动力学建模,耦合温度场、流场和外场,实现对多元多相合金在压力、强迫对流等多种条件下相变过程的模拟。笔者团队在Kim等研究者^[66]提出的多元合金相场模型中引入压力项,发展了Mg-Al-Sn三元镁合金压力下凝固枝晶生长的相场模型^[67-68],基于相图计算软件建立了Mg-Al-Sn三元体系热力学模型,将嵌入压力项的三元合金相场模型与Mg-Al-Sn热力学模型和热力学、动力学数据库进行耦合,实现了Mg-Al-Sn三元镁合金在压力下凝固枝晶组织演化的模拟(图7^[67]),为多组元镁合金挤压铸造组织模拟奠定

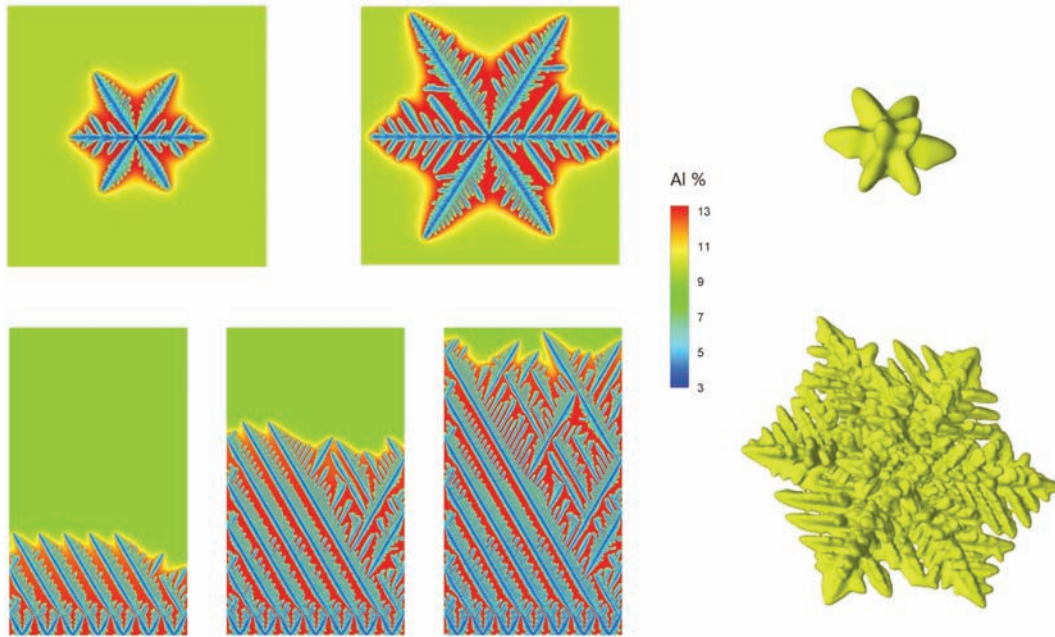
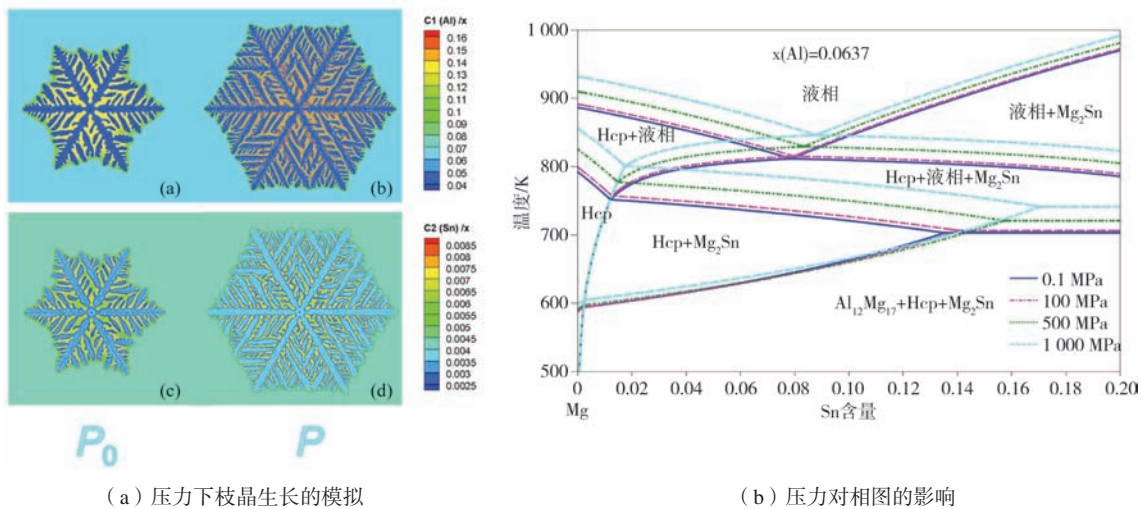


图6 Mg-Al合金凝固过程微观组织演化的元胞自动机模拟, 包括等轴晶、柱状晶生长的二维模拟和等轴晶生长的三维模拟
Fig. 6 Cellular automaton simulation of the microstructure evolution in solidification of Mg-Al alloy, showing the equiaxed and columnar dendrite growth



(a) 压力下枝晶生长的模拟

(b) 压力对相图的影响

图7 Mg-Al-Sn三元合金压力下凝固热力学及枝晶生长模拟

Fig. 7 The thermodynamics and dendrite growth of the pressurized solidification of Mg-Al-Sn ternary system

了重要基础。

在ICME实践中, 试验研究占有十分重要的地位。试验研究是检验和校核模型计算结果的重要手段, 除了光学显微镜、扫描电镜、透射电镜等常规试验手段外, 近二十年来, X射线断层扫描技术在研究材料微观结构方面得到广泛应用。X射线断层扫描技术的成像原理是用材料对X射线的吸收和透射衬度的差异来获取带有三维信息的投影图片, 利用专业软件将投影图片中的信息转化为二维灰度切片图或数据体, 在三维图像处理软件中将具有不同灰度值的物相或结构进行阈值

分割、提取和可视化。对于铸造镁合金, 其凝固组织一般由初生相 α 和共晶组成, 镁合金的共晶通常表现为离异共晶, 由过饱和的 α' 和 β 相组成。图8^[69]为笔者团队采用X射线断层扫描方法并结合高分辨率扫描电镜判定物相边界, 通过三维重构获得的Mg-Gd-Y合金凝固组织中共晶和第二相的空间分布^[69], 其中, 各相体积分数的定量数据可用于凝固组织模型计算结果的验证。图9为Mg-Gd-Y合金固溶过程第二相溶解进程的X射线断层扫描表征^[70]。

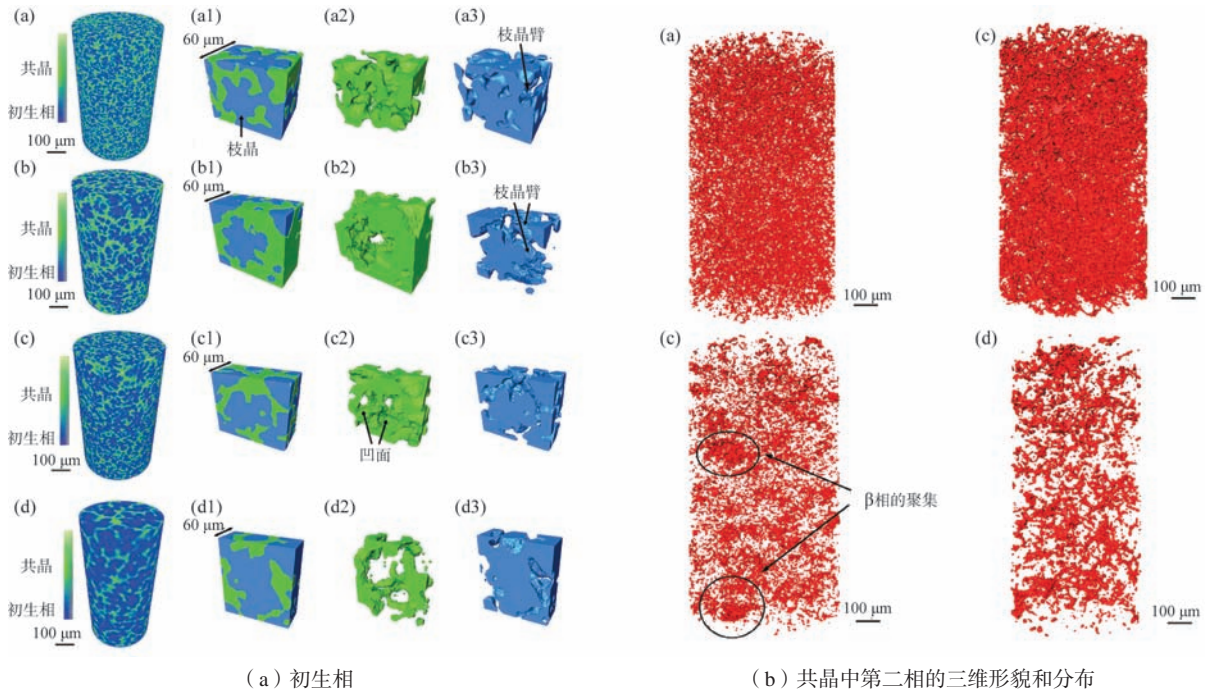


图8 Mg-Gd-Y合金凝固组织X射线断层扫描表征
Fig. 8 X-ray tomographic characterization of the as-cast microstructure of Mg-Gd-Y alloy

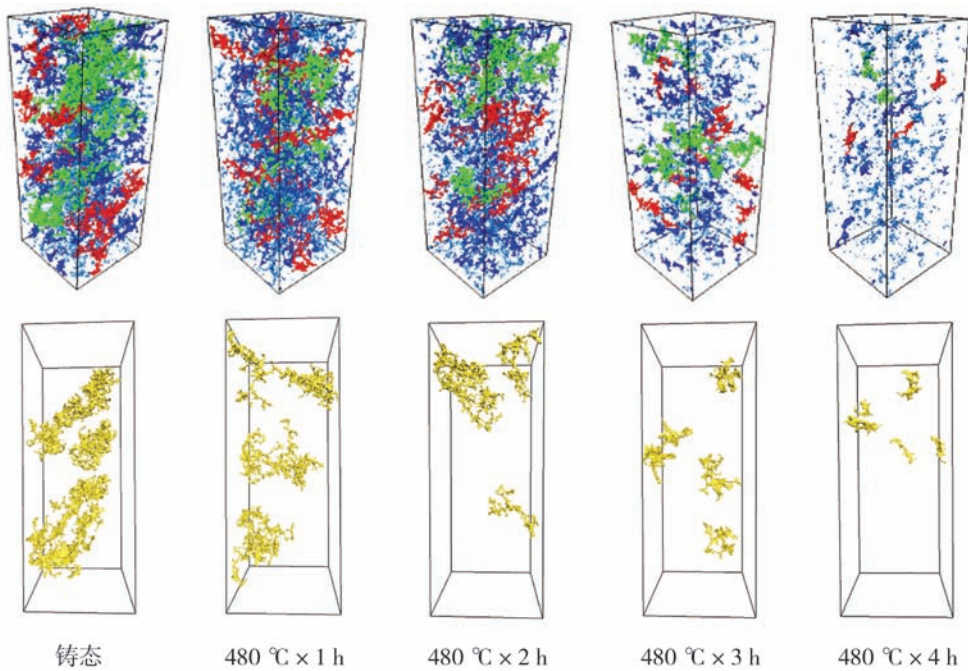


图9 Mg-Gd-Y合金固溶过程第二相X射线断层扫描表征
Fig. 9 X-ray tomographic characterization of the evolution the secondary phase in solid solution process

3.2 镁合金热处理时效析出模拟及力学性能预测

镁合金热处理时效过程是强化和调控合金力学性能的重要环节，强化效果与时效析出过程的晶体学、热力学和动力学密切相关。研究镁合金的时效析出过

程对于进一步改善其时效强化效果、提高其性能和扩大其应用具有重要意义。笔者团队针对Mg-Al系合金的时效析出过程，利用扫描电镜研究了不同时效工艺条件下试样中析出相的形貌特征、类型和分布。利用

透射电镜研究了占绝大多数的连续析出相的晶体学特征、形貌并对其尺寸分布进行定量统计获得其生长动力学特征,利用原子力显微镜对该类析出相的三维轮廓形貌进行了表征研究^[71]。在此基础上,建立了模拟Mg-Al系合金时效过程连续析出相 β -Mg₁₇Al₁₂演化的相场模型^[72-74]。模型中化学自由能通过耦合热力学计算获得,界面能异性通过构造界面能和相场动力学系数的异性函数引入,弹性应变能采用微观弹性力学理论进行计算。通过模拟揭示了界面能异性和弹性应变能对析出相形貌特征和生长动力学的影响,为通过界面能调控析出相形貌提供了科学依据。通过界面处理耦合并行计算技术,扩大了多个多变体析出的三维模拟的计算规模,模拟尺度达到微米级别(图10)。

凝固过程的模拟大多采用相场方法或者CA方法,这些方法可以精细地刻画合金凝固过程的枝晶形貌,但其计算域相比于铸件的尺度小太多、计算复杂度也较高,难以用于预测整个铸件上凝固组织的定量信息。固溶过程的直接模拟也存在着计算尺度小,计算复杂度高等问题,难以模拟整个铸件上所有部位共晶

的溶解和均匀化过程。时效过程模拟大多采用相场方法,该方法可以精细地模拟析出相的分布、形貌,但是只能模拟屈指可数的析出相颗粒,难以应用于预测合金时效过程析出相的数量密度、体积分数、平均尺寸等决定力学性能的组织特征参数。鉴于上述情况,笔者团队开发了适用于Mg-Al合金凝固及热处理过程组织特征参数和屈服强度的预测模型^[75],该模型为确定性的解析模型,能够计算给定凝固和热处理工艺条件下合金的晶粒尺寸、共晶分数、析出相的数量密度、平均尺寸、体积分数等组织特征参数,进而基于细晶强化、固溶强化、析出强化机制,预测屈服强度在整个铸件上的分布。图11^[75]为采用该模型预测的镁合金车轮轮毂在铸态、固溶、固溶+时效状态下,铸件上屈服强度的分布。该模型经进一步改进,考虑晶粒和析出相几何形状对凝固和析出动力学的影响,形成适用于Mg-Gd-Y合金的模型^[76-77],应用于航天构件的铸造和热处理工艺模拟,为改变工艺开发中严重依赖经验试错的现状提供了科学手段。

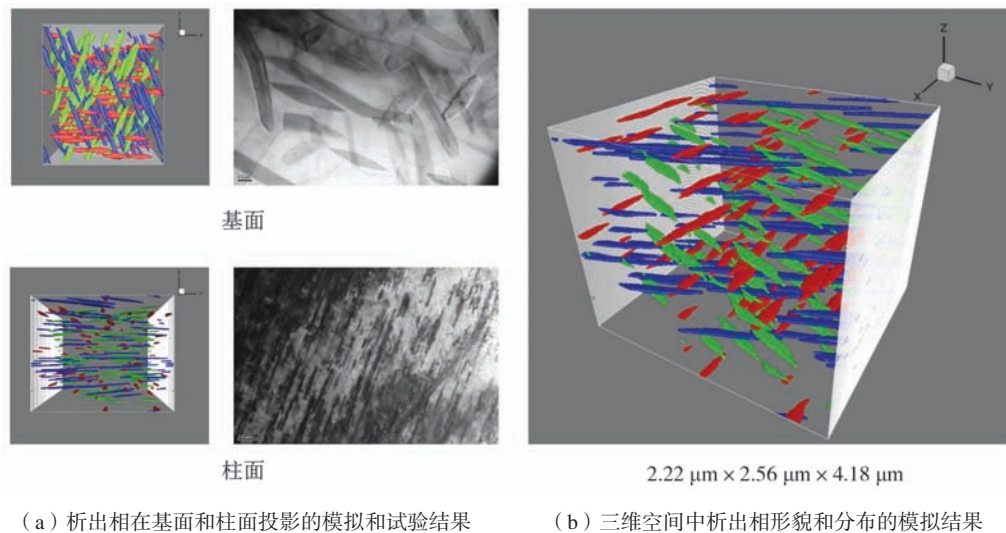


图10 Mg-Al合金时效析出相的相场建模研究

Fig. 10 Phase field modeling of the precipitation of Mg-Al alloy during aging process

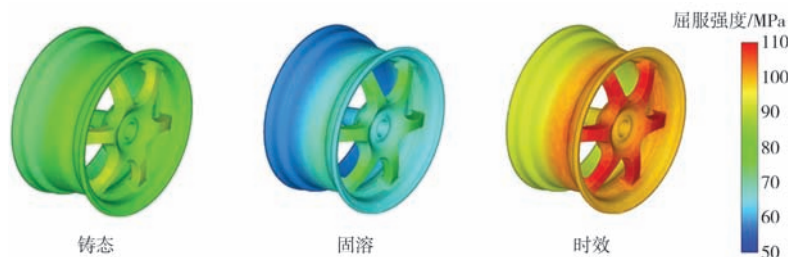


图11 基于解析模型的Mg-Al合金力学性能预测研究

Fig. 11 Mechanical property prediction for a Mg-Al alloy component based on analytic modeling

4 ICME的未来、挑战和建议

从ICME概念的提出到现在十几年过去了，从国内外整体情况来看，ICME还处于发展阶段。本文结合中国工程院咨询研究项目“集成计算材料工程在高端成形制造行业应用”的结论^[7]以及笔者的研究工作体会，分享一些粗浅的思考和认识：

(1) ICME理念和思想的科学性和先进性已经在学术界和工业界取得广泛共识，随着工业产品设计和制造不断向数字化和智能化方向发展，产品设计、工艺优化和材料开发的协同和融合会不断加深，ICME理念和方法论的优越性会越来越多地体现出来，其未来的发展前景是光明的。

(2) ICME的应用是一个长期的实践和探索的过程，从其应用的深度和广度上看还远未达到成熟的程度，ICME的应用在技术方面的挑战不是来源于ICME理念本身，其真正的难点在于相关的模型、软件和数据（库）的能力、水平和质量，因此推动ICME的应用不应该期待一蹴而就。

(3) 从技术供给侧的角度看，ICME相关材料模

型的能力、可靠性、以及数据的准确性和覆盖面还不能完全满足工业界实施ICME的需要，特别是在宏-微观耦合、组织模拟、基于组织的性能预测等方面还需要深入研究，材料数据等基础设施需要加强和完善。工业界实施ICME的积极性和信心非常依赖于技术供给侧所能提供的能力。

(4) 实施ICME应遵循“循序渐进、以点带面”的原则，建议面向重大工程、关键零部件、国防武器制造等领域，在一些制造难度大、标准要求高、附加值高、有代表性的关键零部件制造中率先实施ICME，解决关键零部件制造的技术瓶颈问题，产生示范效应，进而带动ICME在更大范围应用。

(5) 从长远发展来看，持续推动ICME的应用有利于提升国家制造业的创新能力和全球竞争能力，ICME的成功有赖于政府和工业界的持续资助、以目标为导向的跨机构团队协作、基于知识产权保护的共享机制、有效的国际交流与合作、以及在教育、研究、学科融合和人才培养方面的变革。

参考文献：

- [1] ALLISON J, BACKMAN D, CHRISTODOULOU L. Integrated computational materials engineering: a new paradigm for the global materials profession [J]. JOM, 2006, 58 (11): 25-27.
- [2] ALLISON J, LI M, WOLVERTON C, et al. Virtual aluminum castings: an industrial application of ICME [J]. JOM, 2006, 58 (11): 28-35.
- [3] BACKMAN D G, WEI D Y, WHITIS D D, et al. ICME at GE: Accelerating the insertion of new materials and processes [J]. JOM, 2006, 58 (11): 36-41.
- [4] LIU Z K, CHEN L Q, RAJAN K. Linking length scales via materials informatics [J]. JOM, 2006, 58 (11): 42-50.
- [5] Committee on integrated computational materials engineering, National research council. Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security [M]. Washington DC: The National Academies Press, 2008.
- [6] 史文方, 罗爱华, 埃瑞克·尼贝格, 等. 镁质车体前端结构研究与开发 [C]// 2007中国汽车摩托车用镁国际研讨会, 重庆, 2007.
- [7] 中国工程院. 中国工程院机械与运载学部咨询项目综合报告: 集成计算材料工程在高端成形制造行业应用 [R]. 2014.
- [8] 赵继成. 材料基因组计划简介 [J]. 自然杂志, 2014, 36 (2): 89-104.
- [9] LI M. ICME in automotive industry-linking design, manufacturing and materials [C]// Engineering Frontiers Symposium on Application of ICME in Advanced Materials Processing and Manufacturing Industries, Beijing, 2014.
- [10] American institute of aeronautics and astronautics. Integrated computational materials engineering (ICME): implementing ICME in the aerospace, automotive, and maritime industries [M]. USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), 2013.
- [11] WANG Q G, JONES P, WANG Y C, et al. Proceedings of the 1st world congress on integrated computational materials engineering (ICME): advances in computational tools for virtual casting of aluminum components [M]. USA: John Allison, Peter Collins, George Spanos, 2011.
- [12] LEE P D. Microstructure explicit, multiscale, through process modelling to predict component properties [C]// Tsinghua University Lecture, Beijing, 2007.
- [13] KERMANPUR A, TIN S, LEE P D, et al. Integrated modeling for the manufacture of aerospace discs: grain structure evolution [J]. JOM, 2004, 56 (3): 72-78.
- [14] KERMANPUR A, LEE P D, TIN S, et al. Integrated model for tracking defects through full manufacturing route of aerospace discs [J]. Materials Science and Technology, 2005, 21 (4): 437-444.
- [15] HIRSCH J, KARHAUSEN K F. History of ICME in the European aluminium industry [C]// Proceedings of the 1st World Congress on

- Integrated Computational Materials Engineering (ICME) . Hoboken, USA, 2011: 203–210.
- [16] ALLISON J E, COLLINS P, SPANOS G. Proceedings of the 1st world congress on integrated computational materials engineering (ICME) [M]. Seven Springs, PA, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2011.
- [17] LI M, Minerals. Proceedings of the 2nd world congress on integrated computational materials engineering (ICME) [M]. Metals Materials Society, 2013.
- [18] POOLE W, CHRISTENSEN S, KALIDINDI S, et al. Proceedings of the 3rd world congress on integrated computational materials engineering (ICME) [M]. USA: Springer link, 2015.
- [19] MASON P, FISHER C R, GLAMM R, et al. Proceedings of the 4th world congress on integrated computational materials engineering (ICME 2017) [M]. USA: Springer link, 2017.
- [20] JENSEN D J, LILLEODDEN E, BARNETT S, et al. Proceedings of the 5th world congress on integrated computational materials engineering (ICME 2019) [M]. The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2019.
- [21] JOOST W, COTE D, CLARKE K, et al. Proceedings of the 6th world congress on integrated computational materials engineering (icme 2022) [M]. The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2022.
- [22] WARD C, MURDOCH H, ANANTHANARAYANAN D, et al. Proceedings of the 7th world congress on integrated computational materials engineering (ICME 2023) [M]. The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2023.
- [23] POLLOCK T M. Historical perspectives and future prospects [C]// The 1st World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME), 2011.
- [24] ALLISON J. Integrated computational materials engineering: a perspective on progress and future steps [J]. JOM, 2011, 63 (4) : 15–18.
- [25] SCHAFRIK R E. ICME: Promise and future directions [C]// TMS2012: The 141st Annual Meeting and Exhibition, USA, 2012.
- [26] DONALD S. A case for ICME - Ti alloy design tool development at boeing [C]// 140th Annual Meeting and Exhibition. USA, 2011.
- [27] STEVENS K, WARD C. Air Force Adoption of ICME for materials and manufacturing R&D [C]// TMS2011: 140th Annual Meeting and Exhibition, USA, 2011.
- [28] BUCCI R, JAMES M, HEINIMANN M, et al. On the competitive and pre-competitive aspects of icme in new technology insertion-a material supplier perspective [C]// TMS2011: 140th Annual Meeting and Exhibition, USA, 2011.
- [29] GEORGE S, DAVID H. Modeling Across Scales: A roadmapping study for connecting materials models and simulations across length and time scales [M]. The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2015.
- [30] WARD C, BRINSON L C, GALLI G, et al. Building a materials data infrastructure: opening new pathways to discovery and innovation in science and engineering [M]. The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2017.
- [31] BOLCAVAGE A, BROWN P D, CEDOZ R, et al. Integrated computational materials engineering from a gas turbine engine perspective [J]. Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 2014, 3 (1) : 181–204.
- [32] WANG D, SHI R P, ZHENG Y F, et al. Integrated Computational Materials Engineering (ICME) approach to design of novel microstructures for Ti-alloys [J]. JOM, 2014, 66 (7) : 1287–1298.
- [33] THAPLIYAL S, KOMARASAMY M, SHUKLA S, et al. An integrated computational materials engineering-anchored closed-loop method for design of aluminum alloys for additive manufacturing [J]. Materialia, 2020, 9: 100574.
- [34] MILLER V M, AGNEW S R. Integrated computational materials engineering of magnesium [J]. JOM, 2018, 70 (10) : 2296–2297.
- [35] YI W W, ZHANG Y, LIAW P K. Editorial: data-driven integrated computational materials engineering for high-entropy materials [J]. Frontiers in materials, 2021, 8: 664829.
- [36] LUO A A. Material design and development: from classical thermodynamics to CALPHAD and ICME approaches [J]. Calphad, 2015, 50 (C) : 6–22.
- [37] YI W W, LI J, LIU W, et al. Integrated computational materials engineering for advanced materials: a brief review [J]. Computational Materials Science, 2019, 158 (C) : 42–48.
- [38] FURRER D. Development and industrial application of integrated computational materials engineering [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2023, 31 (7) : 73001.
- [39] DOGHRI I, LEMOINE G, MARTINY P, et al. Multiscale-based integrated computational materials engineering: from academia to industry [J]. International Journal for Multiscale Computational Engineering, 2021, 19 (4) : 1–40.
- [40] SADAYAPPAN K, SHI W F, NYBERG E A, et al. A Canada-China-USA collaborative research & development project “magnesium front end research and development” 2007 annual progress report [R]. Hangzhou, China: Project Technical Committee, 2008.
- [41] LUO A A, NYBERG E A, SADAYAPPAN K, et al. A Canada-China-USA collaborative research & development project “magnesium front end research and development” 2008 annual progress report [R]. Niagara-on-the-Lake, Canada: Project Technical Committee, 2009.
- [42] LUO A A, NYBERG E A, SADAYAPPAN K, et al. A Canada-China-USA collaborative research & development project “magnesium front end research and development” 2009 annual progress report [R]. Michigan, USA: Project Technical Committee, 2010.
- [43] SHI W F, LUO A A, SADAYAPPAN K, et al. A Canada-China-USA collaborative research & development project “magnesium front end

- research and development" 2010-2011 annual progress report [R]. Shanghai, China: Project Technical Committee, 2012.
- [44] 柳百成, 熊守美, 荆涛, 等. 先进成形制造技术及全流程建模与仿真发展趋势 [C]// 高端成形制造技术及多尺度全流程建模与仿真工程前沿研讨会, 北京, 2012.
- [45] 许庆彦. 熔模铸造过程数值模拟研究进展 [J]. 铸造, 2022, 71 (7): 803-813.
- [46] 崔振山. 集成计算材料工程在高端塑性成形领域的应用基础与发展思路探讨 [C]// 集成计算材料工程在高端成形制造行业应用工程前沿研讨会, 北京, 2014.
- [47] 顾剑锋. 集成计算材料工程在热处理行业的应用 [C]// 集成计算材料工程在高端成形制造行业应用工程前沿研讨会, 北京, 2014.
- [48] 王华明. 高性能大型复杂金属构件激光直接制造技术进展及若干科学问题 [C]// 高端成形制造技术及多尺度全流程建模与仿真工程前沿研讨会, 北京, 2012.
- [49] 林鑫, 黄卫东. 金属增材制造过程的数值模拟 [C]// 集成计算材料工程在高端成形制造行业应用工程前沿研讨会, 北京, 2014.
- [50] 杨合. 高性能轻量化构件精确成形一体化全过程多尺度建模与仿真 [C]// 高端成形制造技术及多尺度全流程建模与仿真工程前沿研讨会, 北京, 2012.
- [51] 李殿中. 大型钢锭的凝固模拟与实验验证 [C]// 高端成形制造技术及多尺度全流程建模与仿真工程前沿研讨会, 北京, 2012.
- [52] 周建新. 铸造计算机模拟仿真技术现状及发展趋势 [J]. 铸造, 2012, 61 (10): 1105-1115.
- [53] 郭建政, 李萌葵. 制造业中的模拟仿真—集成计算材料工程及其应用 [C]// 集成计算材料工程在高端成形制造行业应用工程前沿研讨会, 北京, 2014.
- [54] 杜勇, 彭英彪, 张伟彬, 等. 硬质合金和耐磨涂层的热力学数据库及集成计算材料工程 [C]// 中国化学会第十七届全国化学热力学和热分析学术会议, 杭州, 2014.
- [55] 张伟彬, 杜勇, 彭英彪, 等. 研发硬质合金的集成计算材料工程 [J]. 材料科学与工艺, 2016, 24 (2): 1-28.
- [56] 杜勇, 李凯, 赵丕植, 等. 研发铝合金的集成计算材料工程 [J]. 航空材料学报, 2017, 37 (1): 1-17.
- [57] 李波, 杜勇, 邱联昌, 等. 浅谈集成计算材料工程和材料基因工程: 思想及实践 [J]. 中国材料进展, 2018, 37 (7): 506-525.
- [58] LIU B C. Collected presentations of the high-level international symposium on cutting-edge technology of digital design and manufacturing [C]// High-level International Symposium on Cutting-edge Technology of Digital Design and Manufacturing, Beijing, 2011.
- [59] LIU B C. Collected presentations of the engineering frontiers symposium on advanced materials processing technology and through process modeling & simulation [C]// Engineering frontiers symposium on advanced materials processing technology and through process modeling & simulation, Beijing, 2012.
- [60] LIU B C. Collected presentations of the engineering frontiers symposium on application of icme in advanced materials processing and manufacturing industries [C]// Engineering Frontiers Symposium on Application of ICME in Advanced Materials Processing and Manufacturing Industries, Beijing, 2014.
- [61] 霍亮, 韩志强, 柳百成. 基于两套网格的CA方法模拟铸造镁合金凝固过程枝晶形貌演化 [J]. 金属学报, 2009, 45 (12): 1414-1420.
- [62] LIU B C, XU Q, JING T, et al. Advances in multi-scale modeling of solidification and casting processes [J]. JOM, 2011, 63: 19-25.
- [63] HUO L, HAN Z Q, LIU B C. Three-dimensional modeling and simulation of dendrite morphology of cast Mg alloys [J]. Materials Science Forum, 2010, 654: 1516-1519.
- [64] HUO L, HAN Z Q, LIU B C. Modeling and simulation of microstructure evolution of cast Mg alloy [J]. Materials Science Forum, 2010, 638: 1562-1568.
- [65] WANG X Y, WANG F F, WU K Y, et al. Experimental study and cellular automaton simulation on solidification microstructure of Mg-Gd-Y-Zr alloy [J]. Rare Metals, 2021, 40: 128-136.
- [66] KIM S G. A phase-field model with antitrapping current for multicomponent alloys with arbitrary thermodynamic properties [J]. Acta Materialia, 2007, 55 (13): 4391-4399.
- [67] SHANG S, HAN Z Q, SUN W, et al. A phase field model coupled with pressure-effect-embedded thermodynamic modeling for describing microstructure and microsegregation in pressurized solidification of a ternary magnesium alloy [J]. Computational Materials Science, 2017, 136: 264-270.
- [68] SHANG S, HAN Z Q, LUO A A. Phase-field modelling on effect of pressure on growth kinetics of Mg-Al-Sn alloy [J]. Materials Science and Technology, 2018, 34 (11): 1362-1369.
- [69] ZHAO X T, LIU J H, SHANG S, et al. Characterization on the three-dimensional morphology and microstructure of eutectics in as-cast Mg-Gd-Y-Zr alloys by using X-ray tomography technique [J]. Materials Characterization, 2019, 158: 109933.
- [70] LIU J H, LI S X, ZHANG N, et al. Study on the evolution of the microstructure, phase composition, three-dimensional morphology, and hardness in the solution treatment of Mg-7.80Gd-2.43Y-0.38Zr alloy [J]. Materials Science and Engineering Technology, 2021, 52 (8): 847-859.
- [71] HAN G M, HAN Z Q, Luo A A, et al. Microstructure characteristics and effect of aging process on the mechanical properties of squeeze-cast AZ91 alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 641: 56-63.

- [72] HAN G M, HAN Z Q, LUO A A, et al. A phase field model for simulating the precipitation of multi-variant β -Mg₁₇Al₁₂ in Mg-Al-based alloys [J]. Scripta Materialia, 2013, 68 (9): 691–694.
- [73] HAN Z Q, HAN G M, LUO A A, et al. Large-scale three-dimensional phase-field simulation of multi-variant β -Mg₁₇Al₁₂ in Mg-Al-based alloys [J]. Computational Materials Science, 2015, 101: 248–254.
- [74] HAN G M, HAN Z Q, LUO A A, et al. Three-dimensional phase-field simulation and experimental validation of β -Mg₁₇Al₁₂ phase precipitation in Mg-Al-based alloys [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2015, 46: 948–962.
- [75] 韩国民, 韩志强, 霍亮, 等. 考虑固溶及时效处理的镁合金铸件微观组织模拟及力学性能预测 [J]. 金属学报, 2012, 48 (3): 363–370.
- [76] ZHANG N, ZHENG X L, MA J L, et al. An efficient analytical model for predicting the microstructure characteristic parameters of the as-cast and solid-solution treated Mg-Gd-Y-Zr cast alloys [J]. Materials Today Communications, 2023, 35: 105560.
- [77] ZHANG N, MA J L, ZHENG X L, et al. Modeling the precipitation kinetics and yield strength of Mg-Gd-Y-Zr alloys based on an improved kampmann-wagner numerical model and modified orowan strengthening [J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11665-023-08877-3>.

Integrated Computational Materials Engineering (ICME) and Its Application to Casting and Heat Treatment of Magnesium Alloys

HAN Zhi-qiang

(School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract:

Integrated computational materials engineering (ICME), a new paradigm for the global materials profession, is defined as the integration of materials information, captured in computational tools, with engineering product performance analysis and manufacturing process simulation. Since the introduction of the ICME concept, more than a decade has passed and during this period remarkable progress has been made in implementing ICME in aerospace, automotive and maritime industries. This paper provided a comprehensive review on this progress as well as an introduction of the efforts made in the author's research group to construct an ICME framework for the casting and heat treatment of magnesium alloy, including cellular automaton (CA) and phase field (PF) modeling of the growth of the primary dendrites, X-ray tomographic characterization of the eutectics and secondary phase, PF modeling of the precipitation during aging process, and an analytical model that can be used to predict the grain size and volume fraction of the secondary phase in as-cast microstructure as well as the number density, size, volume fraction of the precipitates in the aged alloy. At the end of this paper, the future prospects and suggestions for promoting the application of ICME are proposed.

Key words:

integrated computational materials engineering; magnesium alloy; casting; heat treatment; modeling and simulation