论坛二十三：先进材料数字化研发论坛
分论坛主席：谢建新 苏航 鲁晓刚 宿彦京 徐伟

23-01

大型轴承弹性变形升温数值仿真计算

平韶波
安泰环境工程技术有限公司

以高铁轴箱轴承为代表的大型工程轴承要求极为严苛，制造难度极高。高速动车组时速200 公里至 350 公里要求轴承精度达到 P5 级、极限转 2600 r/min，使用寿命 290 万公里，100 万公里可靠度达到 99%。长期的超高负载下，轴承升温是重要的安全控制参数，在服役中被严密监测，一旦轴承温度超过 100 ℃，列车就需要降速运行。高铁轴承升温的原因包括多种原因，机理并不完全清晰。本项目针对高铁轴承在交变应力下的弹性变形热效应进行数值仿真分析，并考察滚子圆度偏差对升温的影响，以确认材料弹性变形热效应是否是轴承升温的主要因素之一。

本项目通过大量的数值仿真模拟数据对比分析发现：摩擦是引起轴承运行过程中升温的主要原因；轴承因交变应力带来的弹性应变会产生一定的发热功率，但数值比较小，对轴承的温度影响不明显；滚子椭圆度对于轴承升温的影响主要与轴承的转速有关，轴承转速较低时，滚子椭圆度的影响较小，反之，当转速较高时，其影响较大。滚子椭圆度的影响趋势是，当轴承转速一定时，随着滚子椭圆度的增大，轴承的最高温度会发生下降的趋势。最后模拟结果表明：轴承在正常工况下的总发热功率中，由摩擦产生的发热功率占比为 99.997% ~ 99.999%，由弹性应变产生的发热功率占比为 0.001%～0.003%；轴承在正常工况下的总温升中，由弹性应变产生的轴承温升贡献比例为 0.001%，由摩擦产生的轴承温升贡献比例为 99.999%。说明轴承在工作中温升的主要原因是由摩擦造成的，虽然弹性应变也会使轴承升温，但占比非常小。

关键词：轴承升温；数值仿真；椭圆度；摩擦和弹性应变；云纹图

23-02

基于深度学习和专家知识的材料图谱识别

王炫东 1,2, 苏航 1*, 李南 3, 孟惠民 2
1. 中国钢研科技集团有限公司，数字化研发中心，北京，100081
2. 北京科技大学，新材料技术研究院，北京，100083
3. 钢铁研究总院，中心实验室，北京，100081

钢铁材料金相组织复杂，种类繁多，通常由实验人员或专家进行观察与分析，但效率有限，同时难以做到定量化统计。近年来，基于卷积神经网络的深度学习方法凭借其独特的特征提取能力，在图像识别、语义分割等方向取得了许多进展，为材料的图谱识别提供了新的有力工具。本工作结合深度学习与图像处理方法，利用专家知识为组织纹理赋予语义并辅助判断识别结果。以钢铁材料金相图谱为例，提出了一种针对不同类型组织的识别与统计方法。首先，通过图像预处理方法对输入图像进行亮度均匀化与对比度调整，随后读取图像右下角标尺以确定放大倍数并建立像素与真实长度的换算关系。之后，通过组织类型判断模型确定组织类型，通过组织分割模型进行语义分割。最后，通过后处理与专家知识判断完善识别结果，并输出该图像的组织类型、各类组织占比、晶粒度等信息。其中，组织类型判断模型采用图像分类深度学习模型，使用多种类金相组织进行有监督训练；组织分割模型采用语义分割模型，对图像中每个像素点给予类别，对于不同类型的组织信息具有不同的标记与模型训

练方法：针对晶界，采用手动标记-训练模型的常规方法；针对第二相，采用“目标检测+分割”的实例分割方法；针对图谱中的材料组织，主要聚焦于不同组织类型具有的独特纹理特征，利用专家知识对不同组织纹理赋予语义，采用构建组织纹理库并生成仿真数据集的方式训练模型。通过对各组织类型的不同处理方法，在保持模型高准确率的同时大大减少手动标记的工作量。

关键字：深度学习，专家知识，图像处理，组织识别，组织分割

23-03

梯度晶粒结构裂纹扩展的晶体塑性有限元模拟

熊宇凯 a, 张旭 a,*

a 西南交通大学力学与航空航天学院

梯度晶粒结构具有优异的强韧性协调能力，有关梯度晶粒结构的研究往往关注其塑性机制还未阐明其优异韧性行为的内在机理。本工作采用位错机制晶体塑性本构模型同时耦合损伤相场法探究梯度结构强韧性协调机制。在晶体塑性模型中考虑了晶粒尺寸导致的 Hall-petch 效应以及背应力强化；在损伤相场模型中将累积的塑性功作为裂纹扩展的驱动力并采用能量判定准则。我们使用此模型探究了梯度晶粒的裂纹扩展模式以及梯度碳化物对裂纹扩展的影响，后续还研究了在周期载荷下的损伤演化规律。研究结果表明对于单轴拉伸工况，裂纹易从细晶区萌生并往粗晶区扩展，粗晶可以钝化裂纹阻碍裂纹扩展提升材料韧性；而对于应力控制循环，损伤易从粗晶区萌生。在裂纹扩展路径上的碳化物对裂纹有一定的阻碍作用，但碳化物的引入会使损伤提前萌生。本研究有助于理解梯度结构强韧性协调机制，为其安全服役提供理论基础。

23-04

基于 Sysweld 的金刚石锯片激光焊接工艺的数值模拟

Xu Qiang1，Liu Yi-bo1,2 ，He du-peng3

1Central Iron & Research Institute Group,Beijing 100081, China

2Beijing Gang Yan Diamond Products Company,Beijing 102200,China

3Digital R & D Center of China Steel Research & Technology Group Co., LTD., Beijing: 100081

对于激光焊接金刚石工具而言，激光焊接过渡层开发技术和焊接技术是制作激光焊接锯片的关键技术。通过 Sysweld 软件模拟，经过热源校核后，计算出的熔池形貌和实际的基本一致，吻合度很高；通过有限元方法建立了激光焊接的温度场、相变及晶粒相貌、应力场及疲劳性能的跨尺度多场耦合计算模型，实现了材料计算、工艺模拟及服役仿真的全生命周期评价；通过综合分析最终获得最优的焊接工艺参数，通过微观组织到宏观性能的跨尺度的分析，可以得出：当激光焊接速度在 26mm/s，焊接功率在 1700W 时，焊缝处应力最小，DVC 值最小，焊缝的抗疲劳性能最好，同时焊缝处晶粒尺寸越细小，晶粒取向偏差也越小，通过实际焊接的扳齿强度对比，也验证了 1700W 焊接是扳齿强度最高，和仿真模拟的结果相吻合。

关键字：金刚石工具, 激光焊接，温度场，应力场，晶粒行貌，疲劳性能

Numerical simulation of laser welding process for diamond saw blades based on Sysweld

Qing Xu1，Yibo Liu1,2 ，dupeng He3

1Central Iron & Research Institute Group,Beijing 100081, China

2Beijing Gang Yan Diamond Products Company,Beijing 102200,China

3Digital R & D Center of China Steel Research & Technology Group Co., LTD., Beijing: 100081

Corresponding authors (553143982@qq.com for Q.X ;liuyibo@gangyan-diamond.com for Y.L.)

For laser welding diamond tools, the laser welding transition layer develop ment technology and welding technology are the key technologies for the production of laser welding saw blades. Through the Sysweld software simulation, after the heat source check, the calculated shape of the molten pool is basically consistent with the actual one , with a high degree of agreement; the cross-scale multi-field coupling calc ulation model of the temperature field, phase transformation and grain morphology,st ress field and fatigue performance of laser welding was established by the finite elem ent method, and the material calculation, process simulation and service simulation w ere realized. Full life cycle evaluation; through comprehensive analysis, the optimal welding process parameters are finally obtained. Through the cross-scale analysis fro m microstructure to macroscopic performance, it can be concluded that when the laser welding speed is 26mm/s and the welding power is 1700W, the weld At the same time, the smaller the grain size at the weld, the smaller the grain orientation deviation.Throu gh the comparison of the actual welding pull tooth strength, it is also verified that 170 0W welding is The pull tooth has the highest strength, which is consistent with the si mulation results.

Keywords: Diamond tools, laser welding, temperature field, stress field, grain morphology, fatigue performance

23-05

材料和工艺设计多尺度仿真方法及应用

杨丽 1,2，苏航 1，刘和平 1，侯雅青 1，孙旭 1，贺笃鹏 1
中国钢研科技集团有限公司，北京，邮编：100081
南京钢铁股份有限公司，南京，邮编：211500

近年来，随着材料基因工程、材料集成计算等技术的发展，多尺度仿真计算方法被越来越广泛地运用到材料的研发和工业生产中，为材料和工艺的设计提供技术支撑。

在纳观尺度，第一性原理计算基于量子力学理论，可以计算材料结构、能量、基础性能等；分子动力学基于牛顿力学理论，可模拟分子、原子体系的运动。在微观尺度，材料热动力学计算基于热力学原理，可计算材料的相变信息，计算元素扩散过程；相场法用于材料微观组织演变模拟，可以还原凝固树枝晶生长、奥氏体-铁素体固态相变、晶粒长大和再结晶过程。在宏观尺度，计算流体用于分析工艺过程的流场分布情况；宏观有限元主要用于结构力学、热传递、疲劳、裂纹扩展等场景。

通过将纳观、微观、宏观等多尺度的仿真方法结合起来，可更好地分析和预测材料在生产和服役过程中的晶体结构、微观组织、基础性能，从而指导材料和工艺的正向设计。晶体相场法融合了密度泛函与相场理论的理念，可应用于分析纳观尺度的团簇、缺陷、有序-无序、形核长大等演变过程；将第一性原理计算与有限元计算相结合，可计算金属材料氢致裂纹扩展等过程；将热动力学计算、相场模拟和有限元相结合，可模拟钢铁材料在加工及服役过程中的温度场-应力场-组织场分布和演变情况。

中国钢研建立了面向行业级的金属材料数字化研发平台 Material-DLab。通过该平台的多尺度公网云计算技术，为行业用户提供 10 余款国产化多尺度仿真软件在线使用、计算的机会，致力于推动国产化材料和工艺设计多尺度仿真软件在行业的应用，助力软件服务模式从 License 向 Service 的转变。此外，通过开发和上线典型应用场景的材料 APP，为用户提供了材料和工艺设计各种应用场景的计算案例，包括材料设计、材料加工、结构力学、服役腐蚀等，极大地降低了国产化软件的使用门槛。

23-06

基于原位合金化技术高通量制备 FeCrNi 合金体系：微观组织演化与性能筛选

张浩 1,3，侯雅青 1，王炫东 2，何亚洲 2，李发发 1，苏航 1*
1 中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心，北京 100081；
2 钢铁研究总院，北京 100081；
3 安泰科技股份有限公司，北京 100081；

采用自研的高通量制备平台开展了 FeCrNi 合金体系的组织与性能研究，以纯 Fe、Cr 和 Ni 元素粉末作为原料，基于自动混粉和激光粉末床熔融技术一次性原位合成了 80 种 FeCrNi 合金块体，Cr 含量为 2%~20%，Ni 含量为 0%~7%（质量百分比）。随着合金成分的增加，样品的物相结构由 BCC 单相逐渐转变为 BCC+FCC 双相结构；微观结构从等轴转变为柱状/针状（马氏体）晶粒；显微硬度逐渐升高并收敛。其中 12Cr6Ni 样品由超细晶组成，显微硬度高达 319HV，抗拉强度 924MPa，屈服强度 884MPa 和延伸率 17%。分析了四种典型微观结构的形成过程：2Cr0Ni-等轴晶，12Cr0Ni-柱状晶，12Cr6Ni-超细等轴晶，20Cr7Ni-针状晶（马氏体）。通过相图分析发现了等轴晶与 FCC-BCC 相变的密切关系。

关键词：高通量制备；激光粉末床熔融；增材制造；等轴晶-柱状晶转变；FeCrNi 合金

23-07

基于高通量实验的金属材料腐蚀行为研究

宋有朋 1，颜鲁春 2，庞晓露 2，宿彦京 3，乔利杰 3，高克玮 2
中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心，北京，100081
北京科技大学材料材料科学与工程学院，北京，100083
北京科技大学新材料技术研究院，北京，100083

材料腐蚀问题广泛存在于经济社会建设的各个领域。近年来，随着高新科技和高端装备的发展，材料的应用环境愈发严酷，对高性能材料的需求越来越高，亟需开发出性能优异的耐蚀材料。然而，以试错为特征的传统材料研究方法存在耗时长、成本高、效率低等问题，严重制约了新材料的研发速度。特别是对于多组元合金，其广阔的成分空间为耐蚀材料的开发构成了巨大挑战。近年来，作为“材料基因组技术”三大组成要素之一的高通量实验在加速新材料研发和应用进程方面展现出巨大的潜力。然而，鉴于材料腐蚀问题的复杂性，现有高通量实验技术在材料腐蚀行为研究过程中存在一定的局限性。

针对上述问题，我们开发了一种高通量制备多组元均匀合金材料库的新策略，并设计了可一次性制备 97 种合金成分的多工位同步旋转样品台，成功解决了常用磁控共溅射技术所制备合金材料库中所存在的元素分布不均匀问题，从而突破了传统高通量制备技术在腐蚀行为研究中的局限性。通过所开发的高通量实验技术揭示了 Fe100-x-yCrxNiy 和 AlxCuy(FeCrNiCo)100-x-y 合金体系在常见服役环境中的腐蚀行为，从而在广阔的成分范围内快速建立了合金成分与耐蚀性之间的关系。进一步，分析了典型合金成分的力学性能，从而实现了耐蚀性和力学性能的协同设计，获得了综合性能优异的合金，为极端服役环境提供了高性能材料储备。

参考文献

Y.P. Song, L.J. Qiao, K.W. Gao et al., Corrosion Science, 2022, 196: 110028.
Y.P. Song, L.J. Qiao, K.W. Gao et al., Corrosion Science, 2023, 213: 110983.

23-08

点缺陷在 Cr2O3/Fe2O3 界面氢损伤的作用

米志杉
中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心，北京 100081

不锈钢在生产生活中应用广泛，主要是因为其表面形成的致密的钝化膜结构。但是，不

锈钢中的氢会影响钝化膜的组成和结构，进一步会影响不锈钢的抗腐蚀能力。因此，研究氢对不锈钢钝化膜的影响，对于理解氢损伤机理具有重要意义。不锈钢钝化膜为外层富铁，内层富铬的氧化物结构。对此建立了不锈钢钝化膜的简化模型，Cr2O3/Fe2O3 界面结构，利用第一性原理密度泛函理论 LDA+U 方法研究了 Cr2O3/Fe2O3 界面处不同类型的点缺陷（主要是空位缺陷和合金元素）与 H 原子的相互作用，厘清了这些点缺陷在界面处结合 H 原子的规律和机理。我们研究发现在没有其他缺陷存在时，钝化膜内部的 Cr2O3/Fe2O3 界面很难结合 H 原子；当界面处存在 Cr 空位、Fe 空位以及合金元素 Zn、Ni 和 Cu 时，H 结合能为负值，范围在－1.3 eV 至－2.9 eV，此时 H 原子很容易与界面结合，这些点缺陷容易导致钝化膜界面发生氢损伤；当界面处存在合金元素 Mn，Mo，Ti，Al 和 V 时，H 的结合能为正，说明此时 H 不容易存在于界面处，这些点缺陷会减少钝化膜界面发生氢损伤的可能性。我们的研究结果对选择合适的合金元素获得钝化膜具有低氢脆敏感性的耐蚀不锈钢具有指导意义。

关键字：钝化膜；氢损伤；点缺陷；密度泛函理论；合金元素

23-09

风电用钢立式大圆坯连铸工艺的磁-流-热多场耦合数值模拟及其优化

刘和平 1,2 *，王忠英 2，仇灏 1,2

1. 中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心

2. 钢铁研究总院

大规格风电用钢对连铸坯质量的可靠性和稳定性要求极为苛刻，采用多段电磁搅拌技术是生产高品质洁净钢和无缺陷铸坯的关键。传统的实验室或工业现场研究方法难以再现连铸高温钢水中的磁流体行为及其凝固现象。基于磁感应方程，首次开发了多段电磁搅拌作用下钢水的流体流动、传热和凝固的多场耦合计算模型，研究了结晶器和铸坯二冷电磁搅拌（M-EMS 和 S-EMS）下风电用 42CrMo 钢 ø600mm 圆坯立式连铸过程中的凝固过程及其搅拌参数优化方法。分析了有无电磁搅拌时，应用四孔浸入式水口（SEN）下连铸结晶器中的流场及凝固特点，并与采用单孔水口时的情况进行了比较。讨论了不同电磁搅拌参数和二冷电磁搅拌器位置对钢水流动、传热和凝固的影响，提出了确定最佳电磁搅拌参数的方法。结果表明：采用四孔 SEN 时，应用结晶器电磁搅拌 M-EMS 可以减小四孔 SEN 的侧孔射流冲击强度，并迅速耗散钢水过热，降低结晶器液相分率。尽管结晶器坯壳存在非均匀生长，但应用四孔 SEN 和 M-EMS 获得的涡流速度以及 S-EMS 得到的固相分率高于具有相同搅拌强度的单孔 SEN，这有利于等轴晶的形成。对于 S-EMS，在相同搅拌强度下，凝固壳厚度是决定搅拌位置和钢水切向速度的主要因素。针对不同浸入式水口生产风电用钢，有必要对 M-EMS 和 S-EMS 的搅拌参数进行具体的优化。目前的研究有助于更好地洞察在多段旋转电磁搅拌作用下，不同浸入式水口结构下圆坯连铸过程中的流动、传热和凝固行为，实现不同水口结构、电磁搅拌参数与连铸工艺参数之间的匹配优化。

关键字：大圆坯连铸 多段电磁搅拌 数值模拟 流动传热 凝固

23-10

基于“等效减量”原则的贵金属高温合金集成计算设计与实验验证

种晓宇 1，*，魏燕 3，高兴誉 2，张爱敏 3，陈力 3，宋海峰 2，冯晶 1

昆明理工大学材料科学与工程学院，昆明 650233

北京应用物理与计算数学研究所，北京 100094

昆明贵金属研究所，昆明 650000

通讯作者邮箱：chongxiaoyu007@163.com;

针对现阶段姿态控制发动机喷管用 Pt 基高温合金强度低、成本高的问题，基于传统 Ni 基高温合金的强化机理，采用自主研发的高通量多尺度集成计算平台，从服役性能需求出发，进行材料生成-制造成形-构件性能全流程并行式设计，旨在获取保持性能指标的同时大幅度降低原料成本的合金成分、工艺窗口。首先，系统评估合金元素对 γ / γ '相热力学性质的影响，并将结果作为 AutoCalphad 软件的输入，采用马可夫链蒙卡算法同时对多个热力学参数进行自动优化，获取变组分多相热力学模型。其次，通过高通量第一性原理计算耦合相图热力学模型，获取多元合金成分依赖的弹性模量、扩散系数和堆垛层错能，并对不同氧分压和温度下的氧化反应热力学平衡常数进行预测，评估合金的抗蠕变和抗氧化性能，基于优化得到的 γ / γ '两相共格 Pt 基超高温合金配方，考虑试样结构进行服役行为预测，缩短研发周期，节约研发成本，形成贵金属高温合金研发范式。

关键词： Pt 基超高温合金；集成计算；热力学模型；抗蠕变；抗氧化；服役行为预测；

23-11

CrI3/In2Se3 异质结中本征电场调控磁耦合的理论研究

成海霞 a

a 中国钢研科技集团有限公司，数字化研发中心，北京，100081

自旋电子器件采用电子自旋作为信息载体可实现低功耗、高速度的信息处理、传输及存储，被广泛应用于半导体器件、电子信息及生物医疗领域。自旋电子器件的核心是操控和探测自旋自由度，传统的方法利用外磁场或外电场操控，然而所需磁场较大且不易操控，外电场虽可控，但具有易失性。若能利用材料本征电场，则有望获得非易失性电场控制的稳定磁状态。本工作基于第一性原理计算方法，设计了一个由双层 CrI3 磁性半导体和单层α-In2Se3 铁电衬底垂直堆垛组成的二维范德华(vdW)多铁异质界面结构。经研究表明，通过翻转 In2Se3 的铁电极化方向可导致双层 CrI3 层间磁性由反铁磁耦合变为铁磁耦合。该层间磁耦合调控主要来源于 In2Se3 铁电场调控的双层 CrI3 层间最近邻 I 原子的直接相互作用，进而实现电场控制层间磁相变。该研究结果展示了通过人工堆叠不同二维 vdW 层可获得多功能材料，为实现原子级厚度的 vdW 铁磁体的非易失性电场控制磁性提供了一种有效的方法。

关键词： 二维范德华异质结；第一性原理计算；多铁材料；磁电调控

[1] **Hai-Xia Cheng**, Jun Zhou, Cong Wang, Yan-Ning Zhang* and Wei Ji*, “Nonvolatile electric field control of magnetism in bilayer CrI_3 on monolayer In_2Se_3”, *Physical Review B*, 104,064443, (2021).

23-12

表面 Al2O3 改性提升 Cu-SSZ-13 抗水热老化能力的机制

程嵩琦

中国钢研数字化研发中心

本论文采用第一性原理计算方法，对 Cu-SSZ-13 分子筛表面 Al2O3 改性后水热稳定性提高的机制进行了探究。

氮氧化物（NOx）污染主要由化石燃料的燃烧产生，氨法选择性催化还原脱硝（NH3-SCR）是柴油车尾气 NOx 后处理的主流技术。Cu-SSZ-13 分子筛作为一种先进的 SCR 催化剂，活性高、抗中毒能力强，已经投入了工业化应用，但仍面临水热老化降低使用寿命的挑战。在水热老化后，孤立态铜离子的数量减少，即 SCR 活性位点减少，并且会形成团聚态 CuO，导致还原剂 NH3 的过度消耗和非选择性氧化，不利于 SCR。

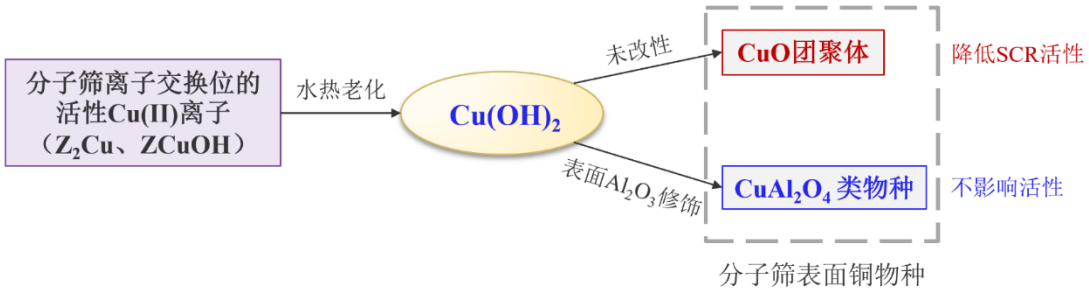
实验采用 CLD 方法在 Cu-SSZ-13 的外表面上涂覆了一层薄的 Al2O3 改性层，测得改性分子筛在高温水热老化后的 SCR 活性相比对照组显著改善。物相表征显示 Cu 元素与 Al 具有相近的分布。铜铝酸盐（CuAl2O4、CuAlO2）在改性分子筛中形成，且铜铝酸盐的 NH3 氧化活性低，不会影响 SCR 活性。

计算模型从表面亲和性入手，通过改性前后主体铜衍生物的不同来解释 Cu-SSZ-13 抗水热老化性能提高的机制。已有研究中，Cu(OH)2 被认为是水热老化发生脱铜之后、各类铜衍生物形成之前的可扩散中间体。当 Cu(OH)2 附着 CuO 颗粒表面时，会使 CuO 团聚体长

大；而当 Cu(OH)2 被骨架外 Al 物种（EFAl）捕获时，将转变为铜铝酸盐。相应地，我们设计和优化了将 Cu(OH)2 分子整体吸附在 CuO (111)、γ-Al2O3 (100)、γ-Al2O3 (001)、CuAl2O4 (100) 和 CuAl2O4 (110)这些稳定易暴露表面上的吸附模型，作为对上述情况的简化模拟。吸附的 Cu(OH)2 与表面原子新形成的键的键长（1.7~2.3 Å）与 CuO、Al2O3 或 CuAl2O4 体相中典型的 Cu-O 或 Al-O 键的键长（1.7~1.9 Å）相似或略长。进而计算吸附能和键合强度来比较各表面对 Cu(OH)2 亲和性的强弱。吸附质和表面原子之间的键合强度用-ICOHP（晶体轨道哈密顿布居 COHP 在费米能级以下积分的相反数）来量化，数值上大致与键能成正比。吸附能计算所得的结果均大于 1.5 eV，比物理吸附的吸附能高 1~2 个数量级，表明这些吸附过程属于化学吸附，伴随着电荷转移和新键的形成。Cu(OH)2 在 γ-Al2O3 和 CuAl2O4 表面的吸附能(约 2.2~4.1 eV)明显高于在 CuO 表面的吸附能(1.8 eV)，表明 Cu(OH)2 吸附在 Al2O3 和 CuAl2O4 表面相比 CuO 表面是一个热力学上更有利的过程。键能计算结果中，与 CuO 表面的 Cua-Os 键相比，含 Al 表面的 Cua-Os 键只是略强，而 Oa-Als1 和 Ob-Als2 键（Cu(OH)2 的 O 原子与表面 Al 原子）明显强于 Oa-Cus1 键和 Ob-Cus2 键（Cu(OH)2 的 O 原子与 CuO 表面 Cu 原子）。吸附质的 O 与吸附基底 Al 的高强度结合应当是 Cu(OH)2 在 Al2O3 和 CuAl2O4 表面吸附能显著较高的主要原因。

含铝表面对 Cu(OH)2 更高的吸附能和键合强度，揭示了 Cu(OH)2 与 Al2O3、CuAl2O4 具有更高的亲和性。水热条件下 Cu-SSZ-13 活性位的 ZCuOH 以 Cu(OH)2 的形式从离子交换中心分离出来，其后续衍生物因为表面 Al2O3 改性而与未改性时发生了变化。在未改性的 Cu-SSZ-13 中，主要形成类 CuO 物种，CuO 团聚体会导致 NH3 过度氧化。但经过 Al2O3 修饰后，因为 Al2O3 与 Cu(OH)2 的亲和性明显比 CuO 更高，Al2O3 会优先与 Cu(OH)2 结合，生成对 SCR 惰性的 CuAl2O4，且 CuAl2O4 依然对 Cu(OH)2 具有高亲和性，依旧优先与 Cu(OH)2 结合。Cu(OH)2 中间体被表面富 Al 层捕获，这种竞争吸附大幅抑制了对 SCR 有害的 CuO 团聚体的长大积累，因此 Al2O3 改性 Cu-SSZ-13 的高温 SCR 性能在水热老化后得到保持，也就是水热稳定性得到了提高。

关键词：第一性原理；分子筛；选择性催化还原；水热老化；表面吸附



23-13

基于晶体塑性理论的深度学习方法与应力应变行为预测

王晨充

东北大学 轧制技术及连轧自动化国家重点实验室，沈阳，110819，中国

严苛的服役环境导致工程上对先进金属结构材料力学性能的要求更加复杂，包括高强度、高塑性和良好的加工硬化行为在内的基本力学性能始终是满足工程需求的最关键条件。如何准确且高效率地预测金属结构材料的力学行为是一个长期存在的问题。为了准确地反映晶体的微观组织-性能关系，需要对晶体塑性本构方程进行复杂的修正，并在不同成分或工艺条件下重新测量本构参数，这极大地限制了模型的建模效率和推广应用能力。建立成分-组织-性能关系是材料，特别是具有复杂组织的金属结构合金逆向设计和工艺优化的基础。本研究开发了一种将传统晶体塑性（CP）理论与机器学习相结合的新方法。首先建立了考虑双相钢的真实织构和碳含量对力学性能影响的晶体塑性有限元模型，模拟了不同工艺和不同成分的双相钢在单轴拉伸过程中的应力-应变行为，获得了双相钢组织在不同应力载荷下局部应力和应变分布云图。将晶体塑性模拟获得的应力分布云图和对应的应变值作为数据集，训练卷

积神经网络(CNN)模型，采用训练好的 CNN 模型预测不同体系双相钢在载荷作用下的应力-应变响应。结果表明，仅采用晶体塑性模型预测真应力的误差多数分布在 0-80MPa 之间，只有少量数据偏差较大在 80-100MPa 之间。这说明特定的晶体模型适用于相应工艺和成分的双相钢组织，当体系发生变化时实际材料性能会发生变化，晶体模型不能准确预测材料的力学行。CP-CNN 模型预测真应力误差分布相比于晶体塑性模型更加集中，多数分布在 0-40MPa 之间，训练好后的 CP-CNN 模型在预测不同体系双相钢的力学性能时，预测的误差分布整体上小于晶体塑性模型。因此，建立的 CP-CNN 模型在预测力学响应方面比晶体塑性模型更有效，而且解决了晶体塑性模型体系敏感性强的问题。

关键词：卷积神经网络；应力−应变曲线；晶体塑性；双相钢

23-14

利用 Thermal-Calc 进行高强耐蚀铁基中熵合金设计及其组织与力学性能研究

代春朵 1，2，侯华兴 1，2，李江文 1，2，郭呈宇 1，2，孙美慧 1，2

1、海洋装备用金属材料及其应用国家重点实验室， 辽宁 鞍山 114009；

2、鞍钢集团北京研究院有限公司， 北京 昌平 102200；

利用 Python 语言编辑 Thermal-Calc 指令进行合金相组成的高效计算，获得两种 L21 析出相比例大于 15%的 Fe-Cr-Ni-Al-Ti 基中熵合金。采用大变形冷轧结合中温时效工艺进行组织调控获得优异的强塑性匹配，并具有良好耐蚀性能。研究结果表明合金具有未完全回复的细小晶粒组织，伴有多相多尺度析出相形成，其中与基体共格的 HEUSLER_L21 相及 χ 相为主要强化相，使合金强度显著提高。合金的高塑性是由于冷轧态高熵合金经过中温时效后位错密度减小，有利于变形过程中加工硬化率提高，加之 FCC 基体本身具有很高的加工硬化指数，能抑制起源于脆性相周围的微裂纹的扩展，同时归功于 HEUSLER_L21 相与基体的共格结构能防止相界微裂纹的形成。

23-15

联邦学习在材料大数据中的创新应用

冯建发 1, 王畅畅 2, 苏航 3

北京科技大学，北京，邮编：100083

北京钢研新材料科技有限公司，北京，邮编：100081

中国钢研科技集团有限公司，北京，邮编：100081

在材料领域，不同的研发机构和企业通常拥有独立的数据集，其中蕴含着宝贵的材料学信息，但由于涉及隐私、法律和商业机密等因素，这些数据往往无法共享，导致了资源浪费和信息孤立的问题，即所谓的“数据孤岛”问题。然而，联邦学习出现为这些问题提供了一种新的解决方法。联邦学习是一种分布式机器学习技术，其核心原理在于各参与方在本地设备上利用本地数据集进行模型训练，然后通过加密和安全协议的方式，发送参数给中央服务器聚合模型，实现模型的迭代。此过程无需共享敏感数据，从而保护了数据的隐私和安全性。

联邦学习分为三种主要类型：横向联邦学习，适用于不同持有者拥有相同的特征但有不同的样本的情况；纵向联邦学习，适用于不同持有者拥有相同的样本但有不同特征的情况；以及联邦迁移学习，适用于不同持有者拥有不同特征和样本，但希望共享模型知识的情况。

虽然联邦学习目前仍处于研发初期，但在移动设备、金融行业和医疗健康等领域已经取得了成功应用。在材料领域，研究人员也开始尝试使用联邦学习，结合差分隐私算法，使用随机森林模型预测钢材的疲劳性能。这些研究有望提高新材料性能预测的准确性，从而改善材料设计和制造过程。

然而，在工业领域，尚未看到具体的联邦学习实施案例。工业领域涉及复杂的材料生产和制造过程，涉及多个数据源和设备的协同工作，因此在这个领域的联邦学习应用可能需要克服更多的挑战。本文成功地模拟了三个不同企业机构各自使用其奥氏体不锈钢数据集，利用人工神经网络算法进行建模，以预测奥氏体不锈钢的屈服强度。实验结果表明，联邦学习成功地实现了数据的可用性和隐私保护的平衡，而且并未降低模型的精度。尽管建模时间略有增加，但仍处于可接受的范围内。这项研究为解决材料领域的数据孤岛问题提供了一种可

行的解决方案，也为未来在材料工业领域广泛应用联邦学习提供了新的思路。

23-16

一维材料切割 E36 钢板的宏/微观模拟研究

刘光银 1，李奇 2

1. 重庆大学材料科学与工程学院，2. 眉山中车紧固件科技有限公司

碳纳米管沿轴向的弹性模量大约为 800GPa 以上，以其作为“刀具”来切割金属材料被认为是一种超前但可行较高的方法。从宏观和微观两个尺度数值模拟方法研究了碳纳米束/管切割 E36 钢板的机理。微观模拟方面，采用分子动力学方法模拟单壁碳纳米管切割钢板行为。研究发现，直径为 1.24nm 的单壁碳纳米管最大能够切割 21Å~25Å 厚的单晶 E36 钢板，碳纳米管由于根部出现较大应力集中而断裂。钢板切口前移是由于钢板与碳纳米管作用界面处原子层受切应力的作用不断向两侧滑移造成的，不同厚度钢板的原子滑移方向存在差异。切割速率的增加致使钢板温度增加。但切割力也随着切割速度增加而减小。此外，晶粒尺寸较小切割力越小，切割过程中存在晶体合并和晶界迁移的现象，且应力与变形集中在晶界区域。宏观模拟方面，采用有限元数值模拟方法对碳纳米管束切割 E36 钢板进行研究。发现 1mm 直径的碳纳米管束能够切割 10mm 厚的 E36 钢板，切割过程中管束内部压力低于 30GPa，切割力在在 4kN~7kN 范围内。而切割 10mm 厚 E36 钢板最小碳纳米管直径为 0.6mm。应力主要集中与切缝两侧较窄区域内，而钢板整体没有出现明显变形。

关键词：碳纳米管；切割；分子动力学；有限元模拟

23-17

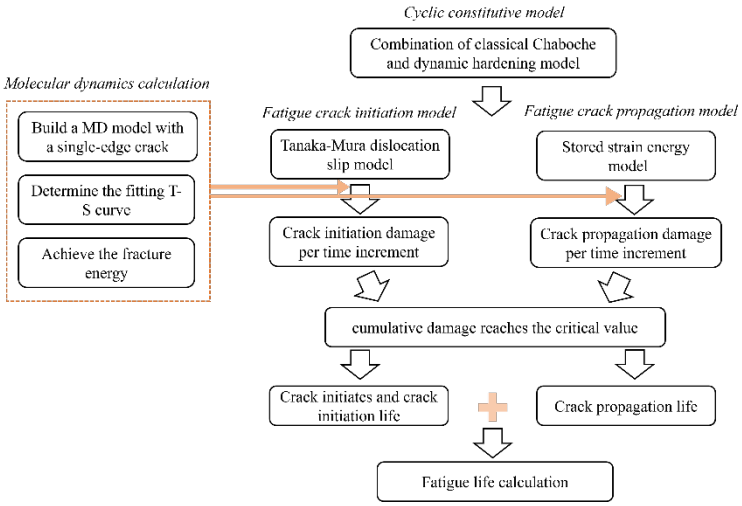
镍基高温合金高温低周疲劳微观机理及寿命计算

王楷萌

鞍钢集团北京研究院有限公司

镍基高温合金（Inconel 750H）在先进超超临界火电机组的再热器或过热管道有良好的应用前景，机组启停或调峰造成的温度波动引起的循环应力会导致关键部件的高温疲劳失效。通过试验、分子动力学（Molecular Dynamics, MD）和有限元计算，系统研究了镍基高温合金的高温低周疲劳行为和微观变形机制，探究了考虑微观损伤机制的寿命计算方法，为该合金的实际应用和疲劳失效机理分析提供试验和理论基础。通过对 Inconel 750H 高温低周疲劳后和中断试验的显微组织分析，发现裂纹扩展路径与最大 Schmid 因子对应的滑移系痕迹一致，孪晶界附近存在大量平行的位错阵列或位错缠结，位错因析出相阻碍而弯曲或位错切过 γ′相。利用 MD 模拟了该合金在高温低周疲劳过程中位错与孪晶界、位错与 γ′相作用的动态演化过程，揭示了其高温低周疲劳过程中的动态变形机制。最后，结合 Chaboche 塑性流动本构模型描述循环应力响应和 MD 计算断裂能，建立了基于断裂能的高温低周疲劳损伤演变模型，成功实现了 Inconel 750H 疲劳裂纹萌生寿命和裂纹扩展行为的计算，与试验结果具有较好的一致性。

附图



关键词:高温低周疲劳；微观组织；分子动力学；疲劳寿命计算

23-18

基于热等静压设备升/降温流动传热仿真研究

冯钰琦

钢研昊普科技有限公司

热等静压技术(HIP)是目前制造高性能先进材料的主要工艺，广泛应用于航空航天、核工业以及军工等领域的关键零部件近净成型及致密化加工，其核心设备高温超高压容器内温度场特性及快冷等受高温高压工艺条件限制难于开展实验研究。本文通过数字化仿真方法，对 HIP 装备高温超高压容器内的发热体进行电-热耦合仿真，对内部流场的升、降温过程进行热-流耦合传热仿真，为提高降温速率对内构件进行了优化，为提高热等静压设备工作效率提供理论基础。主要内容如下：

（1）升温过程不同工况下耦合换热仿真研究

建立了发热体及隔热屏内加工工况下的数值模型，研究升温过程流场的温度变化及自然对流特性，通过工程验证反演法拟合氩气高温高压材料性能曲线。结果表明在升温 120 min 后仿真真实加工工况与工程较为接近为 2105.36 K；研究自然对流下的流场、速度场规律，为改善升温过程工艺和产品质量提供可视化依据。

（2）降温过程耦合换热仿真及内构件优化研究

建立水冷壁内流场域降温仿真模型，提出无新增构件下的低波动高均匀性快冷气道，研究优化圆形与矩形两种截面的气道结构对降温效率的影响及流动特性，两种气道前 30 min 降温速度较快，圆形截面型气道的温度分布均匀，降温速率较低为 30.77 K/min；矩形气道降温速度快为 47.44 K/min，降低到 800 K 所用的时间相比于炉冷分别缩短了 15%与 65%，为热等静压设备快速均匀冷却提供可视化参考。

关键词：热等静压设备，高温超高压容器，耦合传热仿真，三维自然对流

23-19

钛合金 Alpha/Beta 相变过程中变体选择机制的多尺度集成研究

施荣沛 1，2*

1 哈尔滨工业大学（深圳），深圳，518005，中国；

2 哈工大（深圳）材料基因与大数据研究院，深圳，518005，中国；

*E-mail: shirongpei@hit.edu.cn

轻质高强钛基合金的优异性能主要源于其多层次的微观组织，但由于加工过程多场耦合条件下相变过程复杂，其组织的控制颇具挑战性。本报告以航空用先进钛合金组织调控中最

重要的 Beta→Alpha 沉淀析出相变为研究对象， 基于多尺度集成计算（相场、计算热力学与动力学、相变晶体学、形核理论）及先进多尺度表征手段，系统分析并阐明多场（温度、成分、应变、应力以及母相织构）耦合以及晶体缺陷(晶界、位错、初生 Alpha 片层)对 Alpha 变体选择及微/宏观相变织构的调控机制，为通过缺陷来调节相变行为以及微观组织结构，进而调控性能提供理论研究框架和新思路。

23-20

时效强化铝合金热动力力学模拟与力学性能预测

郑潇禹

中南大学粉末冶金研究院，湖南，长沙

Email: xiaoyu_zheng@csu.edu.cn

本工作以 Al-Mg-Si 时效强化铝合金提出了一个基于物理机制的从微结构演变到塑性大变形力学响应分析的全序列计算模型。使用 Kampmann-Wagner Numerical 模型模拟了时效析出过程中析出相的演变，构建了计算强度，加工硬化，断裂延伸率等的数学模型。并且基于晶体塑性理论给出了峰时效态 Al-Mg-Si 合金的大塑性变形模拟结果，得出了材料的损伤位点特征以及改性方式。模拟结果与过往广泛的实验报导一致符合。

关键词：6XXX 铝合金，时效析出，析出相强化，大塑性变形

参考文献：

[1] Myhr, O.R., Grong, Ø., & Schäfer, C. (2015). An Extended Age-Hardening Model for Al-Mg-Si Alloys Incorporating the Room-Temperature Storage and Cold Deformation Process Stages. Metallurgical and Materials Transactions A, 46, 6018-6039.

[2] Zheng, X., Kong, Y., Chang, T., Liao, X., Ma, Y., & Du, Y. (2022). High-Throughput Computing Assisted by Knowledge Graph to Study the Correlation between Microstructure and Mechanical Properties of 6XXX Aluminum Alloy. Materials, 15.

23-21

金属材料高通量增材制备技术研究

侯雅青 1，苏航 1，应华 2，张浩 1，李发发 1，何亚洲 1，宋有朋 1，王炫东 1，张荣宝 3

中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心，北京，100081

杭州德迪智能科技有限公司，杭州，310000

北京钢研新材科技有限公司，北京，100081

材料高通量实验领域重要发展方向之一是块体样品的高通量制备技术，以实现对宏观力学性能的直接表征。将金属 3D 打印技术、高通量制备技术两者有机融合应用于先进结构材料体系的制备开发，实现材料四面体数据的高通量获取，不仅可为材料技术自身的发展提供一项高效方法，也为增材制造技术提供了一个全新的应用领域，科学意义和应用价值巨大。本团队提出 LPBF（Laser Powder Bed Fusion）原位合金化技术，即通过将多种单质元素或母合金粉末按照预设的合金成分配比混合，在激光选区熔化成型的同时进行原位冶金，制备出所需成分的复杂结构零件。在此技术基础上研制了一套金属材料高通量制备试验装置，该设备具备 4 路送粉、动态量化混粉、4 通道铺粉模块，可同时实现 4 种以上粉末、不少于 200 种材料力学性能样件的一次性制备，已应用于耐蚀合金，高温合金和高熵合金等增材制造专用材料的成分设计和工艺优化。

LPBF 原位合金化技术的应用不仅为 3D 打印专用材料开发提供一种高通量解决方案，还可以应用于多材料打印，在合适的位置打印合适的材料，从而在 3D 打印结构设计的自由度基础上增加材料选择的自由度。然而与传统 LPBF 技术相比，该技术工艺的设置不仅要实现样品致密化，还应实现成分的均匀化，更为严苛的工艺窗口限制了该技术的应用。本文基于离散元、有限元和 CALPHAD 方法设计并构建了一套微观尺度的集成计算模型，以 FeCoCrNi 中熵合金为材料研究载体，探索异质混合粉末床与激光交互作用过程发生的高速循环熔化过程与微区合金化机理，通过定义粉末床填充率、成分偏差和成分均匀性等参量，分析获得激光原位合金化成型 FeCoCrNi 系中熵合金的均匀化致密化工艺制定准则。通过与 Fe、Co、Cr、Ni 元素粉末的原位合金化实验结果对比，验证了该集成计算模型的准确性。

该模型的构建基于一套通用的计算方法，可为后续其它金属材料的 LPBF 原位合金化工艺适用性研究提供理论基础。

关键词：激光原位合金化，增材制造，高通量制备，中熵合金，集成计算，数字化研发

23-22

基于区块链的稀土材料全产业链数据追溯技术

闫博伟 1 ，苏航 2 ，王畅畅 1，李灏 1 ，段琳娜 1

（1.北京钢研新材科技有限公司，北京 100081；2.中国钢研科技集团有限公司，北京 100081)

稀土是不可再生的重要自然资源，被广泛应用于航空航天、电子信息、钢铁、有色金属、机械制造、石油化工和新材料等行业中，成为保障全球经济发展和社会进步的关键性矿产资源。因其具有优异的物理化学性能，对提高生产效率，增加产品品种，改善产品性状起到至关重要的作用，故其被誉为工业的“维生素”，是珍贵的战略金属资源。

中国是世界上稀土资源较为丰富的国家，素有“稀土王国”之称，不但储量丰富，而且还具有矿种和稀土元素齐全、稀土品味高及矿点分布合理等优势，为中国稀土工业的发展奠定了坚实的基础。经过多年的努力，中国成为世界上最大的稀土生产、应用和出口国。并且,我国拥有从稀土采选到功能产品制造的完整产业链,稀土冶炼分离技术效率高、成本低，在全球稀土中上游产品生产中占主导地位。但是,稀土产业链中下游应用技术专利大多被美日等国家掌控，我国稀土产品附加值低,高端稀土材料产品多数依赖高价进口,因此我国稀土产业链的国际地位面临挑战。与此同时，在稀土材料开发过程中与之相伴的资源问题日益凸显。在稀土材料全产业链中，资源的合理利用是世界面临的共同挑战。面对资源环境和国际地位被挑战的双重困境，在稀土材料全产业链上进行数据追溯是十分必要的，而数据追溯的前提是需要数据在产业链上进行存证，但是数据存证涉及到企业的核心竞争力和企业之间的信任问题。为了解决资源环境和国际地位被挑战与企业核心竞争力和企业之间信任问题的矛盾。区块链作为一种去中心化、不可篡改、公开透明、安全可信的分布式账本技术，可以有效地解决数据追溯中的信任和安全问题。

本文介绍了区块链技术在材料领域的应用，论述了区块链技术在材料领域应用的原理和案例，探讨了其如何应用于稀土材料的全产业链，以提高资源利用效率并确保数据的公正性。

23-23

Cr5 型模具钢水-空交替控冷数值模拟

李栋 1，贺笃鹏 2

（1.河冶科技股份有限公司，河北 石家庄 052165；2.中国钢研科技集团数字化研发中心，北京 100081；）

某厂下游客户要求规格为 ø245mm 的 Cr5 型模具钢的退火组织达到 SEP1614 标准中的合格级别或更高级别，统计了之前的工艺情况和组织检测情况，全年退火组织不合格率为 50%。针对 Cr5 型模具钢退火组织合格率低，难以满足标准要求的现实技术难题，需要在 Cr5 型模具钢热加工成型后进行热处理以优化球化退火前的组织。Cr5 型模具钢热处理工艺主要包括高温加热和水空交替冷却，其中水空交替冷却是决定退火组织的最关键工艺[1-2]。利用 SYSWELD 对现有工艺进行数值模拟[3-4]，采用等效热熔的方法来定义相变潜热，建立温度场数学模型；通过 KM 方程定义马氏体相变过程，通过 leblond 方程定义铁素体、珠光体、贝氏体以及奥氏体的相转变过程，建立组织场数学模型；用 SYSWELD 软件对 Cr5 型模具钢材料模型的温度、组织、应力进行数值模拟计算。如图 2 所示，方案 M2 的组织已全部转变为马氏体，未见贝氏体产生，得到合格的热加工后组织。对优化方案进行试验验证，退火组织 GA2，达到 SEP1614 合格级别。根据优化后的方案 2，进行了大批量的工业化生产，全年生产 807 吨，退火组织合格率经检测达到 100%。

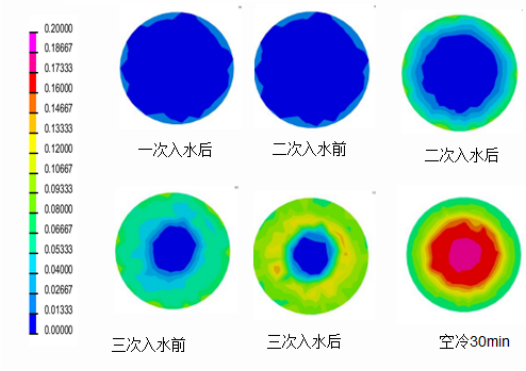


图 1 M1 方案剖面在不同工艺节点的贝氏体云图

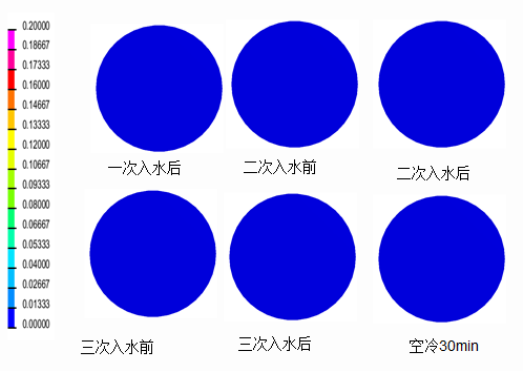


图 2　M2 方案剖面在不同工艺节点的贝氏体云图

参考文献

[1] K FARIVAR H, BLECK W. Microstructural adjustment of carburized steel components towards reducing the quenching-induced distortion[J]. Journal of Materials Processing and Technology, 2019, 264: 313.

[2] 贺笃鹏,张国强，王毛球,等.18CrNiMo7-6 齿轮钢高温渗碳淬火变形数值模拟[J].金属功能材料，2021，10（5）：13.

[3] 刘桢,代朋超.两种不同热变形方式对于 GH4169 合金锻棒组织的影响[J].金属功能材料，2020，27（3）：65.

[4] 蔡梦茹,王瑞珍,何宜柱,等.淬火方式对含铜时效钢组织和性能的影响[J].金属功能材料，2019，26（6）：7.

[5] 袁丽,贺笃鹏,何欣,等.16Cr3NiWMoVNbE 钢 C 型环真空低压渗碳及淬火有限元模拟[J].金属热处理，2022，47（9）：257.

23-24

知识赋能-数据驱动低热导 A2B2O7 型高熵氧化物的智能设计

王毅 1，*，张颖 1，高兴誉 2，王一光 3，宋海峰 1，李金山 1

西北工业大学

北京应用物理与计算数学研究所

北京理工大学

高熵氧化物（HEOs）具有广阔的成分空间和灵活的组分比例，使得通过成分设计就可达到相结构控制和晶格调控的双重效果。其中，晶格工程/畸变被认为是设计新型材料最有效的策略之一，为高性能 HEOs 的设计提供了有效策略。本工作将可解释机器学习与高通量第一性原理计算相结合，通过 A 点位筛选（RE＝Sc、Y、La～Lu），实现了低导热 A2B2O7-型 HEOs 成分的智能设计。首先，基于关键领域知识的机器学习策略和第一性原理计算提供的原子电子基础，实现了关键物性参量的选择，构建了精确度高的低热导率预测模型。利用该预测模型，对 6188 种五主组元高熵氧化物(5RE0.2)2Zr2O7 的热导率进行预测，揭示了热导率与其组分之间的规律，阐明了晶格畸变和局部相结构转变是降低热导率的有效策略。此外，选择机器学习预测热导率低于 1.59 Wm−1 K−1 的成分进行实验验证，发现(Sc0.2Y0.2La0.2Ce0.2Pr0.2)2Zr2O7 的本征热导率在室温条件下为 1.69 Wm−1 K−1、1473K 条件下为 0.14 Wm−1 K−1，与预测结果吻合良好。由此可见，严重的晶格畸变、弱的化学键相互作用、复杂的晶体结构以及局部结构转变被认为是高熵烧绿石陶瓷具有低热导率的原因，表明了第一性原理反馈的关键领域知识的在 HEO 成分设计中的重要性，以及基于知识的关键特征选择和预测模型的准确性。

23-25

18CrNiMo7-6 齿轮钢高温渗碳淬火多工序多场耦合数值模拟

贺笃鹏 *

中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心

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

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

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

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

关键字：高温渗碳；齿轮钢；多场耦合；数值模拟；热处理变形

23-26

一种维护/更新多元合金原子移动性参数数据库的新策略及其在 Mg-Al-Zn-Sn 四元系 hcp 相中的应用

程挺 1,2，钟静 2，张利军 2*

1. 中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心，北京 100081

2. 中南大学 粉末冶金研究院，湖南 长沙，410083

通讯作者邮箱：lijun.zhang@csu.edu.cn（张利军）

基于数值回归方法和 HitDIC（High-Throughput Determination of Interdiffusion Coefficients，https://hitdic.com/）软件，论文首先发展了一种维护/更新多元合金原子移动性参数数据库的新策略。随后，在新策略框架下，对 Mg-Al-Zn、Mg-AI-Sn 和 Mg-Al-Zn-Sn 体系 hcp 相原子移动性描述进行了更新，并建立了一套自洽的 Mg-Al-Zn-Sn 四元系 hcp 相原子移动性参数数据库。此外，分别通过新策略/传统方法构建的 Mg-Al-Zn-Sn 体系 hcp 相原子移动性描述，对 Mg-Al-Zn、Mg-Al-Sn 和 Mg-Al-Zn-Sn 体系 hcp 相中“成分—距离”曲线以及互扩散性质进行了模拟预测和全面分析。相较传统方法，当前发展的新策略在建立合金原子移动性描述方面，尤其是对于具有足够“成分—距离”曲线实验数据的高阶体系，展现出了更高的效率和更优的可靠性。论文发展的新策略在 Mg-Al-Zn-Sn 四元系 hcp 相原子移动性描述中的成功应用，使其有望成为多组分体系 CALPHAD 型原子移动性参数数据库维护/更新的标准。

关键词：原子移动性参数；CALPHAD；扩散偶；HitDIC；Mg-Al-Zn-Sn 四元 hcp 相

23-27

QP 钢的热动力学计算

侯雅青，苏 航，李小群

Q&P 钢是一种新型马氏体钢，通过淬火和配分工艺实现高强度、高塑性的组合特性，在汽车行业具有广泛的应用潜力。其中 Q&P 钢的马氏体和亚稳奥氏体双相组织调控是提高其强韧性的关键。本文基于 CALPHAD 方法建立了 Q&P 钢的配分扩散模型，并建立了一套特定成分在特定 QP 工艺下的组织转变计算任务流，见图 1。通过计算 QP 钢一次淬火过程的马氏体/残留奥氏体含量和配分过程中残留奥氏体的碳富集量，并结合 Thermo-Calc 软件内置的基于吉布斯自由能的马氏体相变本构模型，预测稳定保留至室温的残留奥

氏体含量。利用该模型计算文献钢种（Fe - 0.2C - 1.28Mn - 0.37Si - 0.0018B，wt%）的室温残留奥氏体含量，见表 1，结果显示计算马氏体转变温度比试验数据高 60 ℃，计算室温残留奥氏体含量为 4.41%，与试验数据基本吻合，从而验证了该计算模型的半定量性。利用该模型进一步计算分析了碳、锰元素含量和热处理制度对 AQT980 和 AQT1180 钢一次残留奥氏体含量的影响规律，计算结果显示碳、锰元素含量的增加可使钢中相变点(A3、Ms、Mf)温度下降；在固定淬火温度下，钢中的碳含量和锰含量增加可使一次残留奥氏体含量大幅增加；当碳、锰元素含量一定时，一次淬火温度的上升会使一次残奥含量大幅增加。 本工作建立的 Q&P 钢热处理工艺的组织转变模型可半定量地计算钢的相变点和残留奥氏体含量，可用于 Q&P 钢的热处理工艺区间优化及组织性能预测。由于计算模型所采用的马氏体转变模型具备较广泛的适用性，因而该组织转变模型具备应用于其它成分 Q&P 钢种的可行性。

关键词：Q&P 钢；热动力学分析；残留奥氏体；CALPHAD 方法

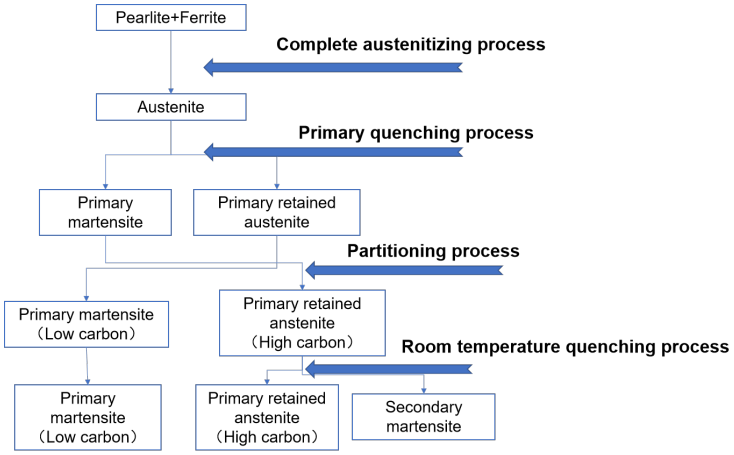


图 1　QP 钢的组织转变模型

表 1　试验钢计算结果与文献报道的试验结果对比

试验钢	残留奥氏体含量/wt%	A_3/℃	Ms /℃
试验结果	4.2 ～ 5. 6	737 ～ 844	345
计算结果	4.41	813	407

23-28

金属增材制造跨尺度全流程研发平台的设计与开发

高帷策 1，侯雅青 1，李发发 1，李小群 1，张浩 2，宋友朋 1，孔豪豪 3，付奎源 1，于鸿尧 4，苏航 1，5

1 中国钢研科技集团有限公司数字化研发中心， 北京市 100081；

2 安泰科技股份有限公司， 北京市 100081

3 钢铁研究总院有限公司， 北京市 100081

4 北京钢研高纳科技有限公司， 北京市 100081

5 北京钢研新材科技有限公司， 北京市 100081

金属增材制造过程是粉末床与高能热束之间相互作用的多尺度多物理场耦合问题，涉及宏观尺度上的零件成形温度场和弹塑性变形力学、介观尺度上熔池多相流动力学、微观尺度上晶粒演化动力学和相变动力学。此外,时间尺度上存在着熔池成型的微秒量级，单层扫描的秒量级，大型部件成型的几天乃至数月的时间跨度。由于增材制造物理过程复杂、涉及参量巨大,传统分析表征手段很难对微熔池内传热、传质和糊状区材料微观组织演化过程进行原位观察与测量，导致业内普遍使用“试错法”进行构建的成分工艺开发，效率低、周期长、

成本昂贵。采用数值模拟与高通量实验相结合的方式开展金属增材制造控形控性工艺研究，是揭示其内禀关系的一种重要且高效的手段，是利用材料基因组工程理念设计新材料，优化新工艺的核心组成部分。

本文设计并开发了一套通用的金属增材制造跨尺度全流程研发平台，集云计算软件调度、云计算 APP 模型管理、实验设备预约管理、高通量增材数据管理为一体，计算尺度覆盖 10-3-103mm 量级，仿真工序覆盖真空雾化制粉、增材微观熔池相变、增材宏观构件成型和后热处理等。以高温合金为载体，针对其在“颗粒-流体-固体-相变”转变全流程，构建激光与粉末交互、微熔池传热/传质、快速凝固、循环固态相变等过程的物理冶金数值模拟模型并云化部署上线形成 APP 程序。目前该平台云化部署的软件已覆盖离散元、热力学/动力学、流体计算、相场法和有限元等算法，已上线并部署的专用增材工艺仿真 APP 14 款，可针对常规增材工艺和高通量增材实验，实现原料特性-成型工艺-制件性能的全流程数据规范管理，可为增材制造复杂构件的材料-结构-工艺-性能一体化调控技术提供数字化工具体系的支撑。

关键词：云计算 APP，多尺度云计算，多物理场耦合，金属增材制造，高通量制备

23-29

金刚石锯片切割工件破碎过程数值模拟

巩杉

四川大学

金刚石圆锯片广泛应用于大理石、混凝土、花岗岩等硬脆性材料的加工中。根据结构和工作负荷不同，需要设计不同排列结构的金刚石，来得到综合性能最优的产品。仿真方法能够对金刚石圆锯片切削混凝土等脆性材料进行全过程模拟，从而获得完整切削过程中不同时刻的物理图像，进而指导金刚石圆锯片设计。本项目基于有限元-光滑粒子流体动力学耦合方法（FEM-SPH）建立了金刚石圆锯片切割混凝土全尺寸动力学仿真模型。采用 LS-DYNA 非线性动力学程序运用显示求解算法模拟了圆锯片切割混凝土过程。对比了三种金刚石排布方案对圆锯片切割混凝土中胎体的应力、应变以及锯切力，并计算了工件锯切时间。结果表明该方法能够较好地描述和分析切割过程中微观结构与宏观力学性能关系，有助于揭示金刚石工具切割工件材料的破碎机理。

关键词：金刚石锯片切割;有限元-光滑粒子流体动力学耦合方法;混凝土切割;数值模拟

23-30

采用激光粉末床原位合金化技术制备 Fe-Cr-Co 功能梯度永磁合金

何亚洲 1,2 侯雅青 1 沈鹏 2 张浩 1 周栋 2 苏航 1

中国钢研科技集团有限公司，北京，邮编：100081

钢铁研究总院，北京，邮编：100081

Fe-Cr-Co 永磁材料具有中等的磁性能、较高的工作温度和优良的机械性能，引起了人们的广泛关注。在某些特定的应用场合，Fe-Cr-Co 永磁合金相比于其他磁性材料具有不可替代的地位。Fe-Cr-Co 合金的磁性来源于 3d 轨道磁矩的贡献，其磁性来源于 α 固溶体的调幅分解，分解为周期性排列的 α1(富 Fe-Co)相和 α2(富 Cr)相。目前，Fe-Cr-Co 永磁合金的制备主要采用粉末冶金和铸造技术，并辅以复杂的热处理制度。

功能梯度磁性材料由于其成分或微观结构的逐渐变化而表现出可变的磁路特性和特定部位的力学行为，在磁传感器、信号变压器、磁滞电机和变频器等磁性材料应用中成为迫切需要。然而，上述这些方法限制了磁体的灵活性和多样性，甚至使一些设计都无法实现。激光增材制造作为一种先进制造技术，极大地拓展了三维构件设计和制造的自由度，在先进制造领域受到越来越多的关注。这也是制备常规方法难以制备的功能梯度材料的理想方法。以元素粉末为原料的原位合金化技术不仅在经济上具有优势，而且允许任意的成分调控，使得在同一样品中制备具有功能梯度成分和性能的材料成为可能。利用元素粉末的激光粉末床原位合金化技术制备永磁材料，通过有意识地调控梯度成分，具有高柔性和变磁路特性等优点，

具有广泛的应用前景。

本工作首次激光粉末床原位合金化技术以 Fe、Cr、Co 元素混合粉末的方法制备了 Fe - Cr - Co 功能梯度永磁合金。所制备的 Fe - Cr - Co 合金均为单一的 BCC 相，且元素分布均匀。成分梯度样品的力学性能和磁性能呈现梯度变化。随着 Cr 含量的增加，样品的维氏硬度增加，样品的饱和磁化强度降低。各向同性状态下的最优磁性能与传统粉末冶金制备的各向同性磁性能相当或更高。LPBF 原位合金化技术具有进一步探索 Fe - Cr - Co 磁性材料的潜力，如由多种或多种组成元素组成的磁性材料，并最大限度地提高磁性材料的成分灵活性。

23-31

多孔表面提升池沸腾传热性能研究

李通 1, 吴晓敏 2*, 马强 2

1. 中国钢研科技集团有限公司 数字化研发中心，北京 100081

2. 清华大学能源与动力工程系，热科学与动力工程教育部重点实验室，北京 100084

在淬火工艺中沸腾现象十分常见，提升沸腾传热性能对金属热处理工艺发展起着重要的作用，多孔表面用于强化沸腾传热有着良好的应用前景，改善多孔表面结构可进一步增强其沸腾传热性能。本文实验研究了开通道对多孔表面池沸腾传热的影响和性能表现。实验研究了光表面、未开通道和开通道泡沫铜表面池沸腾传热过程，结果表明，与光表面相比，未开通道泡沫铜表面在部分热流密度下可强化沸腾传热性能，但随热流密度增加会恶化传热。而开通道泡沫铜可强化沸腾传热性能，强化效果随热流密度增加而减弱，并与通道直径和通道数量有关，总体而言，更多的通道数量与更大的通道直径更有利于在较高热流密度时强化沸腾传热性能，但通道数量过多和通道直径过大时，反而会减弱强化效果。

关键词：池沸腾；泡沫金属；传热；开通道

23-32

ICME 框架下汽车用高强钢的设计研发

郑伟森，何燕霖，鲁晓刚

上海大学材料科学与工程学院，上海 200444，中国

随着集成计算材料工程（ICME）的发展，多种材料计算方法应用于高性能材料的设计研发，不仅可以轻松地探究大量的合金体系和工艺参数，有效地探索宽广范围的成分空间，而且突破了传统试错法的成本和时间限制。计算热力学和动力学作为重要的计算方法之一，通过与专有数据库的结合，使得多元多相材料的相变过程模拟成为可能。而专有数据库的可靠性直接决定了相变行为模拟预测的准确度。然而，针对汽车用高强钢设计的热力学和扩散动力学数据库仍需进行完善。同时，如何确定影响汽车用高强钢特定性能的特征变量，仍然是 ICME 框架下材料设计面临的首要问题。鉴于此，本项目基于 CALPHAD 方法，开展集成热力学和动力学建模及高通量计算研究，建立影响力学性能的热力学和动力学特征变量，对汽车用钢开展成分设计，并成功研发出不同强度级别的汽车用高强钢。

23-33

材料数字化研发与应用平台架构与设计

蔡味东 1

中国钢研科技集团有限公司

以材料基因工程为代表的新一代材料数字化研发技术，在向工业应用拓展过程中，有赖于场景化的企业级、行业级服务平台。基于公网云计算、材料 APP、材料区块链、激光原位合金化等原创性技术进行架构与设计，建立了材料尤其是金属材料数字化研发与应用平台。集成调度了 40 余种从原子尺度到宏观尺度的材料、工艺计算软件，可实现材料设计、工艺模拟、服役仿真、分布式数据发现、高通量制备等专业级数字化研发场景。众筹形成近 700 多个场景化的材料 APP 应用。以此为基础，有望以材料端为基础，构建产业链资源协同平

台，推动材料-装备-工程产业的数据协同和技术进步，形成产业链数据融合的市场化、国际化解决方案。

关键词：数字化研发；分布式数据；产业链

23-34

面向材料数字化研发的数据库平台建设关键技术

张雷 1，2，姜雪 3，何杰 1，宿彦京 1

1.北京材料基因工程高精尖创新中心，北京，100083

2.北京云智材料大数据研究院，北京，100083

3.北京科技大学 钢铁共性技术协同创新中心，北京，100083

材料基因工程是统筹考虑新材料研发-生产-应用全过程的高维影响因素、综合利用高效计算设计、自主/智能实验、大数据和人工智能等技术，提升新材料研发速率，降低研发成本，提高工程化应用水平的前沿共性技术。近年来，随着材料基因工程研究与应用的深入，大数据和人工智能已经成为材料基因工程的核心技术，数据驱动的新材料数字化研发快速发展成为新的研发范式，极大地提升了前沿新材料和颠覆性新材料的研发效率。

基于材料基因工程理念的数据库以新材料数字化设计研发为目标，面向新材料发现、设计筛选、工艺优化到服役评价等全流程数据资源，提供存储、发现、访问、集成和分析服务，支撑新材料的理性设计和人工智能技术的应用。材料基因工程数据库具有支持材料计算设计、实验研究、生产应用和科技文献等多源异构数据的采集、定义、存储、融合、查询和互操作的功能，需要充分考虑以用户为中心的数据模式自主定义和灵活扩展能力，以满足复杂异构材料数据的托管需求，需要具有兼顾面向人工智能应用的数据融合和服务集成能力，通过数据库与人工智能算法的无缝衔接和交互，实现数据流转与新材料的智能研发。

本文基于国家新材料数据库平台的技术架构和材料数字化研发的技术需求，重点介绍材料数据库平台建设关键技术研发进展，提出了基于自然语言处理的材料科技文献数据挖掘技术，形成基于无模式存储的材料动态容器数据库技术（MGED），建立了面向人工智能应用和数字化研发的数据库系统，实现材料多源异构数据个性化描述、便捷采集、标准化存储，构建了基于云技术、大数据和数据-模型一体化，实现数据在线融合、算法在线开发、模型在线交付、软件在线集成的材料数字化协作平台。

关键词：材料基因工程；数据驱动；数据库；数据挖掘；动态容器

参考文献：

[1] Wang, W., Jiang, X., Tian, S., Liu, P., Dang, D., Su, Y., ... & Xie, J. Automated pipeline for superalloy data by text mining. NPJ Computational Materials, 2022, 8(1), 9.

[2] Yan, R., Jiang, X., Wang, W., Dang, D., & Su, Y. Materials information extraction via automatically generated corpus. Scientific Data, 2022, 9(1), 401.

23-35

高炉富氢减碳潜力及风口喷吹燃烧模拟研究

彭星 1， 王静松 1， 左海滨 1， 薛庆国 1

北京科技大学绿色低碳钢铁冶金全国重点实验室，北京 100083

基于高炉分区热质平衡理论，建立了高炉冶炼数学模型，以高炉生产率、风口理论燃烧温度、炉顶煤气温度为优化目标，获得了风口富氧富氢的合理操作区间，并解析了不同工艺的减碳潜力。同时，本研究建立了喷枪-风口-回旋区-焦炭床的煤粉/氢气流动燃烧、焦炭反应三维数值模型，模拟了不同富氧率及喷氢量对高炉下部流动燃烧的影响。研究表明，随着鼓风富氧率增加，风口理论燃烧温度增加，回旋区边界的煤粉燃尽率显著增加；随着风口氢气喷吹量增加，回旋区内气相峰值温度有所升高，但风口理论燃烧温度降低，回旋区边界的煤粉燃尽率降低。在富氧率为 5%条件下，单个风口喷吹氢气 1500Nm3/h、煤粉 1500kg/h 时，

风口理论燃烧温度为 2188℃，回旋区边界的煤粉燃尽率为 73.2%。

关键词：低碳高炉；风口富氢；合理操作区；理论燃烧温度；煤粉燃尽率

23-36

工业级微观尺度材料计算仿真

吕海峰 1

北京龙讯旷腾科技有限公司，北京 100190

新能源、半导体等新兴行业的发展亟需创新材料的快速研发与应用。在更微观的原子尺度实现高精度大尺度材料模拟仿真，建立基于“第一性原理”的正向研发模式，是推动面向未来的先进材料体系快速研发的关键所在。龙讯旷腾基于量子力学的材料计算模拟软件平台（Q-CAD，Quantum-Computer Aided Design）创新性地融合了材料物理、高性能计算及人工智能先进算法，可以在保证计算精度的前提下大幅度提升计算的时间和空间尺度，将为工业级材料设计研发和工艺改进提供原子级模拟仿真的有力工具。

关键词：第一性原理；微观尺度；高精度大尺度

23-37

某超超临界汽轮机阀门卡涩故障原因分析

肖中图 2 ，高振宁 2，姜世凯 3，管晓军 2，范志东 1*, 周陈龙 1，乔越 1，姜敏 1，闫爱军 1

1 西安热工研究院有限公司

2 国能中卫热电有限公司

3 华能沁北发电有限公司

某超超临界机组在运行约 8500 小时后，启机过程中两个高压主汽法和一个调节阀发生卡涩。经过失效分析，排除了油压低、执行机构及油动机节流孔堵塞等可能性原因，明确此次阀门卡涩为阀门剥落氧化皮卡涩所致。室温下，阀杆与导向套之间的缝隙在 210~460 μm 之间，而卡涩的氧化皮厚度约 100~200 μm。氧化皮以 Fe3O4 和 Fe2O3 为主。为提高阀杆与阀芯的耐磨性，其表面进行了渗氮处理，试验结果表明表面渗氮处理大幅降低了其表面抗蒸汽氧化性能；加之机组负荷波动频繁，阀门内壁温度变化较快，导致氧化皮剥落，在阀门活动间隙内堆积致其卡涩。根据失效分析结果，提出相应建议供电厂参考。

关键词：超超临界机组；汽门卡涩；蒸汽氧化；表面渗氮

23-38

Thermo-Calc 数字化平台在先进高强度不锈钢产品开发中的应用

孔庆毛 1，郑椿 1，江来珠 1

青拓特钢技术研究有限公司

利用 Thermocalc 数字化研发平台，开展了屈服强度为 355-1000MPa 的先进高强度不锈钢产品的合金设计以及连铸、热轧及热处理工艺等制造技术的研究。针对高氮奥氏体不锈钢的凝固过程，分析了合金元素、铁素体阱和连铸工艺对氮固溶度的影响。计算发现随着镍和铜含量提升，氮固溶度开始增加，到达最高值后，则随镍含量的进一步提升，氮固溶度反而下降。随着凝固过程的进行，高氮奥氏体不锈钢的氮固溶度开始下降，到达最低值后再回升，主要原因是在液相中先析出铁素体，导致氮固溶度急剧下降。针对高氮奥氏体不锈钢的热轧过程，计算了镍铜比和锰含量分别对于富铜液相和氧化皮形成的影响，提出了获得良好表面

质量的合金设计和热轧工艺。针对双相不锈钢，计算了不同铬镍当量比和加热温度对于高温铁素体相比例的影响，提出了减少甚至避免热轧边裂的热轧工艺。基于数字化平台的合金设计和生产工艺开发，开发成功产品性能和表面质量俱佳的先进高强度不锈钢产品。

关键词：Thermocalc；数字化平台；高强度；不锈钢

23-39

长时间尺度原子模拟算法的探索及应用

施又元 1，燕鑫 1

北京航空航天大学，机械工程及自动化学院，北京 100191

传统的分子动力学可以描述一系列材料微观的物理、化学、力学机制，为我们认识微观世界打开一扇窗口。然而由于现阶段计算条件的局限性，传统分子动力学最长可以模拟的时间尺度在几十个纳秒范围内。对于一些缓慢的变化过程，比如扩散、缺陷演化等，传统分子动力学在模拟过程中需要人为施加不真实的高温、高压、高应变率等极端载荷。这使得在研究一些对温度、应变率较为敏感的物理过程时，传统分子动力学难以揭示真实的变化机理。本报告将探讨一种从原子精度描述长时间物理现象的新尝试。通过将势能面扫描方法——自动爬坡法，与微动弹性带法、过度态理论及动力学蒙特卡洛等方法相结合，可实现对系统的长时加载。本报告将结合纳米柱压缩、无定形锂化硅塑形形变、无定形铜锆合金应力松弛等几个实例展示该方法在一些问题中的运用。

关键词：原子模拟、自动爬坡法、长时间尺度原子模拟、微观演化机制

23-40

计算热/动力学与机器学习协同驱动的高性能材料设计与制备加工

张利军 1

1 中南大学粉末冶金国家重点实验室 长沙 410083

随着材料学科日新月异的发展，如何高效设计高性能材料已成为材料领域的重要课题。热力学和动力学是进行材料设计的两大支柱。材料的定量热力学和动力学计算有望实现材料的理论设计。报告首先通过综述当前国际发展趋势及研究小组前期的研究基础，提出了从计算热、动力学出发并结合机器学习和关键实验验证进行高通量材料设计的研究策略。随后，以实例展示了所提出的材料设计策略在高性能铝合金、高温合金等材料设计中的成功应用。最后报告给出了下一步的研究重点及方向。

关键词 热力学，扩散，相场，机器学习，材料设计

23-41

基于材料基因工程思想的稀土元素材料数字化研发设计

李庚 1，詹伟 1，廖春生 2，秦文忠 1，巫剑 1，谢世青 1

中国稀土集团研究院，江西省赣州市章贡区章江路 16 号，341000

近些年，“材料基因组计划“在国际上迅速发展起来，该计划的核心内容是融合材料高通量计算、高通量实验和材料大数据技术，加速新材料的设计和研发。高通量、多尺度材料计算平台与专题数据库是高效材料研发与信息化技术的有机结合，是国际新材料研究领域的共性前沿创新载体，美国、欧洲等发达国家已经开展了平台和数据库研发和探索。稀土是重要的战略资源，也是不可再生资源，稀土元素材料研发对新能源材料、半导体材料、生物医用材料、新型显示材料等具有重要意义。基于材料基因工程思想，围绕稀土元素材料数字化研发设计，开展高通量计算筛选与平台建设、高精度专题数据库构建、基于机器学习算法与数据挖掘策略的先进功能材料预测和逆向设计等研究，将助力稀土功能材料研发周期减半、研发成本减半。

关键词：稀土元素材料，材料基因工程，高通量计算，数字化研发

参考文献：

[1] **Geng Li**, et al. High-Throughput Computing (HTC) Environment for Materials Computational Science Based on the Tianhe Serial Supercomputers. J Mater. Sci. Appl., 2021.
[2] **Geng Li**, et al. High-throughput computation with all-electron density functional perturbation theory for the Raman spectra of 2D materials，Scientific Data，2023.
[3] Puxin Cheng, **Geng Li**,* et al., Prediction of highly stable two-dimensional materials of boron and phosphorus: structural and electronic properties. Phys. Chem. Chem. Phys., 2022.
[4] **李庚** 等. 基于超级计算机的高通量任务处理方法. 中国: 202110209486.X
[5] **李庚** 等. 跨域通信系统. 中国: ZL202110674705 .1.

23-42

AI+原子模拟给材料设计带来的新机遇

戴付志 1
1.北京科学智能研究院

原子模拟方法是材料研究中的重要手段，在材料性质预测、微观机理探索等方面具有重大意义。近些年，随着人工智能技术的发展，原子模拟辅助材料认知提升，甚至材料设计得到了长足的发展。例如，人工智能方法直接加速材料性质预测、实现原子尺度模拟跨尺度衔接、以及加速机理揭示等，对材料研究带来了革命性的机遇。我们将结合我们最近的一些研究案例，具体介绍下当下人工智能+原子尺度模拟如何能够加速新材料设计，并简单展望人工智能给材料研究领域带来的新机遇。

关键词：人工智能；原子尺度模拟；材料设计

23-43

基于 Model as a Service 的分子性质预测和设计

杨小渝 1，2
1.中国科学院计算机网络信息中心
2.北京迈高材云科技有限公司

材料数据是典型的“小”数据，如何基于小样本材料数据 ，开展新材料的性质预测和设计，一直是业界研究的一个热点。 本报告讲述我们基于迁移学习思路，预训练分子结构理解增强大模型，它将学习出普适的分子结构知识，从而迁移用于下游往往具有“小样本数据”特征的“分子-性质”预测器训练， 目前已能达到甚至超 10 万量级标注数据样本训练出的模型预测精度。本报告将讲述分子结构理解增强模型 ChemBer 及其使用。

关键词：材料数据；小样本；迁移学习；分子结构

23-44

临氢环境下位错塑性的原子尺度机制

赵凯 1
江南大学机械工程学院，无锡，214122

氢与小尺寸塑性之间的相互作用对于氢致断裂过程的发展有着至关重要的影响。基于分子动力学模拟和力学理论建模，我们研究了纳米压痕以及拉伸断裂两种加载模式下氢原子气团对位错形核和扩展的影响。结果表明，在压痕加载过程中氢引发的压痕力下降是由于在位错周围的氢原子气团的溶质拖拽降低了位错成核所需的能量。研究发现，由于氢原子的存在，位错的自组织临界性（SOC）的幂律指数增加，这是由于氢可以降低位错堆积的概率，从而促进压痕过程中位错向试样表面的运动。而在断裂加载中，裂尖位错发射所需的临界 I 型应

力强度因子在较低加载率下随氢浓度的增加而增大，而在较高加载率下，则对氢浓度不敏感。

关键词：氢原子；氢致断裂；纳米压痕；SOC；位错