

数学与系统科学研究院  
计算数学所网络学术报告

报告人： 许庆彦 教授

( 清华大学材料学院 )

报告题目：

镍基高温合金凝固过程中枝晶  
生长的相场模拟

邀请人： 黄记祖 副研究员

报告时间： 2021 年 12 月 7 日 (周二)

下午 15:00-16:00

报告工具： 腾讯会议 (ID: 220-688-677)

会议链接：

<https://meeting.tencent.com/dm/mwuy2qetnx5v>

## Abstract:

材料基因工程 (MGI) 的目的是采用计算、实验与数据相整合的方法, 加快新材料的研发。集成计算材料工程 (ICME) 则与其有相同的研究目标, 但更强调工程应用。ICME 的其中一个重要研究内容, 就是开发更符合物理实际的数理模型与计算工具, 并促进技术进步。

在高温合金的定向凝固过程中, 枝晶是最常见的凝固组织之一。研究者们对枝晶在定向凝固过程中的枝晶生长现象也开展了大量的实验研究。但是, 对于枝晶的形成与竞争生长过程, 则仍然局限于事后推断, 人们并不清楚其中发生的实际过程和转变细节。建模与仿真技术则可以为我们提供一种非常有力的研究工具。对于实际的多元合金凝固过程复杂的枝晶生长现象, 如何准确地模拟和再现其枝晶生长和演变过程, 仍然是一个挑战。

为了真实地反映多元多相的影响与实际情况, 建立了耦合高温合金热力学数据库的多元合金多相场模型。提出了求解多相场模型的高精度插值算法, 该算法能够将相变热力学驱动力计算的相对误差降低至 1% 以下。开发了基于 GPU 的多相场模拟并行计算方法, 并提出了异步并行数据传输与计算算法解决 GPU 显存不足的问题, 实现了凝固过程三维枝晶生长的相场模拟。

系统开展了不同定向凝固条件下枝晶组织生长的相场模拟, 建立了更精确的单晶高温合金的一次臂间距解析表达式。开发了耦合格子-玻尔兹曼方法的多相场模型, 实现了对流作用下枝晶生长模拟。讨论了几种常见的凝固现象: 枝晶偏离、枝晶会聚、枝晶重熔与尖端分叉。计算结果表明在低冷速下熔体自然对流强度大, 能造成枝晶偏斜、重熔与分枝, 并减小一次枝晶臂间距。基于不同凝固条件下的糊状区熔体流速预测了雀斑缺陷形成敏感区。

对高温合金枝晶间组织生长过程进行了实验和多相场模拟研究。模拟得到了与实验一致的组织形貌, 证实了共晶反应的发生, 并揭示了共晶组织粗化原因和粗大  $\gamma'$  相附近  $\gamma$  枝晶重熔机制。

# 欢迎大家参加!