

На правах рукописи

Джук

Жук Дмитрий Игоревич

**Разработка модели упруго-пластического поведения текстурованных изделий из
сплавов на основе циркония**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва 2020

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете
«МИФИ»

Научный руководитель: Исаенкова Маргарита Геннадьевна,
доктор физико-математических наук,
профессор НИЯУ МИФИ

Официальные оппоненты: Глезер Александр Маркович,
доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник, профессор
НИТУ «МИСиС»

Маркелов Владимир Андреевич,
доктор технических наук,
начальник научно-исследовательского
отдела АО «ВНИИНМ»

Серебряный Владимир Нинелович,
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник ИМЕТ
им. А.А.Бардина РАН

Защита состоится «20» мая 2020 года в 14.30 на заседании диссертационного совета
МИФИ.01.03 в национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ»,
115409, Москва, Каширское шоссе, д.31, тел. 8(495)788-56-99 доб. 95-26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального
исследовательского ядерного университета «МИФИ» и на сайте: <https://ds.mephi.ru>.

Автореферат разослан «__» _____ 2020 г.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в двух экземплярах,
заверенных печатью организации, по адресу НИЯУ МИФИ.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.



Куликов Е.Г.

Актуальность темы. Одним из основных направлений повышения эффективности ядерной энергетики является увеличение величины выгорания топливных элементов. Повышение выгорания приводит к бóльшему радиационному росту и распуханию топливных таблеток и, как результат, возрастает давление на оболочки тепловыделяющих элементов (ТВЭЛОВ). Для предотвращения выхода радиоактивных продуктов деления в теплоноситель необходим прочный материал для оболочек ТВЭЛОВ. Малолегированные циркониевые сплавы являются основным материалом оболочек для водо-водяных энергетических реакторов (ВВЭР) на тепловых нейтронах. Они обладают низким сечением захвата тепловых нейтронов, высокой коррозионной стойкостью в пароводяной среде при температуре эксплуатации (около 350 С) в активной зоне ядерного реактора, а также достаточной прочностью благодаря твердорастворному и дисперсному упрочнению в результате легирования ниобием, железом, кислородом и другими элементами.

Основной фазой промышленных сплавов на основе циркония является его низкотемпературная фаза – α -фаза, обладающая гексагональной структурой. Именно она определяет анизотропию физико-механических свойств, то есть различия свойств вдоль разных кристаллографических направлений. Дополнительные фазы такие, как β -фаза, интерметаллидные фазы, содержатся в циркониевых сплавах в малых количествах и оказывают второстепенное влияние на анизотропию свойств изделия. В процессе механической обработки зерна поликристаллического материала приобретают преимущественную кристаллографическую ориентацию, которая, в свою очередь, и определяет анизотропию свойств (коэффициентов термического расширения, радиационной и термической ползучести, пределов текучести и т.п.) изделия. Поэтому анализ кристаллографической текстуры α -фазы занимает важное место в физическом металловедении циркониевых изделий.

Наличие и одновременное действие нескольких систем скольжения и двойникования значительно усложняет моделирование текстурообразования поликристаллического циркония и сплавов на его основе. Поэтому актуальна разработка метода моделирования эволюции текстуры при пластической деформации и влияния текстуры на механические свойства изделий.

Таким образом, актуальным является выявление закономерностей и установление механизмов пластической деформации в α -цирконии, ответственных за формирование текстуры в изделиях при их пластической деформации, а также разработка метода учета анизотропии свойств в процессах технологической обработки материала. Решение поставленных проблем позволит оптимизировать производство и сократить процент брака до минимума при изготовлении и механической обработке конструктивных элементов ядерных энергетических установок.

К вопросу моделирования кристаллографической текстуры обращалось большое число разных исследователей. Пожалуй, наиболее оптимальным является создание модели вязко-пластической деформации гексагональных материалов, которая основана на геометрическом подходе к описанию закономерностей переориентации и анализа активизации тех или иных механизмов деформации. В рамках этой модели двойникование учитывается в качестве активного механизма пластической деформации. В данной работе использован подход, который позволяет одновременно с анализом переориентации зерен изучать процесс изменения структуры материала: дробление зерен за счет развития двойникования и скольжения, образование высокоугловых границ, долю которых можно посчитать.

Цели и задачи исследований. Целями диссертационной работы являются развитие методов моделирования текстурообразования при пластической деформации изделий из сплавов на основе циркония, а также разработка метода учета анизотропии свойств текстурованных поликристаллических материалов в процессах их технологической обработки.

Для достижения поставленных целей сформулированы и решены следующие задачи:

- разработка физической модели процесса двойникования гексагонального металла при его пластической деформации; доработка программного кода для полноценного учёта двойникования зерен при деформации;
- развитие метода моделирования эволюции текстуры при пластической деформации изделий из α -Zr и сплавов на его основе;

– моделирование штамповки ячеек дистанционирующей решетки (ДР) из тонкостенных анизотропных труб из сплава Zr-1%Nb и выявление закономерностей влияния анизотропии свойств текстурированной трубы на воспроизводимость и устойчивость конечных размеров ячеек.

Теоретической и методологической основой диссертационной работы являются разработки отечественных и зарубежных ученых в области механизмов формирования текстуры в α -цирконии при деформации, моделирования пластической деформации поликристаллических материалов, проведения расчетов распределения в изделии напряжений при механической обработке методом конечных элементов (КЭ).

Информационную базу составляют монографии, материалы научно-технических конференций, объекты интеллектуальной собственности и статьи в периодических изданиях по исследуемой проблеме.

При проведении исследований использовались:

- рентгеновские методы текстурного анализа и определения остаточных макронапряжений ($\sin^2\psi$ -метод);
- методы моделирования пластической деформации поликристаллических материалов с использованием феноменологического закона;
- метод моделирования конечными элементами штамповки материала с применением модели анизотропии Хилла и контактной задачи.

Научная новизна работы.

1. Создана модель учета процессов двойникования в эволюции текстуры при моделировании пластической деформации методом КЭ с использованием феноменологической модели.

2. Впервые удовлетворительно проведено моделирование эволюции текстуры α -циркония при пластической деформации листов и труб методом КЭ с использованием феноменологической модели.

3. Разработана модель пластической деформации труб при штамповке ячеек с учетом их анизотропии. Определены параметры технологического процесса, влияющие на размеры получаемых ячеек. Впервые показано влияние степени анизотропии механических свойств исходных труб на результат штамповки ячеек ДР с использованием метода конечных элементов.

Практическая ценность работы

– результаты моделирования штамповки элементов ДР использованы в ПАО «МСЗ» для изменения настроек штамповочного автомата с учетом варьирования анизотропии исходных труб;

– моделирование эволюции текстуры циркония при пластической деформации методом КЭ на основе феноменологической модели использовано для построения зависимостей микроструктуры, механических свойств материала и их анизотропии от кристаллографической текстуры.

Основные положения, выносимые на защиту:

– модель эволюции текстуры при пластической деформации α -циркония, а также методов моделирования штамповки анизотропного материала;

– метод учета процессов двойникования в эволюции текстуры при моделировании пластической деформации гексагональных металлов методом КЭ с использованием феноменологической модели;

– выбор оптимальных настроек штамповочного автомата для уменьшения процента отбраковки ячеек ДР по результатам моделирования эволюции текстуры циркония при штамповке методом КЭ.

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы представлялись и докладывались на следующих научно-практических конференциях и семинарах: Научная Сессия НИЯУ МИФИ (Москва, 2014 г.); Русско-Американский научный симпозиум для молодых ученых (Москва, 2015 г.); XIII Международная молодежная научная школа-конференция «Современные проблемы физики и технологий» (Москва, 2015 г.); XIII, XIV, XV, XVI и XVII Международных школах-конференциях "Новые материалы" (Москва, 2015 г., 2016 г., 2017 г., 2018 г., 2019 г.); Конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (Москва, 2015 г.); Конференция «Наномеханические испытания в исследовании и создании материалов» (Альбуфейра, Португалия, 2015 г.); Конференция «Прочность неоднородных структур ПРОСТ» (Москва, 2016 г., 2018 г.); Международный симпозиум информатики и инженерии WCSE-2016 (Токио, Япония, 2016 г.); XX Международная конференция по механической обработке материалов ESAFORM 2017 (Дублин, Ирландия, 2017 г.); XI Международный симпозиум по моделированию процессов в

поликристаллах СМСп (Дюссельдорф, Германия, 2018 г.); V Международная конференция по ядерным материалам NuMat (Сиэтл, США, 2018 г.).

Достоверность результатов работы обеспечивается проведением экспериментов с достаточной воспроизводимостью; статистической обработкой полученных данных с заданной вероятностью и необходимым количеством повторных испытаний; сопоставлением результатов, полученных разными методами (рентгеновским текстурным анализом и микроиндентированием), использованием современного рентгеновского оборудования производства фирмы Bruker, аттестованными для использования в ядерной энергетике программных комплексов для анализа методом КЭ, а также сравнением с аналогичными данными, полученными другими авторами; положительными результатами промышленного использования рекомендаций, предложенных на основании проведенных расчетов.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 25 работ, в том числе 16 тезисов докладов в материалах конференций, 9 статей в ведущих рецензируемых научных журналах из списка ВАК РФ (из них 7 статей входят в перечень Scopus и Web of Science). Список основных работ по теме диссертации приведен в конце автореферата.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, 5 глав, основных выводов, списка использованных источников и приложений. Содержит 135 стр. машинописного текста, 41 рисунок и 2 таблицы. Библиография включает 105 наименований.

Личный вклад. Автором проведен анализ результатов экспериментальных исследований и выявлены основные закономерности влияния технологических факторов и изменения схемы нагружения на параметры микроструктуры, текстуры и механические свойства, построены конечно-элементные модели процесса штамповки ячеек и проведены расчеты методом КЭ, разработан метод учета двойникования при моделировании эволюции текстуры пластической деформации поликристаллов α -циркония при прокатке листов и труб из циркония и сплавов на его основе.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко описано современное состояние проблемы, обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи исследования, указана научная новизна, практическая значимость работы, приведены положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен обзор работ по изучению анизотропии свойств циркония, действующих систем скольжения и двойникования, методов моделирования пластической деформации, а также рентгеновских методик и микроиндентирования для изучения кристаллографической текстуры и измерения механических свойств. Показано, что до сих пор не создан метод, позволяющий моделировать эволюцию текстуры при деформации методом моделирования пластической деформации кристаллического циркония. Не проведено комплексного изучения влияния анизотропии исходных циркониевых труб на результаты механической обработки, например, штамповки.

На основании обзора литературы поставлена задача экспериментального изучения текстуры в трубных полуфабрикатах, пределов варьирования текстурных параметров и общего уровня механических свойств с помощью рентгеновских методик и микроиндентирования. На основании этих данных с помощью моделирования пластической деформации кристаллического циркония можно получить контуры текучести и, используя метод КЭ, вычислить влияние анизотропии текстуры на результат штамповки ячеек ДР.

Во второй главе содержится описание существующих и используемых программ для анализа методом КЭ, программ для моделирования кристаллической пластичности и научное обоснование выбора тех или иных моделей. Приведены различные математические методы создания репрезентативных объемных элементов, восстановления ориентаций зерен по ФРО, способы задания граничных условий и условий симметрии.

На основании проведенного литературного обзора предложена физическая модель для описания пластической деформации кристаллического циркония методом совместной деформации зерен поликристалла. На основании литературы и имеющихся научных работ в текстурной лаборатории НИЯУ МИФИ выбраны основные параметры для феноменологической модели, это критические сдвиговые напряжения τ_c^α

для всех потенциально активных систем. Таким образом, выражение для производной сдвига скольжением $\dot{\gamma}^\alpha$ сформулировано в виде функции сдвиговых напряжений

$$\tau^\alpha = 0,5\mathbb{C}(F_e^T E_e - I): m^\alpha \times n^\alpha \quad (1)$$

и критических сдвиговых напряжений

$$\dot{\gamma}^\alpha = f(\tau^\alpha, \tau_c^\alpha), \quad (2)$$

а изменение состояния материала является некой функцией от величины накопленного сдвига и скорости сдвига

$$\tau_c^\alpha = g(\gamma, \dot{\gamma}). \quad (3)$$

Широко применяется выражение для движения дислокаций следующего вида:

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right| \text{sgn}(\tau^\alpha), \quad (4)$$

где $\dot{\gamma}^\alpha$ — скорость сдвига в системе скольжения α под действием сдвиговых напряжений τ^α при сопротивлении скольжению τ_c^α , $\dot{\gamma}_0$ и n , определяемых из исходной скорости сдвига и чувствительности скольжения к скорости деформации соответственно. Влияние любой системы β на систему α в виде упрочнения записывается как

$$\dot{\tau}_c^\alpha = h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^\beta|, \quad (5)$$

где $h_{\alpha\beta}$ — матрица упрочнения, определяемая как

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \left(1 - \frac{\tau_c^\beta}{\tau_s} \right)^a \right] \quad (6)$$

Такой подход позволяет эмпирически воспроизвести микро-механические взаимодействия в модели материала. Параметры упрочнения h_0 , a , τ_s предполагаются одинаковыми для всех систем скольжения в материале и связанными с ними взаимодействия между системами. Параметр $q_{\alpha\beta}$ отвечает за латентное упрочнение и обычно берется равным 1 для компланарных систем α и β и 1,4 в иных случаях.

Для численного решения задач на основе модели использовался программный код DAMASK, основанный на математическом методе решения систем уравнений с частными производными с помощью быстрых преобразований Фурье. DAMASK является кодом с многоуровневой дискретизацией расчетного объема материала и модульными компонентами. Принципиальная схема процесса расчета приведена на рисунке 1.

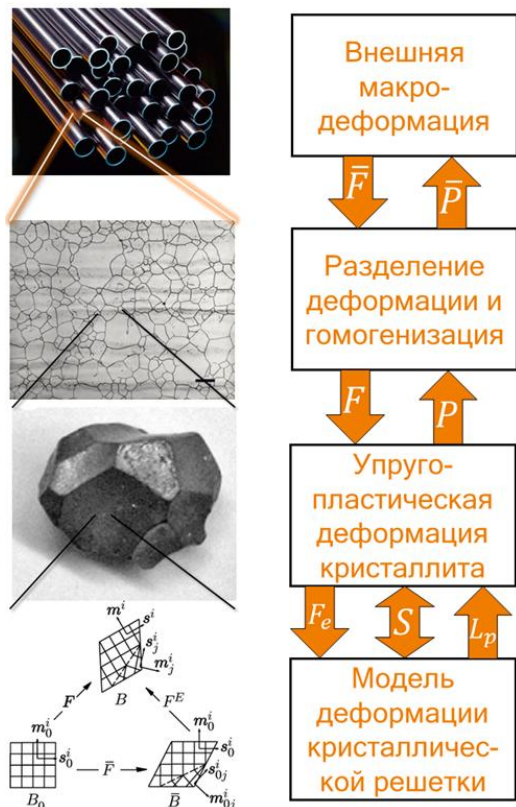


Рисунок 1. Многоуровневая принципиальная схема процесса расчета в программном коде DAMASK.

В данной главе также подробно описаны экспериментальные методы получения текстурных данных. Кристаллографическая текстура описывается функцией распределения ориентаций (ФРО) зерен поликристаллического материала, которая восстанавливается по 3-5 неполным прямым полюсным фигурам (НППФ), полученным методом «на отражение» рентгеновского излучения при пошаговом наклоне и повороте вокруг нормали к поверхности образца. В главе представлены принципиальные схемы съемки ППФ при использовании дифрактометров ДРОН-3 и D8 Discover, а также описана методика определения остаточных макронапряжений $\sin^2\psi$ -методом.

В третьей главе, изложены результаты исследования пластической деформации с помощью моделирования методом КЭ. Значительное внимание уделено процессу двойникования, который, как известно, вносит существенный вклад в формирование текстуры при деформации α -циркония.

В используемом коде для моделирования пластической деформации кристаллов не реализовано влияние двойникования на формирование текстуры на структурном уровне. Хотя некоторые параметры, например, сдвиговые напряжения по системам двойникования можно вывести. Поэтому предпринята попытка доработки программного кода для полноценного учёта двойникования зерен при деформации.

Как видно из закона Шмида, поскольку зерна ориентированы по-разному относительно внешней нагрузки, то и касательные напряжения в плоскостях скольжения будут различны. В результате, во-первых, в разных зёрнах будут задействованы различные системы скольжения и двойникования, во-вторых, локальные напряжения могут существенно отличаться от внешних из-за неоднородности деформации по объёму материала.

В α -Zr при температурах от комнатной до ~ 500 °C наиболее активными системами двойникования являются системы $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$ и $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$, переориентирующие базисные нормали на углы $85,22^\circ$ и $34,82^\circ$ соответственно. Схематическое изображение плоскостей двойникования и переориентации базисных нормалей α -циркония приведено на рисунке 2.

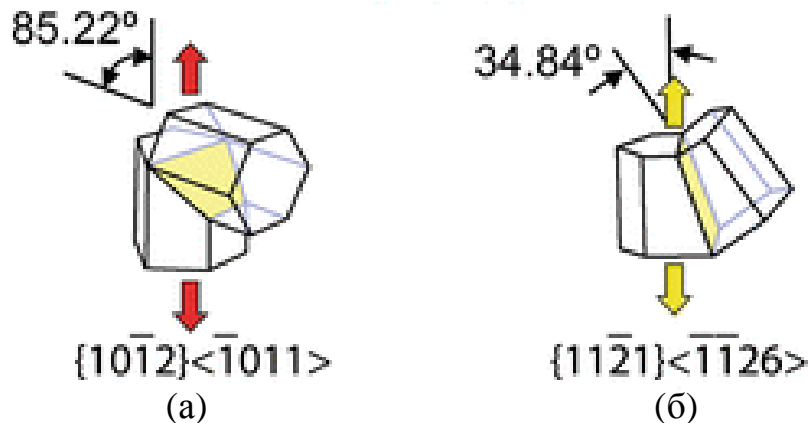


Рисунок 2. Схематическое изображение переориентации кристаллической решетки α -Zr относительно исходной ориентации в случае действия систем двойникования $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$ (а) и $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$ (б) с указанием углов переориентации базисных нормалей на $85,22^\circ$ и $34,82^\circ$ соответственно.

В зависимости от величины и характера внешней нагрузки, ориентации зерна, плотности дефектов активируется та или иная система двойникования. В качестве критерия выбрано превышение сдвиговыми напряжениями критического значения.

$$\tau^\beta > \tau_c^\beta, \quad (7)$$

где τ^β — сдвиговые напряжения в системе двойникования β , τ_c^β — критические сдвиговые напряжения в системе двойникования β .

Для реализации данного критерия в рамках работы написана программа на языке Python, которая обрабатывает данные результатов моделирования и при выполнении условия критерия, разбивает элемент на две ориентации. Одна из них остаётся неизменной, другая, сдвойникованная, поворачивается на соответствующий для системы угол. Это реализовано с применением инструментов алгебры кватернионов. Данные экспортируются в файл и визуализируются в виде прямых полюсных фигур (ППФ).

Исследовать процессы двойникования и их влияние на формирование текстуры удобнее всего на монокристаллах. Поэтому для апробации созданной программы использовались данные прокатки циркониевых пластин, вырезанных электроискровым

методом из цилиндрического монокристалла чистого Zr, полученного путем твердофазной перекристаллизации. При прокатке листов главными направлениями являются: НП – направление прокатки, НН и ПН – нормальное и поперечное направления.

По результатам текстурного анализа построены ППФ (0001) и $\{11\bar{2}0\}$, определены исходные ориентации монокристаллических образцов, а также ППФ материала после деформации. Изучена переориентация монокристаллов трех ориентаций: 1 – $\psi=70^\circ$, $\varphi=33^\circ$; 2 – $\psi=70^\circ$, $\varphi=152^\circ$; 3 – $\psi=70^\circ$, $\varphi=87^\circ$; где ψ и φ – азимутальный и полярный углы в системе координат НП-ПН-НН. (В расчетах $X\equiv\text{НП}$, $Y\equiv\text{ПН}$ и $Z\equiv\text{НН}$). Рассмотрим изменение текстуры монокристаллов на примере одной ориентации № 1. Исходные ППФ (0001) и $\{11\bar{2}0\}$, использованные для моделирования прокатки монокристалла 1-ой ориентации, приведены на рисунке 3.

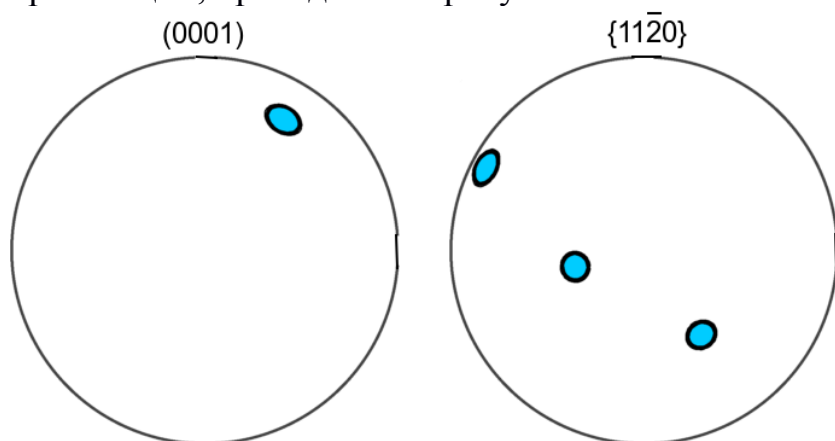


Рисунок 3. ППФ (0001) и $\{11\bar{2}0\}$, заданные при моделировании прокатки монокристалла ориентации № 1.

При соответствующей ориентации кристалла, двойникование начинается уже на начальном этапе пластической деформации. В расчетной модели приложена деформация, соответствующая экспериментальной (~5% в НН). В результате моделирования методом КЭ под действием нагрузки активизировались те же системы двойникования, что и наблюдалось экспериментально. Экспериментальная и рассчитанная ППФ (0001) качественно совпадают, что хорошо видно на рисунке 4. Некоторое отличие экспериментальной (а) и рассчитанной (б) ППФ (0001) обусловлено тем, что экспериментальная ППФ (0001) является неполной, т.е. построенной только до 80 градусов угла наклона исследуемого образца.

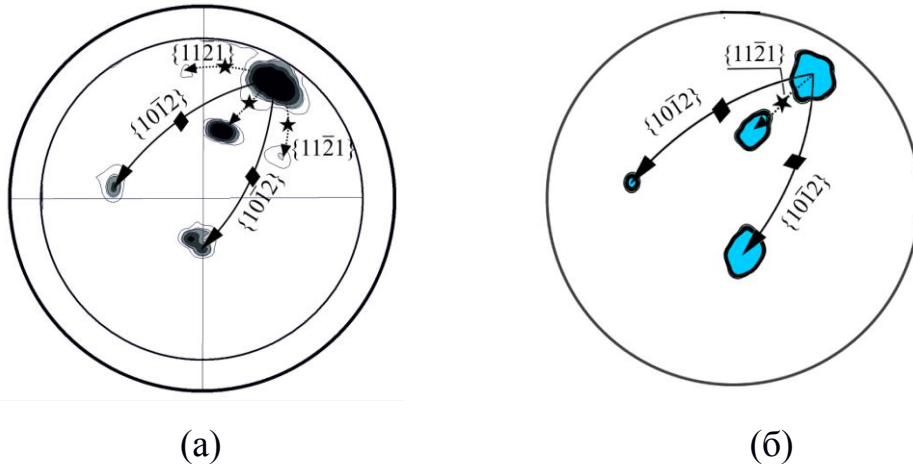


Рисунок 4. Переориентация базисных нормалей двойникованием при деформации монокристалла с ориентацией №1 при деформации на ~5% по толщине пластины, наблюдаемая на экспериментальной (а) и рассчитанной (б) ППФ (0001).

На начальном этапе в основном активизируются механизмы двойникования, которые приводят к резкой переориентации базисных нормалей на углы, соответствующие действующим системам. По данным моделирования доля двойникования в изменении текстуры при прокатке до степени деформации 5% составляет 87 %, из которых 66% приходится на двойникование в системе $\{10\bar{1}2\}\{\bar{1}011\}$.

В дальнейшем на основании результатов моделирования первого этапа выполнен расчет для последующих этапов со значительно большей степенью деформации за проход при прокатке, до 53% и 80% относительно исходного состояния. При таких степенях деформации основным механизмом пластической деформации является скольжение, хотя присутствует и некоторая доля двойникования. Это можно видеть из анализа экспериментальных и рассчитанных ППФ(0001), представленных на рисунке 5.

Здесь и далее для сравнения рассчитываемой и экспериментально полученной ФРО и ППФ использовано следующее выражение определения ошибки:

$$Err = \iiint_V \frac{f_1(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)}{2} |f_1(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) - f_2(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)| d\varphi_1 d\Phi d\varphi_2, \quad (8)$$

где V – объем ориентационного пространства (или углов Эйлера), $f_{1,2}$ – сравниваемые ФРО, $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ – координаты ФРО или углы Эйлера, задающие ориентацию зерна относительно внешних направлений изделия.

Для сравнения, построены графики активности систем скольжения и двойникования для третьего этапа (рисунок 6). Поскольку монокристаллический образец уже переориентировался от направлений, склонных к этому, доля двойников в последующей деформации уменьшается и составляет в сумме по всем системам ~5%.

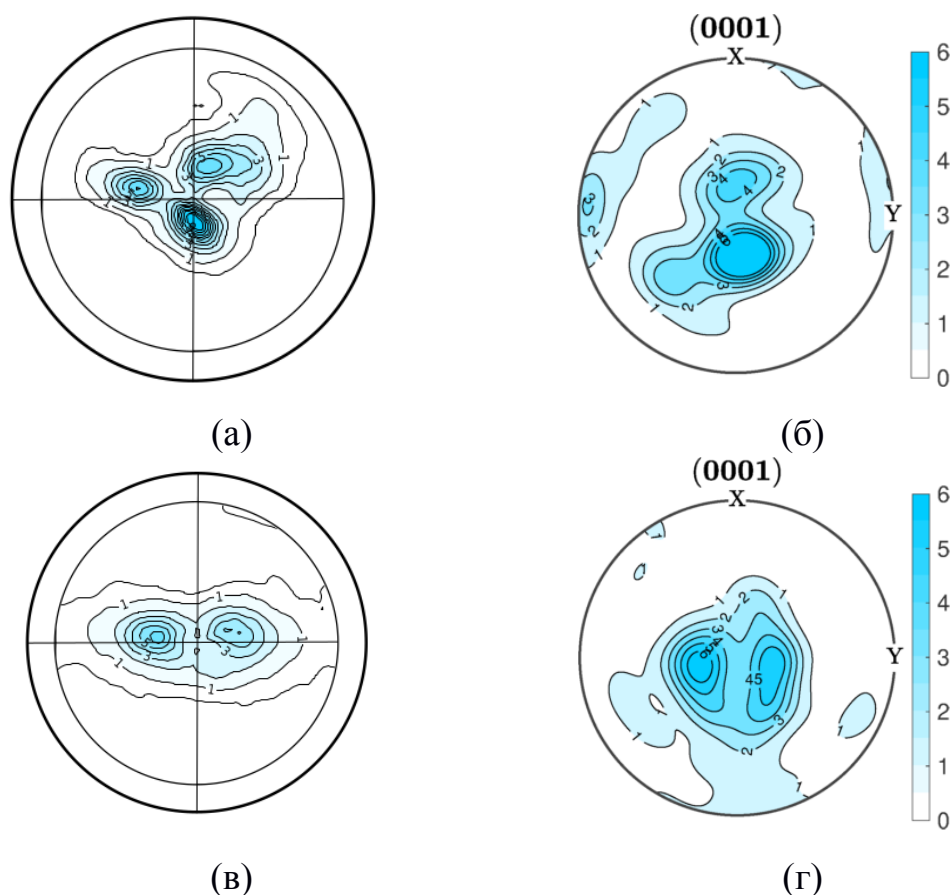


Рисунок 5. Переориентация базисных осей нормалей в процессе второго (до 53%) (а и б) и третьего (до 80%) (в и г) прохода прокатки. Экспериментальные ППФ (0001) (а, в) и рассчитанные (б, г). Ошибка составила 16% для второго этапа и 12% для третьего.

Возможности разработанной методики позволяют отслеживать изменения микроструктуры материала при его пластической деформации. На основании результатов расчет прокатки монокристалла до степени деформации по толщине пластины 10% построена трехмерная модель, отображающая плотность двойников в объеме монокристалла (рисунок 7).

Аналогичные расчеты выполнены для двух других ориентаций монокристалла α -циркония. Доля двойникования на начальном этапе деформации также оказалась весьма существенной в обоих случаях: 90% и 85% соответственно.

На основании проведенных расчетов установлено, что разработанный метод корректно моделирует переориентацию базисных нормалей монокристаллов при прокатке, что позволяет его опробовать для поликристаллических материалов (глава 4). По результатам моделирования установлена последовательность активизации разных систем пластической деформации циркония и доли систем скольжения и двойникования при увеличении степени деформации до 80% по толщине листа при прокатке.

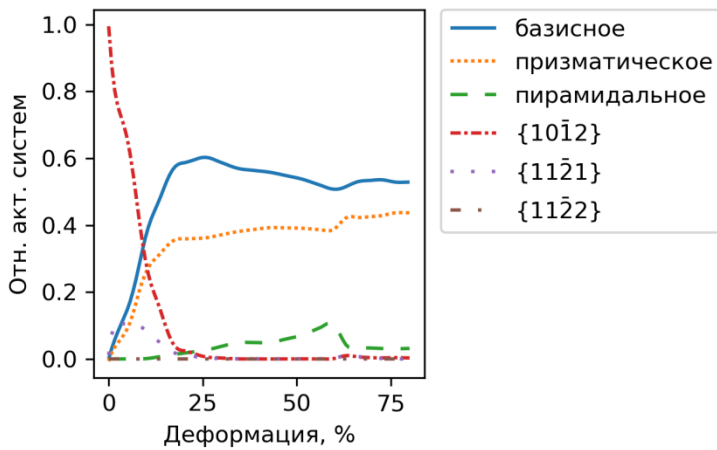


Рисунок 6. Степень активности систем скольжения и двойникования от величины деформации при прокатке монокристалла с ориентацией № 1 на третьем этапе деформации ~80%.

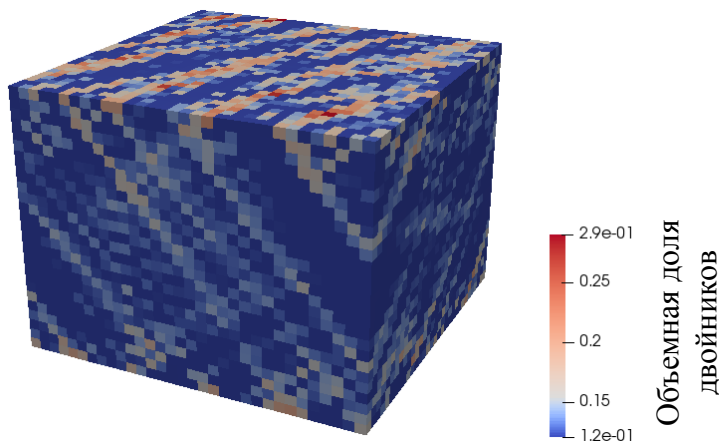


Рисунок 7. Распределение объемной доли двойников, отображающее распространение двойников в объеме монокристалла с ориентацией № 1, прокатанного до 5%.

В четвёртой главе рассмотрены аспекты практического применения разработанного метода для объяснения и предсказания действующих механизмов формирования текстуры при пластической деформации прокаткой. В подавляющем большинстве случаев деформируемый материал состоит из большого количества зерен, ориентированных по-разному по отношению к внешним напряжениям и характеризующихся той или иной преимущественной ориентацией, обусловленной предысторией нагружения.

Для отработки метода моделирования выбрана серия образцов труб с разной исходной текстурой и проведено несколько вариантов трубной прокатки с различными параметрами деформации, которые перечислены в таблице 1.

Используя алгоритм Монте-Карло, ФРО исходных состояний, перечисленных выше образцов, аппроксимированы набором дискретных ориентаций, которые использованы для расчета моделирования кристаллографической текстуры. Это преобразование неизбежно сопряжено с потерей точности построения ФРО, поскольку получаемые

экспериментально ФРО непрерывны по своей сути, а при использовании конечного количества ориентаций непрерывности достичь невозможно. Проведено исследование для определения достаточного количества ориентаций, при котором ФРО будет воспроизведено с приемлемой точностью для дальнейшего изучения переориентации и определения физико-механических свойств.

Таблица 1. Параметры прокатки труб с различной текстурой

Номер образца	Изменение диаметра, %	Изменение толщины, %	Q-фактор
1	-33	-9,7	3,4
	-58	-7,3	7,9
2	-33	-9,7	3,4
	-58	-7,3	7,9
3	-52	-8,5	6,1

Для описанной выше серии образцов проведены расчеты для разных исходных текстур, различных степеней деформации и Q-факторов. Сравнение расчетных ППФ (0001) (рис. 8-11) с экспериментальными данными свидетельствует о хорошей сходимости и эффективности разработанного метода. Исходные текстуры и их аппроксимации дискретными ориентациями варианта 1 и 3 приведены на рис. 8 и 10. На рис. 9 и 11 представлены результаты сравнения экспериментальных и расчетных ППФ (0001) труб, прокатанных по разным режимам.

На рисунке 11 приведены экспериментальные и расчетные ППФ (0001) для случая прокатки тонкостенных труб до величины уменьшения толщины стенки на 52% и внешнего диаметра на 8,5%. В данном случае, текстура установившаяся, поэтому, существенных изменений в текстуре не ожидается.

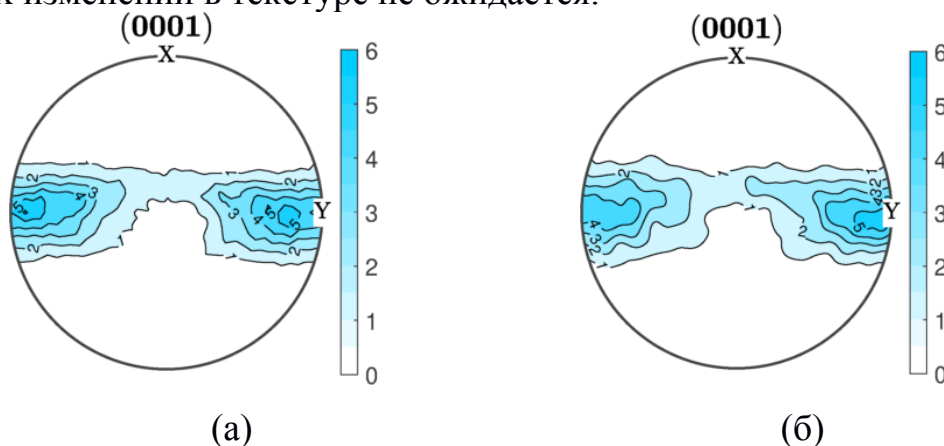


Рисунок 8. Исходные экспериментальная и рассчитанная ППФ (0001) образца №1. Ошибка построения рассчитанной ФРО составила 7%.

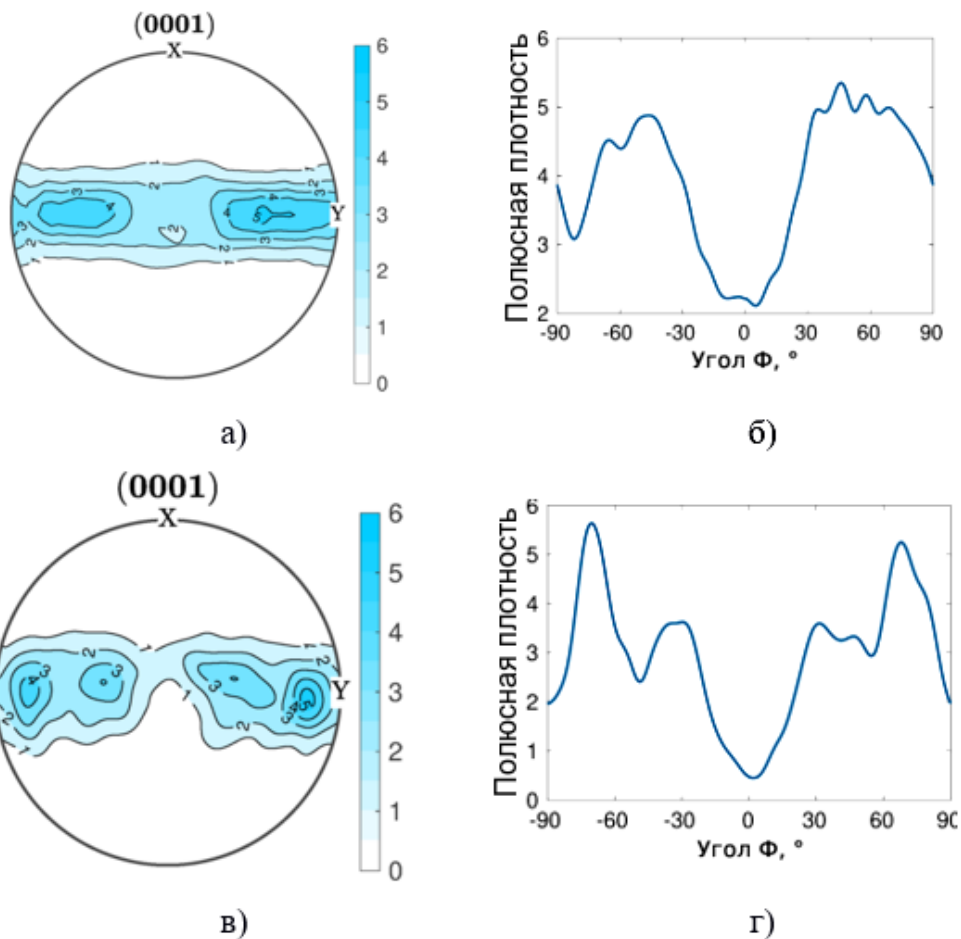


Рисунок 9. Экспериментальная (а, б) и рассчитанная (в, г) ППФ (0001) (а, в), а также распределения базисных нормалей в сечении Z-Y (б, г) после прокатки трубы по варианту 1. Ошибка отклонения рассчитанной ФРО от экспериментально полученной составила 11%.

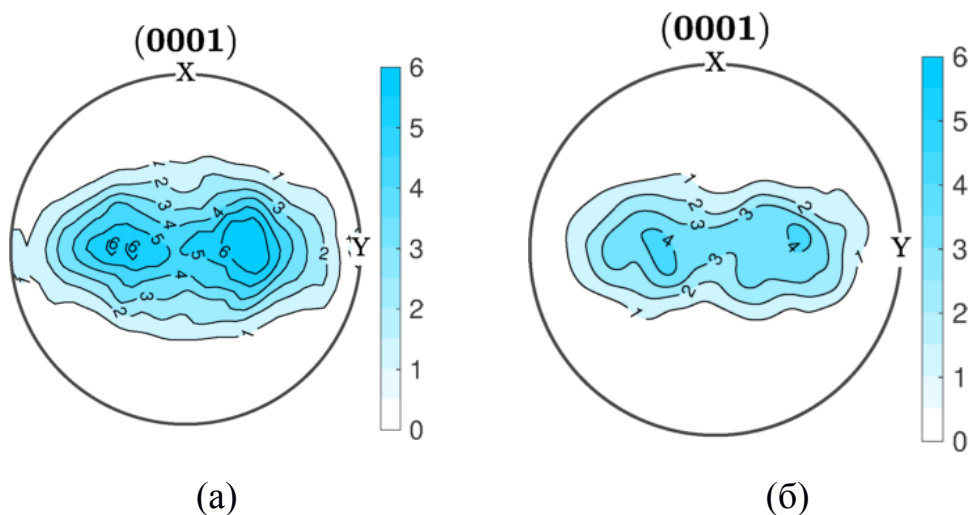


Рисунок 10. Исходные экспериментальная (а) и рассчитанная (б) ППФ (0001) тонкостенной трубы (вариант 3). Ошибка составила 15%.

Как видно из сравнения распределений базисных нормалей в сечении Z-Y, при моделировании полюсная плотность вблизи центра ППФ (0001) ($\Phi=0^\circ$) оказалась меньше, чем наблюдается на экспериментальных ППФ, что может свидетельствовать о

повышенной активности систем двойникования $\{11\bar{2}2\}$, обусловленной низкими значениями критических сдвиговых напряжений.

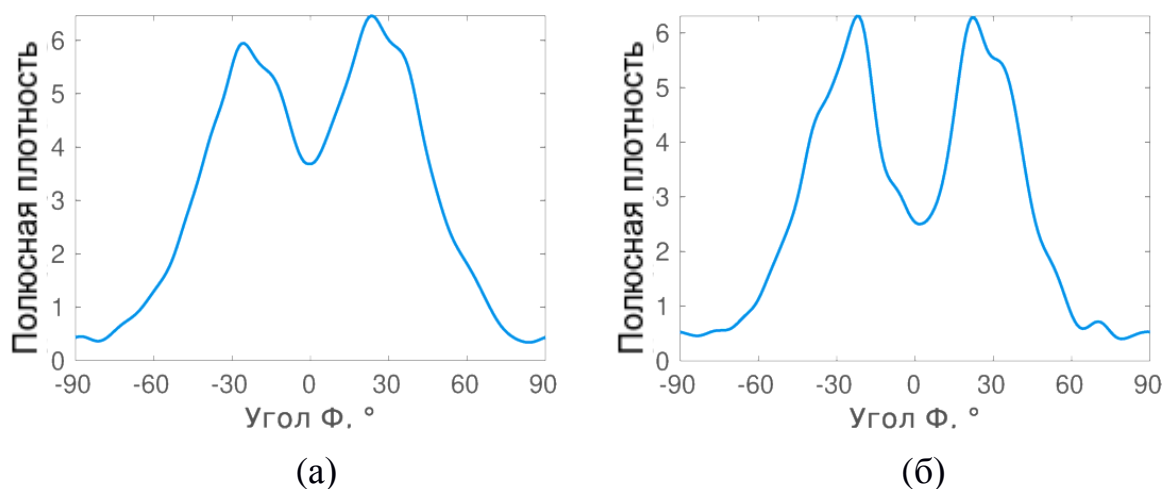


Рисунок 11. Экспериментальное (а) и рассчитанное (б) распределения базисных нормалей в сечении Z-Y (б, г) после прокатки трубы №3. Ошибка составила 10%.

Одной из первостепенных задач моделирования текстуры методом КЭ является возможность определять механические свойства, такие как предел текучести и пластичность, а также их анизотропию. Для этого взяты экспериментальные данные испытания на растяжение образцов, вырезанных из прокатанной циркониевой трубы. Выполнены расчеты по моделированию растяжения объемного репрезентативного элемента с заданной текстурой прокатанного листа, которая получена с помощью рентгеновской съёмки. Сравнение кривых растяжения приведено на рисунке 13.

Также по текстурным данным для циркониевых трубных заготовок, предназначенных для штамповки ячеек ДР, рассчитаны контуры текучести и использованы в следующей главе.

В пятой главе представлены результаты моделирования штамповки ячеек ДР методом КЭ. За основу анизотропии свойств материала в расчете взяты контуры текучести, построенные по рассчитанным интегральным текстурным параметрам, которые представляют собой проекции базисных осей кристаллической структуры α -циркония, взятые с весом полюсной плотности, на оси внешней системы координат. Анализ процесса штамповки ячеек ДР с использованием моделирования методом КЭ позволяет варьировать в широких пределах основные характеристики процесса и свойства материала, определяющие профиль формирующейся ячейки.

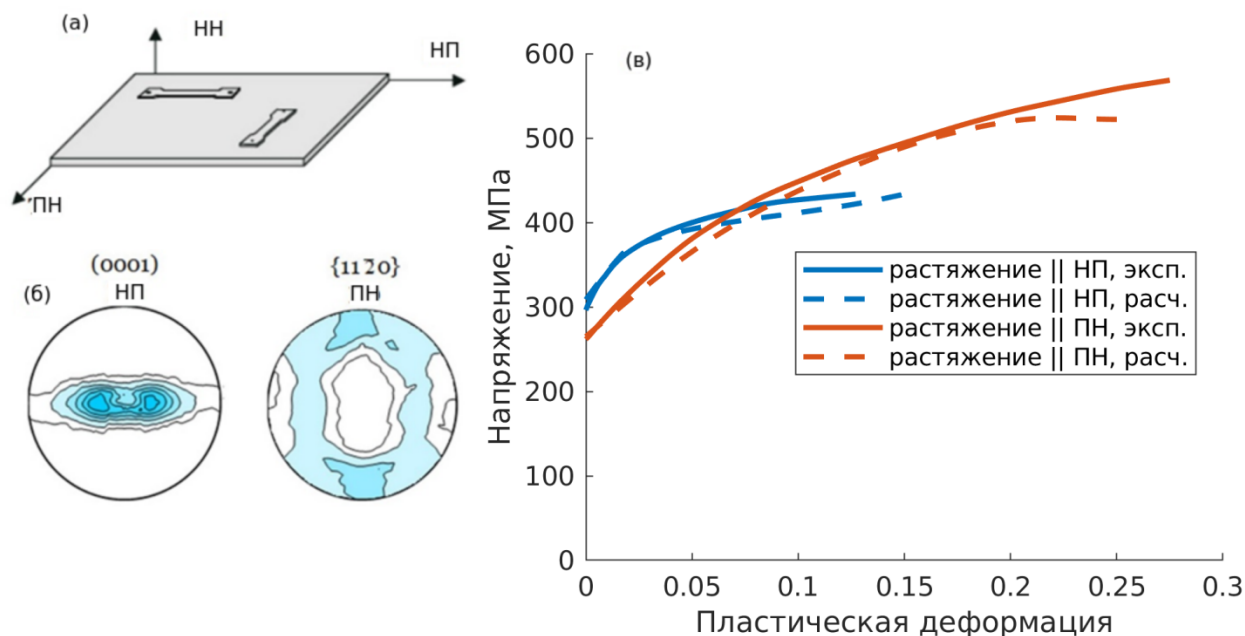


Рисунок 13. Схема вырезки (а), исходные ППФ (0001), {11.0} (б) образцов и сопоставление (в) экспериментальных [Krymskaya, O. et al. IOP Conf. Ser.: Mat. Sci. and Eng. – 2015. – Т. 82. – №. 1. – С. 012092] и рассчитанных диаграмм истинных напряжений при растяжении вдоль НП и ПН.

Согласно данным текстурного и структурного анализа исходных тонкостенных труб, предназначенных для штамповки, анизотропия свойств исследованных труб меняется в определенном из эксперимента диапазоне, который выбран в качестве интервала для моделирования методом КЭ с некоторым увеличением этого диапазона, для перекрытия возможных колебаний свойств не полностью рекристаллизованного материала труб.

Для исследования взяты три предельных случая соотношения пределов текучести вдоль тангенциального, радиального и осевого направлений:

- 1) 1,0: 1,0 : 1,0 (полная изотропия); 2) 1,4: 1,4: 1,0; 3) 1,7: 1,1: 1,0.

Непосредственно процесс штамповки ячейки ДР при моделировании разбивается на три отдельных этапа. Сначала трубка устанавливается и натягивается на оправку. Далее, шесть пуансонов (по три вогнутых и выпуклых) воздействуют на трубу, перемещаясь вдоль радиального направления, для создания необходимой формы ячейки. Наконец, съемное устройство удаляет деформированную ячейку с оправки. Эти три этапа реализованы в доступном программном обеспечении метода КЭ. Согласно теориям потенциалов Хилла (8) и изотропного упрочнения, используемым для моделирования анизотропного поведения циркония, пластическая деформация трубы задается следующим выражением:

$$f\{\sigma\} = \sqrt{\{\sigma\}^T [M] \{\sigma\}} - \sigma_0(\varepsilon^p), \quad (8)$$

где σ_0 – опорный предел текучести; ε^p – эквивалентная пластическая деформация; $[M]$ – матрица свойств материала, определяемая из констант выбранных свойств материала.

Результатом моделирования МКЭ являются поля напряжений и деформаций, а также перемещения в каждой точке созданной модели. Используя встроенные в программный комплекс возможности постпроцессора, построим распределение напряжений и деформаций в объеме материала штампуемой трубы на различных этапах деформации (рис. 14-а и 14-б, на рисунках представлена половина ячейки по её длине).

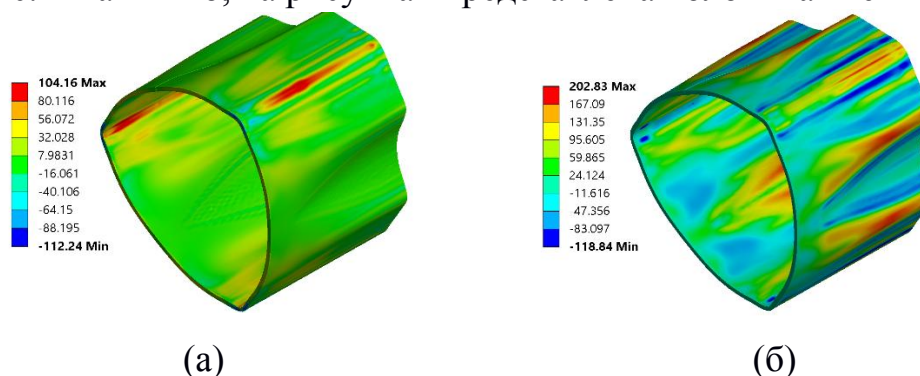


Рисунок 14. Распределения нормальных остаточных тангенциальных (а) и аксиальных (б) напряжения в объеме модели.

Другими важными параметрами элемента решетки являются диаметры вписанной и описанной окружностей ячейки. Первое значение имеет наибольшее значение, поскольку слишком свободная ячейка ДР не удерживает твэл на месте, в то время как слишком узкая может привести к невозможности его установки в ДР. Слишком узкие ячейки также могут поцарапать поверхность оболочечной трубы при установке и привести к снижению её коррозионной стойкости. Описанный диаметр важен для последующей сварки ячеек ДР. Оба диаметра для всех наборов материалов представлены на рис. 15. Диаметры в изотропном варианте со средним пределом текучести считаются нулевым уровнем, остальные диаметры отсчитываются от него.

В процессе работы штамповочной машины оператор, при отклонении размеров ячеек от номинальных, производит стачивание конической поверхности пуансонов одного из типов с целью изменения соотношения хода пуансонов для получения требуемых размеров. Поэтому реальные размеры пуансонов могут существенно отличаться от заданных на чертежах.

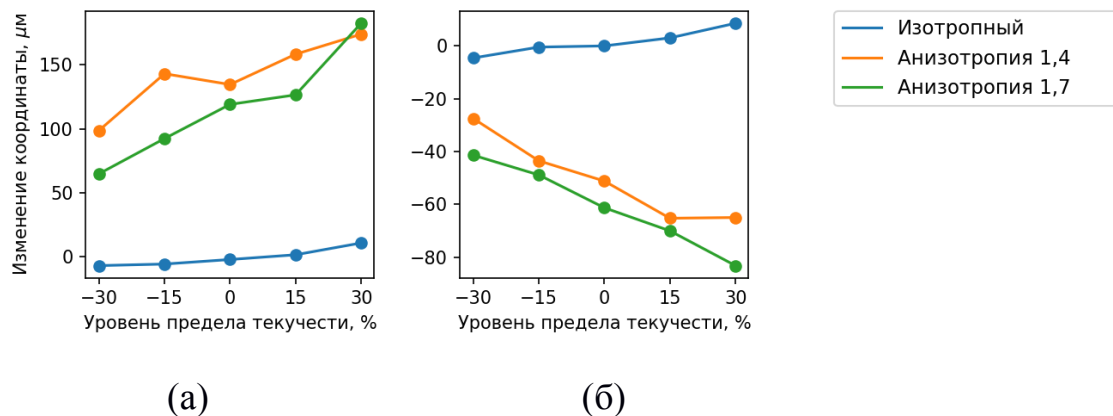


Рисунок 15. Изменения диаметров вписанных (а) и описанных (б) окружностей

сформированной ячейки при варьировании величин пределов текучести и их анизотропии

С целью уменьшения трудоемкости процесса и исключения необходимости доводки инструмента, проведена серия расчетов с различным соотношением ходов пуансонов разного типа: вогнутых и выпуклых. В методе КЭ это делается с помощью изменения граничных условий, налагаемых на контактирующие поверхности. Поскольку запас хода в сторону увеличения усилия в вогнутом пуансоне мал, решено сделать его ход неизменным, а варьировать ход выпуклого пуансона на величину, изменяющуюся в пределах от -0,3 до 0,4 мм через 0,1 мм. При этом, отрицательные значения соответствуют увеличению нагрузки относительно нулевого уровня и наоборот. На графиках (рис. 16) представлены зависимости диаметров вписанных и описанных окружностей в зависимости от изменения хода выпуклого пуансона.

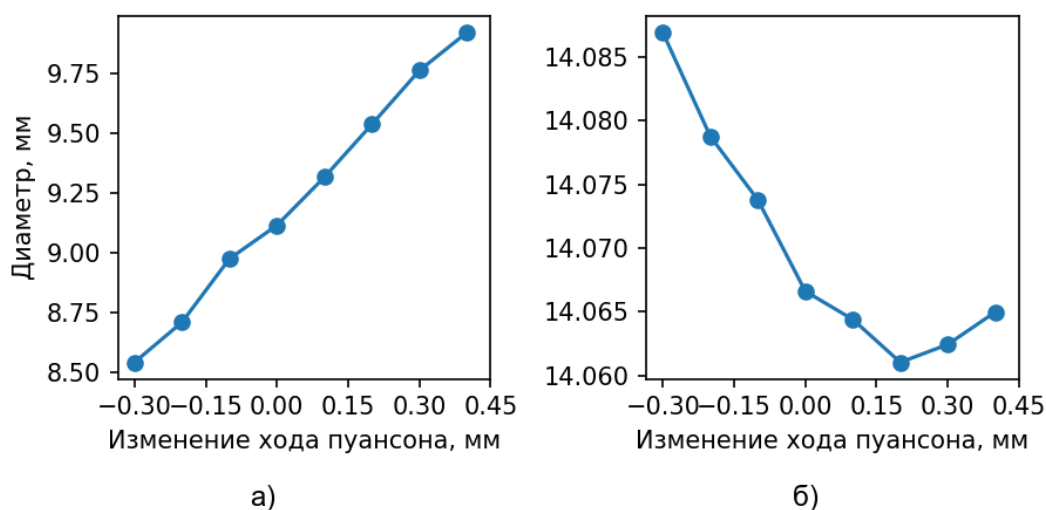


Рисунок 16. Изменения диаметров вписанных (а) и описанных (б) окружностей

сформированной ячейки при варьировании величин хода выпуклого пуансона. При этом,

отрицательные значения изменения хода пуансона соответствуют увеличению нагрузки

относительно нулевого уровня и наоборот

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. На основе свободно распространяемого программного кода DAMASK разработана модель переориентации зерен в результате развития двойникования, использующая алгебру кватернионов и критерий активизации двойникования при достижении критических сдвиговых напряжений в рассматриваемой системе. Для реализации предложенного метода написана программа на языке Python, которая позволяет учитывать также изменения микроструктуры при двойниковании.
2. Разработанная модель, учитывающая двойникование, использована для описания нескольких последовательных этапов холодной прокатки пластин, вырезанных из монокристалла циркония и ориентированных по-разному относительно внешних направлений деформации. Результаты моделирования переориентации монокристаллов, благоприятно ориентированных для активизации двойникования по плоскостям $\{10\bar{1}2\}$ и $\{11\bar{2}1\}$, удовлетворительно совпадают с результатами эксперимента. При этом в деформированном объеме наблюдается дробление структуры, обусловленное распространением двойников.
3. С помощью разработанной модели установлены закономерности текстурообразования в α -цирконии при холодной прокатке монокристаллических и поликристаллических пластин, которые подтверждаются экспериментальными результатами и свидетельствуют о корректности использованной физической модели, заключающейся в выборе активных систем деформации и последующей переориентации за счет скольжения и двойникования.
4. Проведена оценка доли активности разных систем скольжения и двойникования на последовательных этапах пластической деформации при холодной прокатке листов из чистого циркония и малолегированных сплавов на основе циркония. С увеличением степени деформации при прокатке снижается роль двойникования и усиливается доля систем скольжения в процессе переориентации зерен α -циркония. Это связано со снижением доли зерен, благоприятно ориентированных для двойникования, а также с дроблением и повышением искаженности зерен.
5. Продемонстрированы возможности использования разработанного метода в

случае моделирования прокатки труб при варьировании степеней деформации по стенке и диаметру, а также для расчета механических свойств с учетом изменения кристаллографической текстуры в процессе растяжения образцов в различных направлениях. Разработанная модель позволяет также рассчитать контур текучести для изделия, находящегося в разных напряженных состояниях.

6. С целью оптимизации процесса штамповки ячеек дистанционирующей решетки (ДР) из тонкостенных циркониевых (Zr-1 мас.% Nb) труб смоделирован процесс их пластической деформации. Построены конечно-элементные модели трубы и штамповочного инструмента. При проведении расчета использованы данные по коэффициентам анизотропии исходных труб, полученные по результатам текстурного анализа. Для пяти уровней предела текучести, определяющихся структурной неоднородностью материала частично рекристаллизованных труб, и при варьировании коэффициентов их анизотропии показано, что анизотропия свойств приводит к существенному отклонению размеров штампованной ячейки от ее размеров в случае изотропного образца, которое может достигать 150 мкм для наблюдающейся в трубах кристаллографической текстуры. При этом диаметры вписанной и описанной окружностей при варьировании предела текучести на 30% изменяются на 100 мкм.

7. Проведенный тепловой расчет, связанный с выделением энергии пластической деформации ячейки, показал, что максимальная температура около 70°C достигается на внутренней поверхности ребер вблизи пуклевки и очень быстро понижается благодаря высокой теплопроводности материала ячейки, контакту с холодным инструментом и рассеянию тепла в окружающую среду. Величина деформации ячеек за счет термического расширения при рассчитанных температурах не превышает 5%, поэтому нет необходимости учета температурного расширения изделия.

8. По результатам проведенного моделирования сформулированы рекомендации по оптимизации технологии штамповки ячеек ДР, которые позволяют удерживать основные параметры заготовки в необходимых интервалах допусков: диаметры вписанных и описанных окружностей, стрелы прогиба плоских участков ячеек, предназначенных для контактной сварки и т.п. По результатам выполненной работы получен акт о внедрении от ПАО МСЗ (Машиностроительный завод).

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Zhuk, D., Isaenkova, M., Krymskaya, O., & Perlovich, Y. Finite element simulation of microindentation //Russian Metallurgy (Metally). – 2017. – Т. 2017. – №. 5. – С. 390-396.
2. Perlovich, Y., Isaenkova, M., Zhuk, D., & Krymskaya, O. Accessing mechanical properties of superelastic materials from microindentation data by computer modeling // Proceedings of 2016 6th International Workshop on Computer Science and Engineering. – WSCE Publishing, ISBN: 978-981110008-6.
3. Isaenkova, M. G., Perlovich, Y. A., Krymskaya, O. A., & Zhuk, D. I. Determination of mechanical properties from depth-sensing indentation data and results of finite element modeling //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2016. – Т. 130. – №. 1. – С. 012053.
4. Perlovich, Y. A., Isaenkova, M. G., Krymskaya, O. A., & Zhuk, D. I. Thermo-mechanical finite element modeling of shape memory materials' microindentation //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2016. – Т. 130. – №. 1. – С. 012054.
5. Perlovich, Y., Isaenkova, M., Dobrokhotov, P., Zhuk, D., & Rubanov, A. Modeling of Crystallographic Texture Formation in Hot-rolled Sheets of Ferritic Steel //KnE Materials Science. – 2018. – Т. 4. – №. 1. – С. 199-208.
6. Isaenkova, M., Perlovich, Y., Fesenko, V., Stolbov, S., Klyukova, K., Zhuk, D., & Ivanov, A. V. Features of Formation of Crystallographic Texture in Cells of Spacing Grid at their Stamping //KnE Materials Science. – 2018. – Т. 4. – №. 1. – С. 9-19.
7. Isaenkova, M., Perlovich, Y., Efimova, E., Zhuk, D., & Krymskaya, O. Superelasticity of Ti-Nb-Zr Alloys and their Medical Application //Materials Science Forum. – Trans Tech Publications, 2017. – Т. 879. – С. 2561-2566.
8. Isaenkova, M., Perlovich, Y., Zhuk, D., & Krymskaya, O. Crystal plasticity simulation of Zirconium tube rolling using multi-grain representative volume element //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2017. – Т. 1896. – №. 1. – С. 160023.
9. М.Г. Исаенкова, Ю.А. Перлович, О.А. Крымская, Д.И. Жук Учет двойникования при моделировании пластической деформации α -циркония // Принята в печать. Журнал “Цветные металлы”. – 2020. – №. 4.