



核合金的基于晶体塑性模型的集成计算材料模拟研究

马显锋^{1,2*}, 位东辉¹, ALLISON John E.², 王彪^{1*}

1. 中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082;

2. Department of Materials Science and Engineering, University of Michigan, Ann Arbor 48109, USA

*联系人, 王彪, E-mail: wangbiao@mail.sysu.edu.cn; 马显锋, E-mail: maxf6@mail.sysu.edu.cn

收稿日期: 2019-04-12; 接受日期: 2019-05-24; 网络出版日期: 2019-09-18

广东省教育厅青年创新人才项目(编号: 2016KQNCX004, 2016KQNCX005)、国家自然科学基金(编号: 11902370, 11832019)和广东省科技计划(编号: 2019B010943001, 2017B020235001)资助

摘要 核反应堆的核燃料包壳、堆内构件、蒸汽发生器等关键部件均采用耐高温腐蚀、力学性能优异的合金材料制造。合金加工工艺直接影响组织结构, 进而影响其力学、腐蚀和辐照性能。核合金的堆外性能研究是合金适用性评估和改进优化的关键步骤, 因此定量预测核级合金的“加工工艺-微结构-力学性能”具有重要意义。传统的核合金工艺改进与评估主要依赖于实验循环“试错法”, 实验成本高, 研发周期长。基于全过程模拟的集成计算材料工程方法将制造工艺、材料演化与性能模型结合, 显著缩短关键材料及构件的研发周期和成本。为促进该方法在核合金的工艺优化与研发中的应用, 本文发展了基于合金微结构相关的晶体塑性模型和解耦有限元模拟的计算方法, 对锆合金、钛合金和FeCrAl合金的“加工工艺-组织-力学性能”进行了定量预测。结果显示该集成计算方法可精确预测3种典型合金的热加工组织演化、拉伸和压缩塑性变形行为, 可为核级合金的加工工艺优化和力学性能评估提供计算工具和理论依据。

关键词 集成计算材料工程, 晶体塑性模型, 加工工艺, 组织演化, 组织, 核合金

PACS: 47.27.-i, 47.27.Eq, 47.27.Nz, 47.40.Ki, 47.85.Gj

1 引言

核能是当今世界唯一可大规模商业应用的清洁能源。核燃料元件和关键构件的安全性是核反应堆高功率、安全、可持续运行的重要保障。目前, 核燃料元件材料和关键构件材料仍然存在许多问题, 这些问题

导致核反应堆燃料元件等关键部件的寿命降低, 造成反应堆停堆或大修。自2011年日本福岛核泄露事故发生后, 世界范围内更加关注核能安全, 加紧推动更安全耐事故的核燃料元件和关键构件材料的研发^[1,2]。

集成计算材料工程(Integrated Computational Materials Engineering, ICME)^[3]源于2008年美国科学院和

引用格式: 马显锋, 位东辉, Allison J E, 等. 核合金的基于晶体塑性模型的集成计算材料模拟研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 114608
Ma X F, Wei D H, Allison J E, et al. Integrated computational materials engineering simulation studies of nuclear alloys based on crystal plasticity modeling (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2019, 49: 114608, doi: 10.1360/SSPMA-2019-0121

工程院针对当前材料研发问题的倡导, 报告指出“ICME旨在把计算材料科学的工具集成为一个整体系统以加速材料的开发, 改造工程设计的优化过程, 并把设计和制造统一起来”, 希望改变当前材料设计远远落后于产品设计的现状, 从而在实际制作之前就实现材料、制造过程和构件的计算机优化. ICME报告为2011年美国总统奥巴马提出的“材料基因组计划(Materials Genome Initiative, MGI)”^[4]提供了重要基础. 材料基因组计划的目标是“将先进材料的发现、开发、制造和使用的速度提高一倍”, 主要通过集成计算工具平台、实验工具平台、数据库及信息学平台(如图1所示), 实现有效缩短材料的开发周期, 提高材料的研发成功率, 加速新材料在新产品中的使用.

集成计算材料工程自从提出以来, 在航空、车辆等领域已取得了较大的进展和应用. 下面提供几个ICME应用于合金设计的成功案例^[5]: 其一是由Olson和QuesTek公司共同开发的飞机起落架用齿轮钢; 其二是GE开发的燃气涡轮用GTD262高温合金, 合金设计和开发从开始到生产只用了4年时间, 研发经费约为之前同类合金开发成本的1/5左右. 另外, 美国福特公司较早启动“虚拟铸铝发动机(VAC)”计划^[3], 2010年基本完成了对铸铝发动机从材料成分、增强相、几何形状到屈服/疲劳强度分布的全过程预测和优化平台, 使得新款发动机研发成本和研发周期降低了50%, 为福特公司节省了上亿美元研发经费. 我国在2011年香山会议上以“材料科学系统工程”为主题, 探讨了材料基因工程策略. 北京科技大学谢建新院士团队^[6]

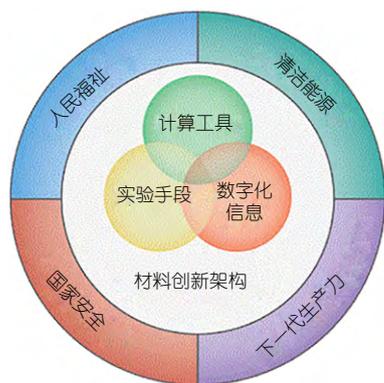


图1 (网络版彩图)材料基因组计划中的材料创新构架的核心内涵^[4]

Figure 1 (Color online) The core idea of materials innovation infrastructure in the Materials Genome Initiative Program [4].

采用集成计算材料工程方法围绕涡轮高温合金的成分设计与开发等领域开展了系统性的探索研究. 中南大学杜勇等人^[7]基于集成材料工程方法提出了新型铝合金的研发框架, 评述了美国弗吉尼亚大学Starke课题组“能适应2.2马赫的高速运输机身用抗蠕变铝合金”研发案例^[8], 阐述了集成计算材料工程在新型铝合金研发中的强大功能. 西安交通大学王栋和王云志^[9]总结了钛合金中的相变机理和计算方法, 通过集成计算材料工程来设计超细、超均匀钛合金微观组织, 证明了改进钛合金微观结构的新方法, 确认了结合相场模拟和集成相图计算以及实验测量的集成计算材料工程方法是研发先进钛合金的有效途径. 中南大学张伟彬等人^[10]论述了第一性原理计算方法、相场模拟计算和各种微观表征方法在硬质合金研发中所发挥的具体作用, 并通过应用实例展示了集成计算材料工程在新型硬质合金研发中的强大功能.

在压水反应堆中, 核燃料包壳、堆内构件、压力容器、蒸汽发生器等关键部件均采用耐高温、耐腐蚀、力学性能优异的先进合金材料制造. 由于核能领域的特殊性, 核材料相比传统材料的实验信息更匮乏, 公开可利用的材料数据库极少, 这使得核材料设计和开发过程中可参照的有价值信息更少, 加之核材料性能评估的周期长、标准严苛, 使得新型核材料的研发面临更大困难和挑战^[11]. 集成计算材料工程将现有成熟的、用于材料微观演化和性能预测的模型和算法结合, 一旦应用于核能领域关键材料, 将可以大大促进核材料的选型、性能评估和研发进度. 以压水堆的核燃料包壳锆合金为例, 锆合金的加工工艺直接影响其微观组织结构, 进而影响合金的力学性能、腐蚀性能和辐照性能^[12]. 彭继华等人^[13]研究了织构对锆合金蠕变性能的影响, 指出织构是锆合金产生蠕变各向异性的主要原因; 再结晶锆合金包壳管具有(0001)基面织构特征时, 应力指数越高, 其蠕变各向异性值越大. Charquet等人^[14]研究了不同织构的锆4合金片状样品的腐蚀性能, 结果表明不同织构的锆4合金在500°C/10.3 MPa蒸汽中腐蚀24 h后的腐蚀增重存在明显差别. 沈保罗等人^[15]研究了锆4合金在室温时的低周疲劳性能发现, 轧向的低周疲劳性能高于横向. 国内外研究指出, 锆4合金的辐照生长率也与织构紧密相关^[16]. 对锆合金管的热处理研究表明, 510°C保温3.5 h后发生再结晶, 且随着退火温度的升高, 锆合金管的抗拉强度

和屈服强度逐渐降低^[12]. 刘鹏等人^[17]研究了热处理对锆合金腐蚀性能的影响, 结果表明不同热处理使得元素固溶或沉淀相对合金微观结构有显著影响, 导致不同退火工艺得到的锆合金耐腐蚀性能存在差异.

尽管集成计算材料工程和材料基因工程方法在核能材料领域的研究起步较晚, 自从2016年我国启动“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点研发计划项目以来, 针对核燃料包壳材料等的研究工作受到广泛重视. Liu等人^[18]针对核能安全对于耐事故(Accident Tolerant Fuel, ATF)包壳的需求, 围绕锆合金和新型包壳合金^[18]开始发展集成计算软件和仿真工具; 针对SiC_f/SiC复合材料^[19]在反应堆环境下的性能需求开展材料研制与性能评估研究. Jiang等人^[20]针对弥散型核燃料板元件基于细观力学和热力学方法考虑了燃料颗粒微结构和损伤特征对燃料板的热力学行为的影响. 卢勇等人^[11]采用第一性原理和CALPHAD技术对U和Pu等锕系元素的多组元热力学数据库、热力学模型等开展了研究.

除了锆合金, 近年兴起的事事故容错燃料致力于提高核燃料元件耐受严重事故的能力, 这对燃料包壳材料的耐高温和耐腐蚀能力提出了更高要求. 目前国内外核工业界和学术界主要围绕包壳耐事故涂层、新型包壳材料展开, 后者如FeCrAl合金、SiC复合材料等. 其中, FeCrAl合金由于优异的塑性加工性能和耐高温力学、腐蚀和辐照性能, 成为事故容错燃料包壳的一种重要候选材料^[21]. FeCrAl合金的热加工对合金的微结构和性能有重要的影响, 热变形过程中产生的位错滑移、攀移和交割等运动使得合金的组织发生显著变化; 开展FeCrAl合金热变形的研究, 对优化材料的组织和提升材料的性能至关重要^[22]. 吴玉超^[23]研究了FeCrAl在不同温度下不同变形量的显微组织, 结果表明变形量越大, 变形温度越高, 对其组织影响越大. Y元素能够显著细化晶粒, 但加入过多不会起到细化的作用. 此外, 钛合金由于耐高温耐腐蚀性能突出, 在核反应堆的蒸汽发生器和一回路线构件等领域有着广泛应用前景. Semiatin等人^[24]针对钛合金的热加工工艺-微观组织开展了系统的研究, 为钛合金的工艺优化以提升高温力学等性能提供了重要参考. 李兴无等人^[25]研究组织对钛合金疲劳性能的影响发现, 低应力区, 双态组织的疲劳性能低于片状组织; 高应力区, 双态组织的疲劳性能高于片状组织. 于腾等人^[26]研究了Ti600

合金在不同组织类型下的疲劳行为, 发现总应变幅相同的条件下, 双态组织的试样具有较长的疲劳寿命.

综上所述, 目前集成计算材料工程方法在核能领域的研究刚刚起步, 亟待发展. 关于核合金的成分设计, 相变规律, 热加工微结构演化, 微结构对力学、腐蚀、辐照性能的影响模型等方面迫切需要开展研究. 考虑到核合金对于核反应堆的重要意义, 基于集成计算材料工程的理念, 结合多物理过程理论模型和计算技术, 发展定量预测评估核合金的“加工工艺-微结构-力学性能”的方法, 将极大改善传统材料研发主要依赖于实验循环“试错法”的不足, 缩短关键构件及材料的研发周期、降低成本.

本文拟在集成计算材料工程的框架下, 从力学和材料学的角度基于核合金微结构相关的晶体塑性模型, 结合跨尺度有限元模拟, 对几种典型核合金材料的“加工工艺-组织-力学性能”关系进行模拟和定量预测, 为核合金的加工工艺优化和力学性能评估提供计算工具和理论依据.

2 核合金的集成计算材料工程模型

集成计算材料工程模型的核心是将第一性原理、分子动力学计算、CALPHAD、相场模拟、晶体模型和有限元分析等多尺度计算方法结合, 再加上先进的实验表征技术, 以加速新材料的设计和使用. 图2给出了集成计算材料工程的基本结构范式, 由于材料成分-组织结构-性能关系复杂, 计算机材料设计、模拟计算、实验表征缺一不可. 从图2中可见, 集成计算材料工程模型依赖于对制造过程、材料热力学、加工工艺、组织演化、组织-性能模型、本构模型等的全链条的精确描述和实验验证, 最终实现产品(材料和构件)的性能优化和创新.

以典型核材料锆合金为例, 作为压水堆燃料包壳材料, 锆合金管是防止核素泄露的第一道屏障, 也是目前世界范围内开展的事事故容错燃料研究的主要改进对象. 根据核工业用锆合金的主要制备工艺流程、微观组织结构演化、性能指标要求, 图3给出了锆合金的集成计算材料工程的主要组成部分. 锆合金的制备工艺包括铸锭、热挤压、冷加工、必要的热处理等. 锆合金的微观组织演化需考虑几点: (1) 铸造过程中相的形成、晶粒和界面特征; (2) 热加工中的组织演化和

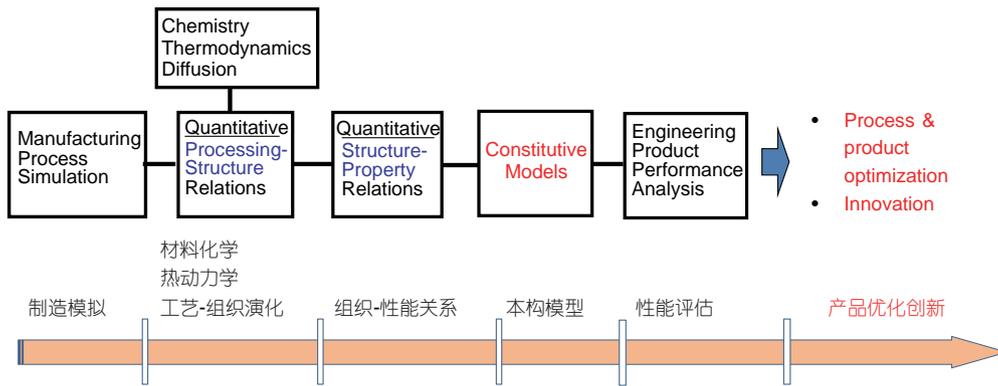


图2 (网络版彩图)集成计算材料工程的主要思想和流程图

Figure 2 (Color online) The primary idea and flow chart of a typical integrated computational materials engineering (ICME) tool.

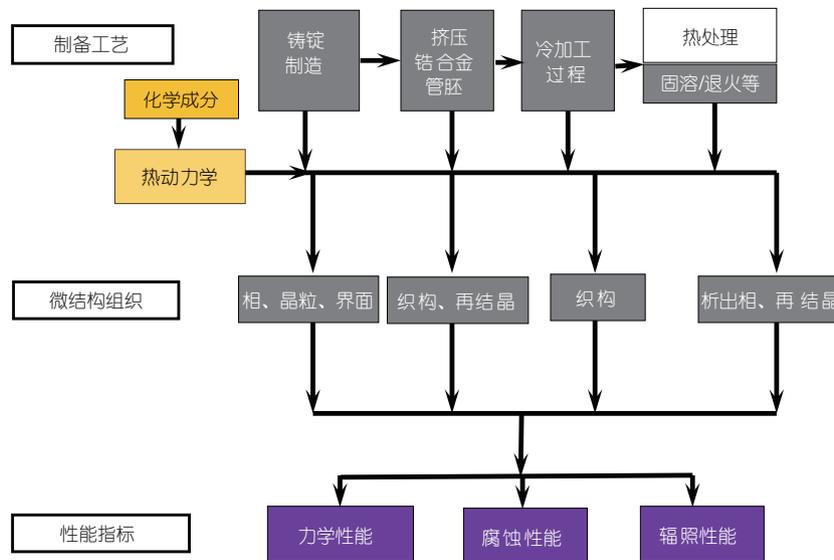


图3 (网络版彩图)锆合金的集成计算材料工程的示意图

Figure 3 (Color online) The schematic map of the main idea of integrated computational materials engineering model for zirconium alloy.

再结晶; (3) 冷加工过程中的组织形成等. 如果考虑服役过程, 还需考虑腐蚀、辐照引起的微观损伤, 在此暂不做详述. 锆合金的关键性能指标包括: 与合金微结构紧密相关的高温力学性能、腐蚀性能和辐射性能. 由于篇幅所限, 本文仅探讨“加工工艺-微结构组织-力学性能”, 其他制备工艺和性能指标的相互影响将在后续工作中再进行介绍.

3 晶体塑性模型和算法

在图2和3所示的集成计算材料工程框架中, 组织-

性能关系模型是精确预测材料和构件力学性能的关键. 由于晶体塑性模型基于晶粒内部滑移和孪生塑性变形机制, 能够方便地与微观尺度(分子动力学、位错动力学)跨尺度交互数据, 同时具备与宏观结构有限元计算进行协同分析. 因此, 本研究选取晶体塑性模型作为核心模型来开展研究^[27].

本文采用的率相关晶体塑性模型基于Peirce等人^[28,29]提出的晶体塑性模型框架. 在外加载荷的作用下, 晶体材料发生的变形包括弹性变形和塑性变形, 其中弹性变形包括弹性伸缩和晶体的刚体转动. 总变形梯度可以分解为两部分, 即

$$F = F^* \cdot F^P, \quad (1)$$

其中, F^* 表示弹性变形的变形梯度, F^P 表示晶体沿滑移面方向的剪切变形所对应的变形梯度. 塑性变形梯度与滑移剪切应变率有关, 关系如下:

$$\dot{F}^P \cdot F^{P-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)}, \quad (2)$$

其中, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 表示第 α 个滑移系的滑移剪切率, $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ 表示第 α 个滑移系滑移方向的单位向量, $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 表示第 α 个滑移系滑移面的单位法向量, 并且对所有开动的滑移系求和. 由于晶体发生变形, 滑移系滑移方向向量 $\mathbf{s}^{*(\alpha)}$ 和滑移系滑移面的法向量 $\mathbf{m}^{*(\alpha)}$ 可以表示为

$$\mathbf{s}^{*(\alpha)} = F^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}, \quad (3)$$

$$\mathbf{m}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot F^{*-1}. \quad (4)$$

基于Schmid法则, 第 α 个滑移系的滑移剪切率和分切应力的关系如下:

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} f^{(\alpha)}(\tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)}), \quad (5)$$

$$f^{(\alpha)}(x) = x |x|^{n-1}, \quad (6)$$

式中, $\dot{a}^{(\alpha)}$ 为参考剪切应变率, $\tau^{(\alpha)}$ 为滑移系 α 上的剪切应力, $g^{(\alpha)}$ 为滑移系 α 的硬化规律. $g^{(\alpha)}$ 的演化由下列规律给出:

$$g^{(\alpha)} = g_0 + kd^{-b} + \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} |\Delta\gamma^{\beta}|, \quad (7)$$

其中,

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \dot{\gamma}}{\tau_s - \tau_0} \right|, \quad (\text{对}\alpha\text{不求和}), \quad (8)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt, \quad (9)$$

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma), \quad (\alpha \neq \beta), \quad (10)$$

式中, $h_{\alpha\beta}$ 为硬化系数, 它决定了滑移系 β 中的滑移剪切量对滑移系 α 所造成的硬化. 注意到式(7)中引入了微结构特征尺寸 d 对于滑移强度的影响, 用以考虑合金的晶粒尺寸和相尺寸等类Hall-Petch行为^[30]. 更多关于晶体塑性的理论介绍可参见文献[30].

根据合金材料的不同可以选用不同的硬化律模型, 例如用于部分fcc和bcc材料的指数硬化模型如下:

$$h^{\alpha} = h_0^{\alpha} (1 - g_0^{\alpha} / g_s^{\alpha})^{n^{\alpha}}, \quad (11)$$

其中, h_0^{α} 为初始硬化率, g_0^{α} 为初始临界剪切力, g_s^{α} 是稳态临界剪切力, n^{α} 为硬化指数. 在从单晶体塑性到多晶体塑性的计算方面, 主要有基于等应变的Taylor假设、等应力假设、晶体塑性有限元方法、自洽模型(Self-Consistent)方法^[31]. 弹塑性自洽模型假设每个晶粒都是椭球体夹杂深埋在无限大的各向同性的均匀介质里, 根据Eshelby解^[32]可求解每个晶粒和无限大基体介质之间的交互作用. 关于如何根据自洽模型由宏观变形梯度张量计算各晶粒的局部变形, 可以参考Tang等人^[33]基于EPSC模型的镁合金变形与织构研究工作.

晶体在变形过程中会发生晶格转动, 对于多晶体而言则会形成变形织构. 采用Bunge欧拉角(ψ, θ, φ)定义, 样品宏观坐标系与晶体坐标系之间满足旋转矩阵 \mathbf{Q} :

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \cos\psi \cos\varphi - \sin\psi \sin\varphi \cos\theta & \sin\psi \cos\varphi + \cos\psi \sin\varphi \cos\theta & \sin\varphi \sin\theta \\ -\cos\psi \sin\varphi - \sin\psi \cos\varphi \cos\theta & -\sin\psi \sin\varphi + \cos\psi \cos\varphi \cos\theta & \cos\varphi \sin\theta \\ \sin\psi \sin\theta & -\cos\psi \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}. \quad (12)$$

在变形过程中, 滑移引起的晶向取向改变可按按下式计算^[33]:

$$\mathbf{Q}_n = \left[I + \left(W - \sum_{\alpha=1}^n R^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \Delta t \right] \mathbf{Q}_{n-1}. \quad (13)$$

在孪晶变形计算中, 将其视为伪滑移系处理, 即考虑孪晶极性只能够沿着孪晶方向单向进行, 不像滑移系可以双向滑动. 本文采用主导孪晶系旋转PTR模型

来计算孪晶对于晶格转动的贡献, 基于Tomé等人^[31]所提出的模型. 在每一个计算步中, 晶粒 n 内各孪晶系 α 的孪晶百分数 $\Delta V^{\alpha,n}$ 按下式计算:

$$\Delta V^{\alpha,n} = \frac{\Delta\gamma^{\alpha,n}}{\gamma_c}, \quad (14)$$

其中, $\Delta\gamma^{\alpha,n}$ 为孪晶系 α 的剪切应变, γ_c 为孪晶系的特征剪切应变, 按下式给出:

$$\gamma_c = \frac{1.732}{c/a} - \frac{c/a}{1.732}, \quad (15)$$

其中, c 和 a 分别为密排六方晶格常数.

各增量步结束时对各孪晶系的孪晶分数叠加得到最终晶粒内总孪晶百分数为

$$V_R = \sum_{\text{steps}} \sum_{\alpha, n} \Delta V^{\alpha, n}. \quad (16)$$

如果最活跃孪晶系的累积孪晶百分数超过门槛值 F_0 , 则整个晶粒就按照孪晶系取向进行转动, 同时将已发生旋转的孪晶百分数计入有效孪晶百分数, 更新孪晶门槛值. 孪晶引起的晶粒取向旋转矩阵 \mathbf{Q}_{twin} 按下式计算:

$$\mathbf{Q}_{\text{twin}} = (2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{I})\mathbf{Q}, \quad (17)$$

其中, \mathbf{n} 是该孪晶系的法向, \mathbf{I} 为标准单位矩阵.

4 应用1: 锆合金的变形曲线与织构

锆合金包壳管在热挤压和冷拉拔过程中都会产生显著的塑性变形和晶粒转动, 其大变形行为和相应的织构演化是锆合金加工工艺中的关键考量. 因此, 本文将对锆合金的挤压变形和相应织构演化进行模拟, 以验证本文发展的ICME-CP计算模型的预测能力.

锆合金 c/a 轴比为1.593 (<1.732), 柱面滑移 $\{10\cdot10\} \langle 1120 \rangle$ 是其最易开启的滑移系. 在室温至相变温度 1100 K 范围内变形, 都可以观察到柱面滑移的开动. 然而, $\{10\cdot10\} \langle 1120 \rangle$ 滑移系只能提供两个独立的滑移系^[34]. Taylor原则指出, 多晶体要产生连续的任意的应变, 需至少开启5个独立滑移系, 因此还需要其他滑移系如基面 $\langle a \rangle$ 滑移、锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移和孪晶开启来协调塑性变形(图4). 锥面 $\langle c+a \rangle$ 位错不仅可提供足够多的独立滑移系, 而且能产生沿 c 轴方向应变, 因此锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移非常有利于hcp金属锆合金和钛合金的塑性加工. 当晶体取向不利滑移发生时, 孪晶开启会协调应变, 同时也会产生 c 轴方向应变.

图5是Xu等人^[35]报道的Zr-2合金变形织构实验结果, 将用于对比验证本文的模型预测. 由图5可见, 初始锆合金具备一定的(0001)基面织构. 经过辊压之后, 从(0001)极图的晶向分布可见, 锆合金在TD方向的拉伸和压缩织构表现出各向异性.

下面我们将采用晶体塑性模型对Zr-2合金的单向

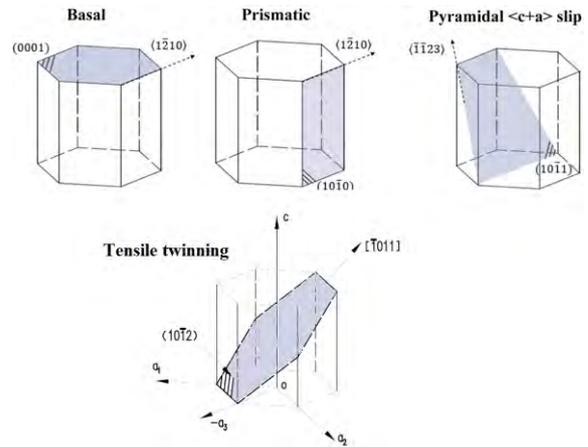


图4 (网络版彩图) 锆合金中的主要滑移系和拉伸孪晶系
Figure 4 (Color online) The schematic of primary slip systems and twinning systems in hcp metallic alloys.

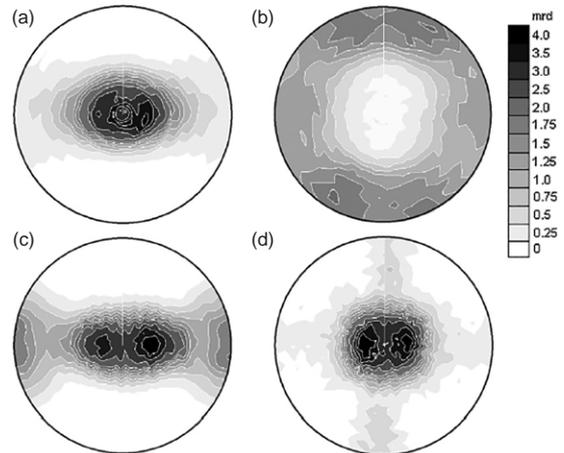


图5 锆合金的变形织构演化实验结果. (a) 初始(0001)织构; (b) 初始(10-10)织构; (c) TD方向拉伸织构; (d) TD方向压缩织构^[35]

Figure 5 The experimental results of texture evolution in zirconium alloy. (a) Initial (0001) texture; (b) initial (10-10) texture; (c) deformation texture by tension along TD; (d) deformation texture by compression along TD.

拉伸和压缩变形以及相应的织构演化进行预测. 考虑锆合金变形过程中的柱面 $\langle a \rangle$ 、基面 $\langle a \rangle$ 、锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移变形机制和拉伸孪晶变形机制(图4). 锆合金弹性常数为 $C_{11}=143.5$ GPa, $C_{33}=164.9$ GPa, $C_{44}=32.1$ GPa, $C_{12}=72.5$ GPa, $C_{13}=65.4$ GPa^[35]. 模拟所采用的晶体塑性模型主要参数见下表1所示.

通过采样法生成锆合金辊压前的初始织构, 如图6(a)所示, 这与图5的实验织构^[35]一致. 建立由1024个晶粒组成的立方体代表体积单元, 每个晶粒初始取向按照

表1 晶体塑性计算模型主要参数列表

Table 1 List of primary parameters for crystal plasticity model

变形模式	g_0 (MPa)	g_1 (MPa)	θ_0	θ_1	Latent			
					$q^{\alpha Ba}$	$q^{\alpha Pr}$	$q^{\alpha Py}$	$q^{\alpha Tw}$
Basal	170	11	33	39	1	1	1	1
Prismatic	114	43	132	0	2	1	1	9
Pyramidal	341	77	2420	308	1	1	2	1
Twinning	350	98	3864	3000	1	1	1	2

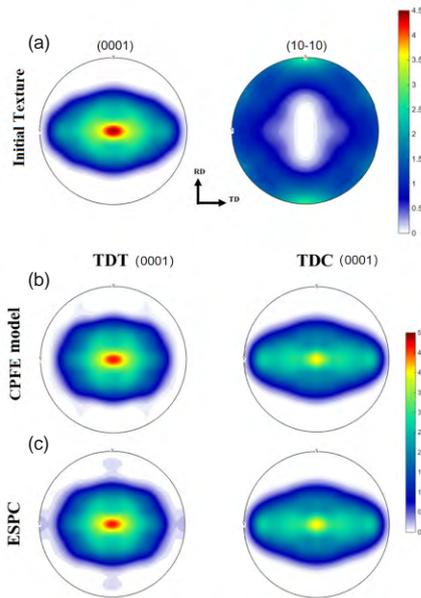


图6 (网络版彩图) 锆合金的组织演化. (a) 初始组织; (b) CPFE模型预测TD拉伸和压缩的(0001)极图; (c) EPSC晶体塑性模型预测TD拉伸和压缩的(0001)极图

Figure 6 (Color online) The texture evolution in zirconium alloy. (a) Initial (0001) and (10-10) texture; (b) CPFE model predicted (0001) pole figure after tension and compression along TD; (c) EPSC model predicted (0001) pole figure after tension and compression along TD.

图6(a)赋值, 采用位移边界控制进行单轴拉伸或压缩, 固定角点防止刚体运动. 沿TD方向进行大变形单向拉伸或单向压缩后, 晶体塑性模拟预测的锆合金变形组织结构结果分别如图6(b)和(c)所示. 此处采用了晶体塑性有限元CPFE和弹塑性自洽EPSC两种模拟方法, 前者主要采用有限元网格代表晶粒与晶体塑性结合来计算各晶粒的应变; 后者采用弹塑性自洽(Self-Consistent)方法^[31], 与Tang等人^[33]EPSC模型计算框架一致. 从图中可见, TD方向拉伸后的基面结构非常显著, 压缩组织结构相对较弱, 两种模型预测结果非常相近, 与实验组织

一致, EPSC对左右两织构分量预测稍好. 本文模拟结果与文献[36]中采用弹塑性自洽晶体塑性模拟结果一致. 一般来说, CPFE模型将每个晶粒模拟为一个或若干个网格单元, 计算精度高, 但效率低; EPSC模型由于单个积分点处可模拟若干个晶粒, 能更有效模拟组织演化, 在大规模计算中优势更明显.

在锆合金的拉伸和压缩变形方面, 图7给出了晶体塑性有限元模拟结果与相应的拉伸和压缩实验曲线^[35]的比较. 由图7可见, CPFE和EPSC两个模型均能很好地预测锆合金沿辊压方向(RD)和横向(TD)在拉伸和压缩载荷下的屈服和塑性应变硬化行为. 以上模拟结果显示, 本文晶体塑性模型不仅可以精确预测锆合金的组织演化, 对拉伸和压缩过程中相应的应力应变行为也具有较高的预测精度.

5 应用2: 钛合金的热挤压-组织-力学性能

5.1 钛合金的热挤压组织模拟

钛合金在压水堆蒸汽发生器管道和一回路构件中有着重要的潜在应用, 也是小型模块堆的关键材料之一. 钛合金与锆合金存在相似之处, 同属hcp晶系, 而且在热加工和冷却过程中可能发生 β 向 α 的相变^[37]. 下面将考虑近 α 钛合金在热挤压过程中的组织演化行为. 图8(a)给出的是钛合金的初始组织, 接近随机组织特征. 经过850°C热挤压变形($R=14$)后, EBSD大面积扫描给出组织如图8(b)所示, 可见hcp金属中常见的(10-10)组织, 这是由于基面滑移和柱面滑移造成的. 此外, 热挤压钛合金还具有显著的(0001)基面组织, 对于该组织成因将在后续详述.

为了预测钛合金热挤压形成的组织, 需要充分考虑钛合金在高温下的变形组织, 并且考虑冷却过程中

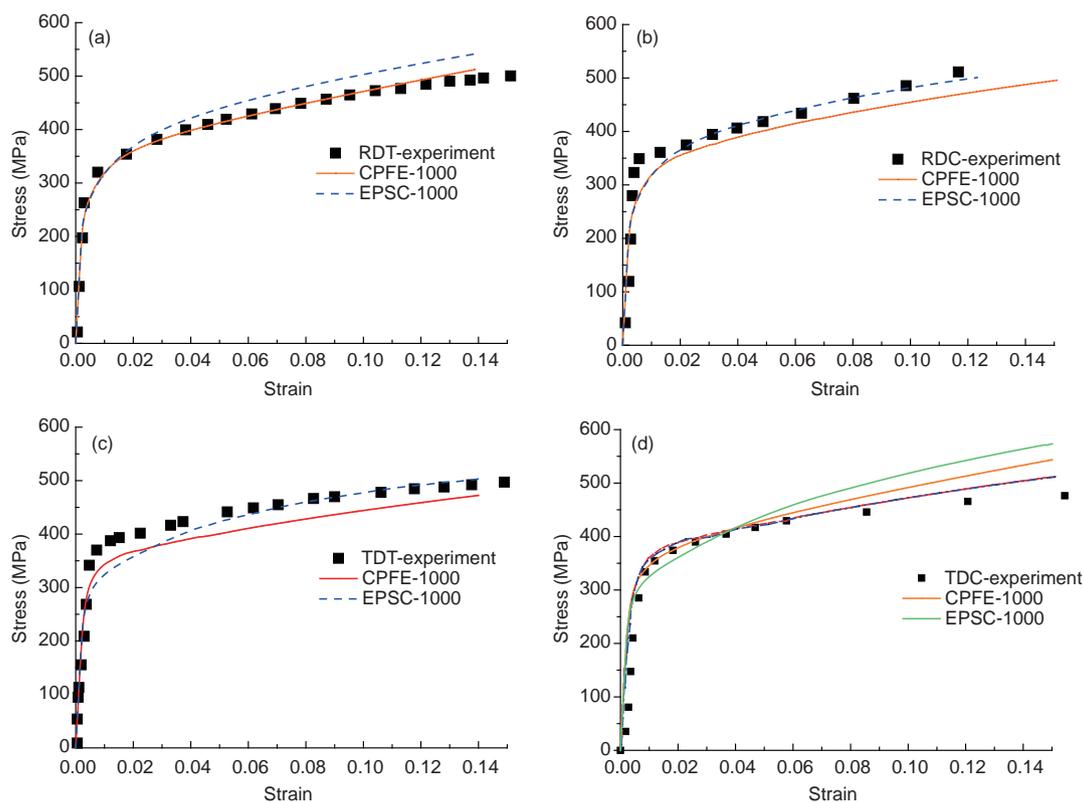


图7 (网络版彩图) 锆合金的实验应力应变曲线和晶体塑性模型(CPFE, EPSC)预测. (a) RD拉伸曲线; (b) RD压缩曲线; (c) TD拉伸曲线; (d) TD压缩曲线

Figure 7 (Color online) The experimental and predicted (CPFE, EPSC) stress-strain curves of zirconium alloy. (a) Tensile curve along RD; (b) compressive curve along RD; (c) tensile curve along TD; (d) compressive curve along TD.

的 β - α 相变对组织的影响. 首先, 对合金锭整体实施热挤压过程进行晶体塑性有限元模拟的计算量太大, 因此, 本文采用了图9所示的解耦有限元-晶体塑性模拟方法. 具体而言, 采用唯象的有限元模拟获得热挤压件的应变特征和应变/应力-时间历史曲线, 作为晶体塑性模拟的边界条件输入. 晶体塑性模型采用1024个晶粒代表体积单元, 初始晶粒取向基于图8采样赋值, 模拟挤压变形的边界条件如图9(c)所示.

钛合金在高温下的变形组织包括 β 和 α 相的变形组织, 二者的百分比可由该合金 β 相平衡曲线获得^[38]. 高温变形时, β 相倾向于形成沿挤压方向 $\{110\}$ 结构//ED, 而 α 相倾向于形成沿挤压方向 $\{10-10\}$ 结构//ED. 因此, 如果仅仅考虑 α 相的变形组织, 将只能得到图8(b)中的 $\{10-10\}$ 结构, 而无法解释图8(b)的 $\{0001\}$ 基面结构. 注意到, 在热挤压后的冷却过程中, 将会发生 β 相向 α 相的转变, 此时高温 β 相变组织将会演化为相应的 α 相变组织. 已有的研究表明, β 相和转变的 α 相之间满足Bur-

gers晶向关系, 即 $(0001)\alpha \parallel (110)\beta$ 和 $[2110]\alpha \parallel [111]\beta$ ^[39]. 由于 β 相高温变形组织为 $\{011\}$ 高强度, 可以预见 α 相变组织将具有 $\{0001\}$ 高强度, 这将成为图8(a)的 α 相 $\{0001\}$ 组织的重要形成原因.

然而, 由于 α 和 β 相的晶体学对称性, 发生相变前后二者的晶体取向关系有12种可能性, 即存在12种 α 相变体. 通常情况下, 热挤压温度、变形、材料组织特征等都可能影响相变过程, 使得12种相变变体并非等概率发生, 即发生择优相变, 这将使得 α 相变组织的某些分量得以强化, 另一些分量被削弱. 通过系统比较文献中常见的5种相变变体准则, 本文最终选用基于 β 相 $\{011\}$ 方向优先的变体准则^[40], 按此对晶体塑性模拟得到的高温 β 相组织进行转化, 得到转变之后的 α 相变组织. α 相变组织和 α 相高温变形组织加权求和, 即可得到最终的钛合金 α 热挤压组织.

晶体塑性模型预测结果与实验结果对照如图10所示. 值得一提的是, 钛合金圆棒的热挤压组织具有中心

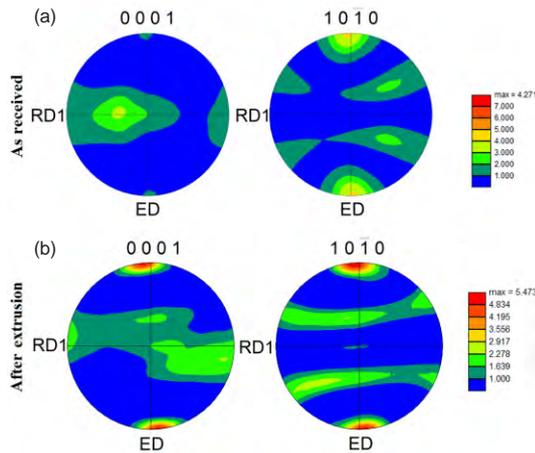


图8 (网络版彩图) 钛合金的实验织构演化. (a) 初始织构; (b) 热挤压织构
Figure 8 (Color online) The experimental textures of zirconium alloy. (a) Initial texture of (0001) and (10-10) pole figures; (b) hot extruded texture of (0001) and (10-10) pole figures.

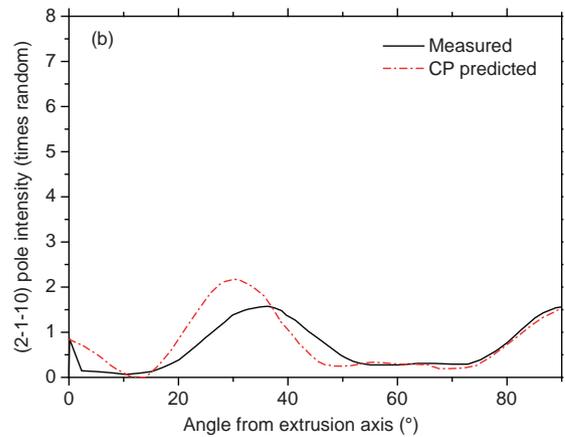
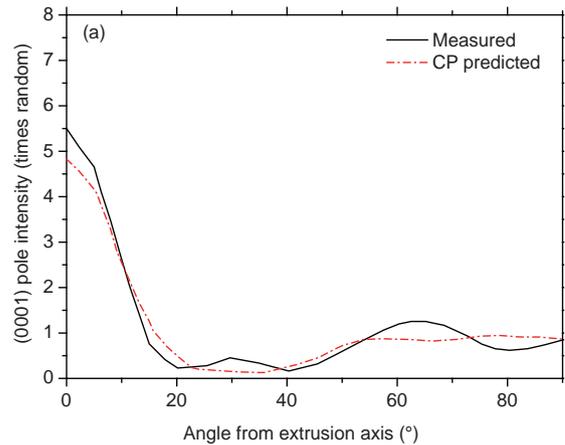


图10 (网络版彩图) 钛合金的晶体塑性模型预测织构与实验织构的强度分布定量比较
Figure 10 (Color online) The crystal plasticity model predicted texture compared against the experimental texture intensity.

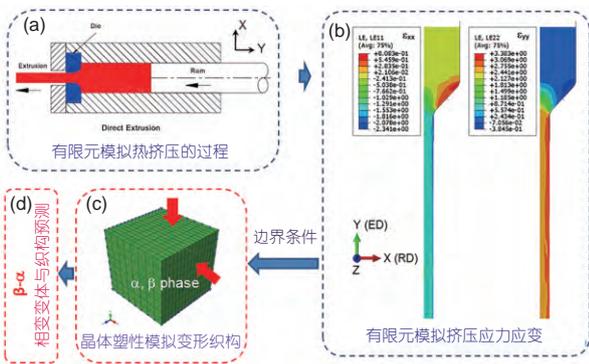


图9 (网络版彩图) 钛合金热挤压冷却后的织构演化模拟流程
Figure 9 (Color online) The simulation procedure for the texture evolution of zirconium alloy due to extrusion and cooling down [37].

对称性, 为便于比较, 图10给出的是(0001)和(2-1-10)织构在偏离ED不同方向上的织构强度分布比较. 可见, 本文模型预测结果与EBSD实验测试织构非常接近, 显示出很高的模型预测精度, 这表明本模型对于钛合金复杂变形-相变过程织构演化的预测能力. 最后, 由于锆合金与钛合金在晶体结构、加工工艺、相变机制方面的相似性, 本模拟方法对锆合金的热加工也完全适用^[38].

5.2 钛合金的力学性能预测

在5.1节研究钛合金“加工工艺-织构”基础上, 本节

将探讨“微结构-力学性能”关系. 钛合金和锆合金的显微组织对热加工和热处理很敏感, 容易形成单相等轴晶、双相组织(Bimodal)、板条状组织(Lamellar)等微结构特征. 此处以钛合金为例, 通过改变热处理的固溶温度和冷却速率可以获得一系列钛合金的典型微观组织, 如图11所示. 图11(a)为双相基态组织(Base), 图11(b)-(d)分别为经过炉冷(FC)、空冷(AC)和水冷(WQ)获得的粗板条组织、中板条组织、细板条组织. 图12为这几种典型微观组织对应的拉伸应力应变曲线.

图13给出的是钛合金双相组织的 α_p 晶粒和 $\alpha+\beta$ 板条晶粒分别采用的滑移系. 其中, α_p 晶粒为hcp结构, 因此主要考虑了3个基面 $\langle a \rangle$ 滑移、3个柱面 $\langle a \rangle$ 滑移、6个锥面 $\langle a \rangle$ 滑移和12个锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移. $\alpha+\beta$ 板条

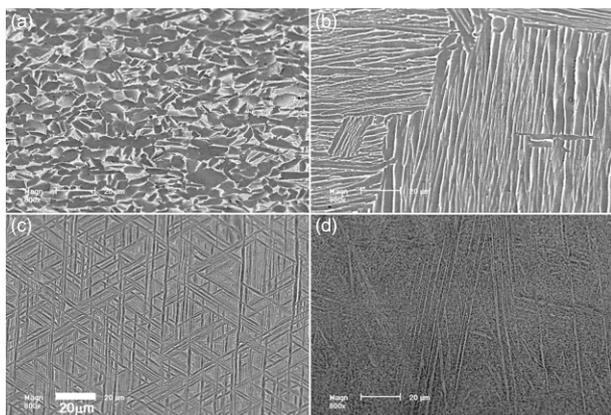


图 11 钛合金的典型微观组织。(a) 双相基态组织; (b) 粗板条组织; (c) 中板条组织; (d) 细板条组织^[37]

Figure 11 Typical microstructures of titanium alloys. (a) Bimodal base microstructure; (b) coarse lamellar microstructure; (c) mediate lamellar microstructure; (d) fine lamellar microstructure [37].

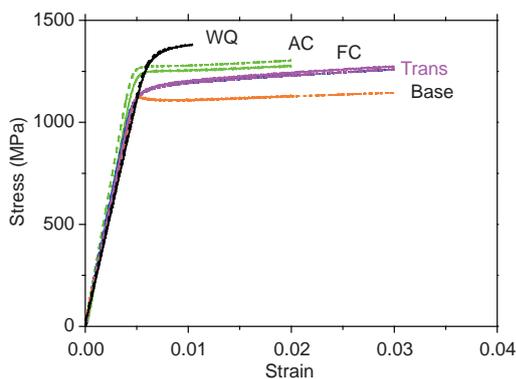


图 12 (网络版彩图)钛合金的典型微观组织对拉伸性能的影响。细板条组织(WQ), 中板条组织(AC), 粗板条组织(FC), 过渡区双相组织(Trans), 双相基态组织(Base)

Figure 12 (Color online) Effect of typical microstructures (WQ, AC, FC, Trans, Base) on the tensile properties of titanium alloys.

晶粒的计算略为复杂, 需要特别考虑. 因为如果将 α 和 β 板条在有限元几何模型中显式绘制网格, 将带来极大的计算工作量, 因此, 本文将 $\alpha+\beta$ 板条晶粒视为均匀相, 采取了等效晶体滑移的方法^[30], 根据bcc- β 相和hcp- α 相符合Burges晶格关系, 将bcc滑移系映射到hcp晶格中予以考虑, 考虑的4组滑移系见图13所示.

采用统一的晶体塑性模型, 以基态双相组织(Base, α_p 晶粒含量约35%)、粗板条组织(FC)、中板条组织(AC)、细板条组织(WQ)校验晶体塑性模型之后(图14), 可以很好地预测Trans双相组织(α_p 含量约10%)的拉伸塑性硬化行为. 结果显示, 本文晶体塑性模型对考查的

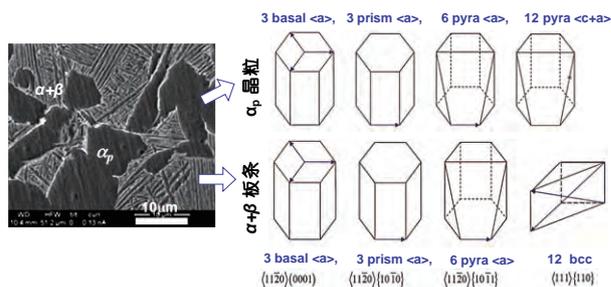


图 13 (网络版彩图)钛合金的双相微结构相关的滑移系设定

Figure 13 (Color online) Slip systems for titanium alloy with bimodal microstructure consisting of primary α and $\alpha+\beta$ lamellae.

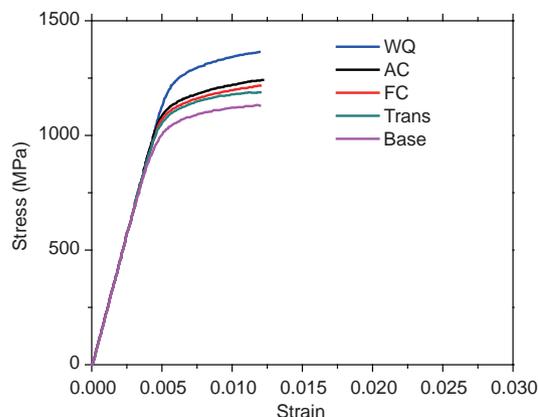


图 14 (网络版彩图)钛合金的微结构相关的拉伸应力-应变曲线模拟与预测

Figure 14 (Color online) Microstructure-dependent tensile stress-strain curves of titanium alloys: model prediction.

5种典型组织的钛合金的拉伸塑性变形行为均具有很好的预测精度. 这也表明了本文的晶体塑性模型可以描述晶粒/板条尺寸、相百分比、织构等微结构参数对钛合金力学性能的影响.

考虑到钛合金热加工和微结构的复杂性, 以上模型可直接用于更简单材料体系的材料热加工和塑性变形行为的预测, 例如高温合金和不锈钢等材料的冷热加工变形织构、再结晶、弹塑性和循环塑性行为等.

6 应用3: FeCrAl合金辊压-织构-力学性能

FeCrAl合金作为耐事故核燃料包壳候选材料, 通常需要经过多步加工过程来引入变形织构, 在改善微结构的同时提升材料强度. FeCrAl在中低温下为bcc晶

体结构, 本文考虑bcc晶体在辊压变形过程中起主导作用的滑移系为: 12个 $\langle 111 \rangle \{110\}$ 和12个 $\langle 112 \rangle \{110\}$ ^[41]. FeCrAl合金的初始铸态组织较粗大, 组织接近随机组织. 在800°C下进行辊压, 辊压厚度减少到40%, 辊压后对FeCrAl板进行EBSD测试变形组织如图15所示, 可见典型的bcc辊压(011)结构.

采用晶体塑性有限元方法进行模拟, 辊压时合金板的宽度方向受到约束, 板的变形接近平面应变模式^[41], 从而使得合金板沿着辊压方向伸长. 模拟时, 采用1024个晶粒的代表体积单元, FeCrAl板的初始结构根据实验结果采用随机组织, 位移控制辊压变形量, 采用对称边界条件和角点控制刚体位移. 采用的弹性常数为 $C_{11}=230$ GPa, $C_{12}=135$ GPa, $C_{44}=117$ GPa^[41]. 因辊压温度较低, 不考虑相变发生. 组织模拟时, 晶体塑性模型参数参照铁素体低碳钢的参数^[42]按铸态合金拉伸曲线拟合确定. 晶体塑性模拟组织如图16所示, 基本预测了图15实验组织的基本特征.

对铸态和辊压后的FeCrAl合金板分别加工成拉伸试样, 采用位移控制加载, 获得拉伸曲线如图17中的粗线所示. 可见, 经过热辊压之后, FeCrAl合金板的屈服极限和流动应力有了显著提升, 应变硬化明显. 采用晶

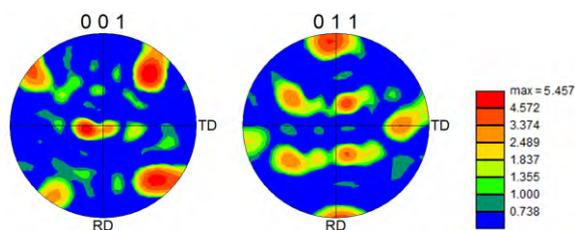


图 15 (网络版彩图)EBSD实验测得的FeCrAl合金的辊压变形组织

Figure 15 (Color online) The experimental texture of hot rolled FeCrAl alloys by EBSD scan.

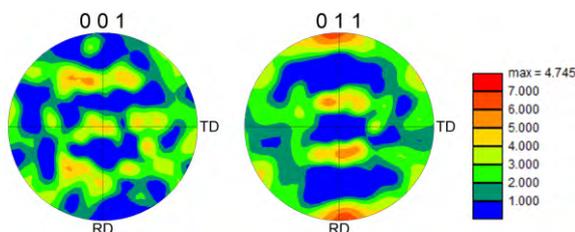


图 16 (网络版彩图)采用晶体塑性模型预测的FeCrAl合金辊压组织

Figure 16 (Color online) The hot rolled texture of FeCrAl alloy: crystal plastic model prediction.

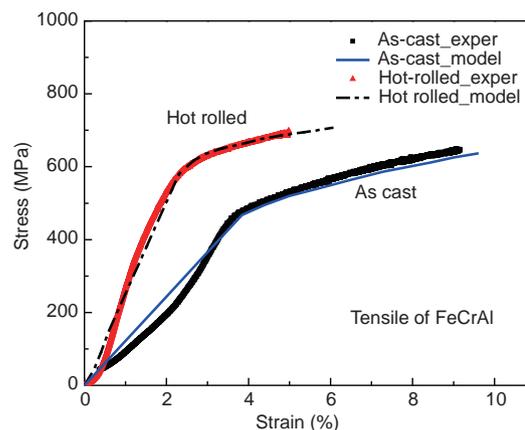


图 17 (网络版彩图)FeCrAl合金(铸态、热轧态)的拉伸应力-应变曲线: 实验结果和预测结果

Figure 17 (Color online) Tensile stress-strain curves of as-cast and hot rolled FeCrAl alloys: simulation and prediction.

体塑性模型根据二者的组织特征分别建立有限元模型, 采用1024个晶粒代表体积单元, 开展位移边界控制的单轴拉伸变形. 铸态样品的晶粒按随机组织输入, 热辊压轧样品的晶粒取向采用上一步组织模拟所得晶粒取向数据作为输入. 预测的铸态合金和辊压态合金的拉伸曲线如图17中的细线所示, 结果表明, 本文模型可以较好地预测热加工前后的材料变形行为.

综合以上3种典型合金的应用实例可见, 本文发展的晶体塑性模型和有限元结合计算方法, 可以很好地预测hcp和bcc合金在热加工过程中的组织演化(包括相变等微观过程), 并能精确预测热变形和热加工后样品的基本力学性能. 该模型目前正被用于不同晶系合金在疲劳和蠕变载荷下的塑性行为预测, 将在后续工作中报道.

7 结语

本文将近年来国际流行的集成计算材料工程方法应用于核领域关键合金材料的“工艺-微结构-性能”研究, 包括锆合金、钛合金和FeCrAl合金, 取得了较好的预测效果. 基于发展的微结构相关的晶体塑性模型, 结合解耦有限元模拟, 对3种核合金的“加工工艺-微结构-力学性能”进行了定量预测, 结果显示本文基于晶体塑性模型的集成计算工具可以对典型核合金在冷热加工过程中的组织等微结构演化进行精确预测; 同时, 对具有不同典型微观结构的合金的拉伸/压缩曲线和

塑性行为预测与实验结果吻合. 本文表明基于晶体塑性模型的集成计算材料模拟可以作为先进核能合金工艺优化与性能预测的有效方法和思路.

集成计算材料模型包含制造、材料、力学、结构多个模块, 同时涵盖了从原子尺度、晶格尺度、晶粒尺度到实际宏观结构的跨尺度计算. 本文的研究工作

主要着眼于晶粒尺度相关的材料微结构演化和力学行为. 在后续工作中, 该模型将拓展与相邻尺度模型结果进行数据交互, 同时进一步考虑微结构对于合金的腐蚀和辐照性能的影响, 才能实现面向核用合金力学、腐蚀、辐照性能的合金工艺优化, 为新型核合金材料的开发与设计提供更强大的计算工具.

致谢 感谢中山大学国防培育项目资助. 本文钛合金研究工作基于会议文章ICONE25-67989的部分内容扩展.

参考文献

- Bai G H, Chen Z L, Zhang Y W, et al. Research progress of coating on zirconium alloy for nuclear fuel cladding (in Chinese). *Rare Metal Mater Eng*, 2017, 46: 2035–2040 [柏广海, 陈志林, 张晏玮, 等. 核燃料包壳锆合金表面涂层研究进展. *稀有金属材料与工程*, 2017, 46: 2035–2040]
- Wu Y W, He X J, Zhang J L, et al. CrAl-based high-temperature coatings on zirconium alloy and oxidation behavior (in Chinese). *Surf Tech*, 2018, 47: 34–41 [吴亚文, 贺秀杰, 张继龙, 等. 锆合金表面CrAl基耐高温涂层及氧化行为研究. *表面技术*, 2018, 47: 34–41]
- Allison J E. *Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security*. Washington, DC: The National Academies Press, 2008. 1–138
- Materials Genome Initiative for Global Competitiveness. Washington, DC: Executive Office of the President, National Science And Technology Council, 2011. [Http://https://mgi.gov/sites/default/files/documents/materials_genome_initiative-final.pdf](http://https://mgi.gov/sites/default/files/documents/materials_genome_initiative-final.pdf)
- National Research Council. *Application of Lightweighting Technology in Military Aircraft, Vessels and Vehicles*. Washington, DC: The National Academies Press, 2012. 118–119
- Yin H Q, Qu X H, Xie J X. Application and development analysis of Materials Genome Initiative in Beijing district (in Chinese). *Adv Mater Indust*, 2014, 1: 27–29 [尹海清, 曲选辉, 谢建新. 材料基因组计划在北京地区的实施与发展分析. *新材料产业*, 2014, 1: 27–29]
- Du Y, Li K, Zhao P Z, et al. Integrated computational materials engineering (ICME) for developing aluminum alloys (in Chinese). *J Aeronaut Mater*, 2017, 37: 1–17 [杜勇, 李凯, 赵丕植, 等. 研发铝合金的集成计算材料工程. *航空材料学报*, 2017, 37: 1–17]
- Zhu A W, Gable B M, Shiflet G J, et al. The intelligent design of age hardenable wrought aluminum alloys. *Adv Eng Mater*, 2002, 4: 839–846
- Wang D, Wang Y Z. Progress in ICME approach to design of novel microstructures for Ti-alloys (in Chinese). *Mater China*, 2015, 34: 282–288 [王栋, 王云志. 集成计算材料工程在钛合金微观结构设计中应用的进展. *中国材料进展*, 2015, 34: 282–288]
- Zhang W B, Du Y, Peng Y B, et al. Integrated computational materials engineering (ICME) for developing the cemented carbides (in Chinese). *Mater Sci Tech*, 2016, 24: 1–28 [张伟彬, 杜勇, 彭英彪, 等. 研发硬质合金的集成计算材料工程. *材料科学与工艺*, 2016, 24: 1–28]
- Lu Y, Wang C P, Li L Y, et al. Materials genome initiative and nuclear fuel element material (in Chinese). *Mater China*, 2017, 36: 414–419 [卢勇, 王翠萍, 李林阳, 等. 材料基因工程与核燃料元件材料. *中国材料进展*, 2017, 36: 414–419]
- Gao S Q, Li X N, Xue Y L, et al. Effects of processing parameters on microstructure and mechanical properties of zirconium alloy (in Chinese). *Hot Working Tech*, 2013, 42: 64–66 [高世奇, 李小宁, 薛艳丽, 等. 加工工艺对锆合金微观结构及力学性能的影响. *热加工工艺*, 2013, 42: 64–66]
- Peng J H, Li W F, Bechade J L, et al. Effect of texture on anisotropy of creep behavior of advanced zirconium alloys (in Chinese). *Chin J Rare Metals*, 2008, 32: 1–6 [彭继华, 李文芳, Bechade J L, 等. 织构对先进锆合金蠕变性能各向异性的影响. *稀有金属*, 2008, 32: 1–6]
- Charquet D, Tricot R, Wadier J F. Heterogeneous scale growth during steam corrosion of zircaloy-4 and 500°C. In: Eucken C, Van L S, eds. *Zirconium in the Nuclear Industry: Eighth International Symposium*. West Conshohocken, PA: ASTM International, 1989. 374–391
- Shen B L, Liu M, Li C, et al. Effect of texture on low cycle fatigue life of Zr-4 alloy (in Chinese). *Rare Metal Mater Eng*, 2007, 36: 803–807 [沈保罗, 刘明, 李聪, 等. 织构对Zr-4合金低周寿命的影响. *稀有金属材料与工程*, 2007, 36: 803–807]
- Daniel R C. In-pile dimensional changes of zircaloy-4 tubing having low hoop stresses (light water breeder reactor development program). *Nucl Tech*, 1972, 14: 171–186
- Liu P, Du Z Z, Ma L S, et al. Study status of corrosion properties of zirconium and zircaloy in reactor (in Chinese). *Hot Working Tech*, 2011, 40:

- 22–24 [刘鹏, 杜忠泽, 马林生, 等. 核级锆及锆合金腐蚀性能研究现状. 热加工工艺, 2011, 40: 22–24]
- 18 Liu Z, Li Y, Shi D, et al. Reprint of: The development of cladding materials for the accident tolerant fuel system from the materials genome initiative. *Scripta Mater*, 2018, 143: 129–136
- 19 Li M, Zhou X, Yang H, et al. The critical issues of SiC materials for future nuclear systems. *Scripta Mater*, 2018, 143: 149–153
- 20 Jiang Y, Wang Q, Cui Y, et al. Prediction of the micro-thermo-mechanical behaviors in dispersion nuclear fuel plates with heterogeneous particle distributions. *J Nucl Mater*, 2011, 418: 69–79
- 21 Zhang W, Zeng X A, Wang H R, et al. Research status on the surface coating technology for zirconium alloy (in Chinese). *Mech Eng*, 2017, 3: 45–47 [张文, 曾小安, 王浩然, 等. 锆合金表面涂层技术研究现状. 机械工程师, 2017, 3: 45–47]
- 22 Hosemann P, Frazer D, Fratoni M, et al. Materials selection for nuclear applications: Challenges and opportunities. *Scripta Mater*, 2018, 143: 181–187
- 23 Wu Y C. Effect of element Y on microstructure and properties of FeCrAl alloy (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Shenyang: Shenyang University of Technology, 2018 [吴玉超. 元素Y对FeCrAl合金组织与性能的影响. 硕士学位论文. 沈阳: 沈阳工业大学, 2018]
- 24 Semiatin S L, Thomas J F, Dadras P. Processing-microstructure relationships for Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-0.1Si. *Metall Trans A*, 1983, 14: 2363–2374
- 25 Li X W, Xia S Y, Sha A X. Fatigue properties of Ti-6Al-4V alloy (in Chinese). *Acta Metall Sin*, 2002, 38: 277–279 [李兴无, 夏绍玉, 沙爱学. Ti-6Al-4V合金的疲劳性能. 金属学报, 2002, 38: 277–279]
- 26 Yu T, Wang L, Zhao Y Q, et al. Low cycle fatigue behavior of Ti600 titanium alloy with two types of microstructure (in Chinese). *Rare Metal Mater Eng*, 2011, 40: 457–461 [于腾, 王磊, 赵永庆, 等. 两种显微组织的Ti600合金低周疲劳行为. 稀有金属材料与工程, 2011, 40: 457–461]
- 27 Zhao J C. A perspective on the materials genome initiative (in Chinese). *Chin J Nat*, 2014, 36: 89–104 [赵继成. 材料基因组计划简介. 自然杂志, 2014, 36: 89–104]
- 28 Peirce D, Asaro R J, Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metall*, 1982, 30: 1087–1119
- 29 Asaro R J. Crystal plasticity. *J Appl Mech*, 1983, 50: 921–934
- 30 Mayeur J R, McDowell D L. A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4V. *Int J Plast*, 2007, 23: 1457–1485
- 31 Tomé C N, Lebensohn R A, Kocks U F. A model for texture development dominated by deformation twinning: Application to zirconium alloys. *Acta Metall Mater*, 1991, 39: 2667–2680
- 32 Eshelby J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc R Soc Lond A*, 1957, 241: 376–396
- 33 Tang W, Li D, Huang S, et al. Simulation of texture evolution in magnesium alloy: Comparisons of different polycrystal plasticity modeling approaches. *Comput Struct*, 2014, 143: 1–8
- 34 Luan B F, Yu H B, Huang T L. A review of deformation mechanism of zirconium alloys (in Chinese). *Rare Metals Mater Eng*, 2012, 41: 357–360 [栾佰峰, 余泓冰, 黄天林, 等. 锆合金变形机制研究评述. 稀有金属材料与工程, 2012, 41: 357–360]
- 35 Xu F, Holt R A, Daymond M R. Modeling texture evolution during uni-axial deformation of zircaloy-2. *J Nucl Mater*, 2009, 394: 9–19
- 36 Qiao H, Wu P D, Wang H, et al. Evaluation of elastic-viscoplastic self-consistent polycrystal plasticity models for zirconium alloys. *Int J Solids Struct*, 2015, 71: 308–322
- 37 Ma X, Ma K, Wu Y W. Crystal plasticity modeling of hot extrusion texture and plasticity in a titanium alloy for an ICME toolset. In: 2017 25th International Conference on Nuclear Engineering. Volume 2: Plant Systems, Structures, Components and Materials. Shanghai, 2017
- 38 Pilchak A L, Shank J, Tucker J C, et al. A dataset for the development, verification, and validation of microstructure-sensitive process models for near-alpha titanium alloys. *Integr Mater Manuf Innov*, 2016, 5: 259–276
- 39 Burgers W G. On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium. *Physica*, 1934, 1: 561–586
- 40 Bhattacharyya D, Viswanathan G B, Denkenberger R, et al. The role of crystallographic and geometrical relationships between α and β phases in an α/β titanium alloy. *Acta Mater*, 2003, 51: 4679–4691
- 41 Huang S Y, Zhang S R, Li D Y, et al. Simulation of texture evolution during plastic deformation of fcc, bcc and hcp structured crystals with crystal plasticity based finite element method. *Trans Nonferrous Met Soc China*, 2011, 21: 1817–1825
- 42 Raabe D, Wang Y, Roters F. Crystal plasticity simulation study on the influence of texture on earing in steel. *Comput Mater Sci*, 2005, 34: 221–234

Integrated computational materials engineering simulation studies of nuclear alloys based on crystal plasticity modeling

MA XianFeng^{1,2*}, WEI DongHui¹, ALLISON John E.² & WANG Biao^{1*}

¹ Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China;

² Department of Materials Science and Engineering, University of Michigan, Ann Arbor 48109, USA

For nuclear reactor, alloys with excellent corrosion resistance and mechanical properties are widely used in the nuclear fuel cladding, internal component, and steam generator. The processing technology affect the microstructure directly, and hence the mechanical and corrosive properties. It is an important step to study on the performance of nuclear alloys outside reactor to alloy evaluation and improvement. Hence it is significant to predict the “processing-microstructure-mechanical property” of nuclear alloys. Conventional methods just rely on experimental “try-and-error” cycle, which costs lots of money and takes long time. Integrated Computational Materials Engineering based on through process simulation try to combine the models of processing, microstructure evolution and property, can remarkably reduce the R&D period and expense. To promote the application of this methodology in the processing optimization and development of nuclear alloys, the present study employed microstructure-sensitive crystal plasticity models and decoupled finite element simulation technique, to study quantitatively the “processing-microstructure-mechanical property” interrelationship of Zr, Ti, and FeCrAl alloys. The results indicated that the present model was able to predict accurately the hot processing texture and the corresponding tensile/compressive plastic behavior of three typical nuclear alloys. The present simulation method based on crystal plasticity can provide computational tool and reference to processing optimization and mechanical property evaluation of nuclear alloys.

integrated computational materials engineering (ICME), crystal plasticity model, processing technique, microstructure evolution, texture, nuclear alloys

PACS: 47.27.-i, 47.27.Eq, 47.27.Nz, 47.40.Ki, 47.85.Gj

doi: 10.1360/SSPMA-2019-0121