

УДК 539.4

Моделирование откольного разрушения урана при различных температурах в области полиморфных фазовых переходов

М. А. Десятникова, О. Н. Игнатова,
В. А. Раевский

Приведены результаты численного моделирования экспериментов Е. Зарецкого по нагружению природного урана в диапазоне температуры 27–862 °С в области фазового перехода. Моделирование этих опытов представляет интерес из-за обнаруженных особенностей откольного разрушения урана в области фазовых переходов. В качестве модели откольного разрушения авторами использовалась модель динамики роста и компактирования поврежденности в твердых веществах и жидкостях – ДРК-Л, учитывающая влияние прочностных свойств, давления, поверхностного натяжения, вязкости материалов, а также силы инерции на рост и схлопывание пор. Расчеты проведены по лагранжевой методике расчета задач деформирования механики сплошной среды в одномерном приближении.

Введение

В работе [1] представлены данные о зависимости откольной прочности природного урана от температуры. В экспериментах [1] Е. Зарецким и др. с помощью лазерного интерферометра зарегистрирована скорость движения свободной поверхности разогретых ударно-нагруженных урановых образцов. При обработке профилей скорости обнаружено, что в области температур 660–800 °С откольная прочность резко увеличивается с ростом температуры, что нетипично для металлов [2] и связано, вероятнее всего, с фазовым переходом урана в этой области. Известно, что уран претерпевает α - β - γ -фазовые переходы в диапазоне температур 20–800 °С, при этом скачкообразно меняются сдвиговая прочность и микротвердость [3]. В данной работе выдвинуто предположение, что изменение откольной прочности исследуемого металла непосредственно связано с изменением сдвиговой прочности (предела текучести).

Насколько нам известно, модели откольного разрушения типа NAG [4] – нуклеации и роста полостей – не могут предсказать такой особенности откольного разрушения. В этой работе нами предпринята попытка объяснить повышение откольной прочности урана с увеличением температуры с использованием развиваемой авторами динамической модели откольного разрушения

и компактирования поврежденного материала, находящегося как в твердой, так и в жидкой фазе, – ДРК-L (динамика роста и компактирования) [5]. Данная модель основана на представлении пористой среды в виде совокупности сферических пор (модель Кэрролла – Холта [6]). Достоинством модели ДРК-L является то, что она учитывает влияние давления, прочности, вязкости, поверхностного натяжения и сил инерции на процесс накопления поврежденности; ее можно применять для расчетов разрушения и компактирования материалов, как обладающих сдвиговой прочностью, так и без нее (жидкая фаза); она содержит малое число свободных параметров, определяемых из физических измерений. Расчеты проведены по лагранжевой методике расчета задач деформирования механики сплошной среды в одномерном приближении.

Основные уравнения модели ДРК-L

Далее представлены основные уравнения модели ДРК-L для материалов, находящихся в твердом и/или жидком фазовом состоянии. Подробный вывод уравнений приведен в работе [5].

Основные уравнения модели

$$\dot{R} = \pm \sqrt{\frac{R_{cell}}{\rho R^3 (R_{cell} - R)} 2 \int_0^t \left\{ \mp C_1 P(t) R - 2 C_2 R \int_R^{R_{cell}} Y_d(\varepsilon_i, \dot{\varepsilon}_i, T, P, t \dots) \frac{dr}{r} \mp 2\sigma - 4\mu(1 - \omega) |\dot{R}| \right\} R |\dot{R}| dt}, \quad (1)$$

$$\omega = \frac{V_P}{V_P + V_S} = \left(\frac{R}{R_{cell}} \right)^3 = \frac{1}{1 + \frac{1}{8\pi N_0 R^3}}, \quad N_0 = \frac{1}{8\pi (R_{cell}^3 - R^3)},$$

где R_{cell} , R – наружный и внутренний радиусы ячейки соответственно; V_S , V_P – объем сплошного вещества и поры соответственно, ω – поврежденность, N_0 – плотность пор в единице объема при $R \rightarrow 0$, ρ – плотность вещества, $P(t)$ – давление; $Y_d(\varepsilon_i, \dot{\varepsilon}_i, T, P, t \dots)$ – изменяющийся во времени предел текучести, зависящий от параметров напряженно-деформированного состояния – деформации ε_i , ее скорости $\dot{\varepsilon}_i$, температуры T , давления P ; r – текущий радиус ячейки, σ – коэффициент поверхностного натяжения, μ – коэффициент вязкости, C_1 , C_2 – константы модели. Точки обозначают производную по времени, знак «+» – рост пор, а «-» – компактирование.

В рамках данной модели предполагается, что в среде изначально присутствуют сферические микродефекты – поры с начальным радиусом R_{min} . Их число N_0 определено и не изменяется в процессе деформирования. Модель ДРК-L описывает рост и схлопывание (компактирование) данных дефектов. Во время роста дефекты укрупняются и могут сливаться, образуя макротрещины, которые перерастают в магистральную трещину. Поэтому вводится дополнительный параметр ω_{cr} , который характеризует переход от незначительного разрушения к образованию магистральной трещины, т. е. слияние дефектов происходит, когда величина поврежденности ω достигает критического значения ω_{cr} .

Таким образом, модель ДРК-L имеет три параметра – R_{min} , N_0 , ω_{cr} . Причем, количество пор N_0 можно определить из металлографических измерений поврежденности по поверхности образцов, начальный радиус пор R_{min} – исходя из типа кристаллической решетки материала.

Критическая поврежденность ω_{cr} оценивается из результатов экспериментов по растяжению–удлинению, в которых разрушение происходит в случае достижения критической деформации ε_{cr} .

Средняя деформация ($\bar{\varepsilon}_{cr}$) в случае сферической поры вычисляется по формуле

$$\bar{\varepsilon}_i = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\omega_{\min}(1-\omega_{cr}) \ln \omega_{\min} - \omega_{cr}(1-\omega_{\min}) \ln \omega_{cr} + (1-\omega_{\min})(1-\omega_{cr}) \ln \frac{1-\omega_{\min}}{1-\omega_{cr}}}{(1-\omega_{\min})(1-\omega_{cr})}, \quad (2)$$

где ω_{\min} – минимальная начальная поврежденность, соответствующая минимальному радиусу пор R_{\min} . Из уравнения (2), зная величины ω_{\min} и $\bar{\varepsilon}_i$, можно рассчитать значение ω_{cr} .

Критическая деформация (ε_{cr}), соответствующая пределу прочности при статическом растяжении, различна для разных материалов и зависит от характера деформирования и разрушения – хрупкое или пластичное. Так, например, для алюминия или титана, преимущественно с пластическим характером деформирования, ε_{cr} составляет 0,2–0,35. Для «хрупких» материалов, таких как, например, бериллий $\varepsilon_{cr} = 0,025–0,035$ [8].

Рост пор в рамках модели ДРК-L начинается при достижении некоторого критического давления (растяжения)

$$P < P_{\min} = -\frac{2}{3} Y_d \left(\ln \frac{1}{\omega_{\min}} \right) - \frac{2\sigma}{\left(\frac{1}{8\pi N_0} \frac{\omega_{\min}}{1-\omega_{\min}} \right)^{1/3}} \quad (3)$$

и продолжается до тех пор, пока скорость роста не станет равной нулю.

Компактирование пор начального радиуса R_0 ($\omega = \omega_0$) начинается при выполнении условия

$$P > P_0 = \frac{2}{3} Y_d \left(\ln \frac{1}{\omega_0} \right) - \frac{2\sigma}{\left(\frac{1}{8\pi N_0} \frac{\omega_0}{1-\omega_0} \right)^{1/3}} \quad (4)$$

и продолжается до тех пор, пока либо скорость роста пор не станет равной нулю, либо радиус пор не станет равным минимальному значению $R = R_{\min}$.

Отметим, что скорость деформации в пределах ячейки заметно изменяется с радиусом, т. е. динамический предел текучести не будет постоянным. Для веществ с сильным деформационным упрочнением (например, медь, алюминий и др.) этот эффект необходимо учитывать. Скорость деформации ($\dot{\varepsilon}_i$) в текущем радиусе ячейки r : $\dot{\varepsilon}_i = \frac{2\dot{r}}{r}$, а деформация

$$\varepsilon_i = \int_0^t \frac{2\dot{r}}{r} dt = 2 \int_{r_0}^r \frac{dr}{r} = 2 \ln \frac{r(t)}{r_0} = 2 \ln \frac{r(t)}{\left(R_0^3 - R^3(t) + r(t)^3 \right)^{1/3}}. \quad (5)$$

Важным результатом исследования откольного разрушения является определение значения откольной прочности материала, т. е. давления, при котором начинается рост сферических пор.

При известных значениях начального радиуса пор, их числа, начального предела текучести ненагруженного материала (Y_0) и поверхностного натяжения (σ) данная величина определяется по выражению

$$P_{\min} = -\frac{2}{3}Y_0 \left(\ln \frac{1}{\omega_{\min}} \right) - \frac{2\sigma}{\left(\frac{1}{8\pi N_0} \frac{\omega_{\min}}{1 - \omega_{\min}} \right)^{1/3}}. \quad (6)$$

Уравнения модели ДРК-L (1)–(6) реализованы в одномерной расчетной программе УП [7]. Для численного моделирования процесса разрушения создана библиотека обобщенных уравнений состояния, согласованных с моделями упругопластического деформирования и кинетикой разрушения. Определяющее уравнение состояния поврежденной среды строится из уравнения состояния сплошного вещества и уравнений, ответственных за изменение дополнительных внутренних переменных, характеризующих развитие микродефектов [9]:

$$\tilde{P} = (1 - \omega)P \left(\frac{P}{(1 - \omega)}, E_T \right), \quad \tilde{Y} = (1 - \omega) \cdot Y, \quad \tilde{G} \approx G(1 - \omega), \quad (7)$$

где P , E_T , Y и G – давление, тепловая энергия, прочность и модуль сдвига для сплошной среды соответственно; \tilde{P} , \tilde{Y} , \tilde{G} – давление, прочность и модуль сдвига поврежденного вещества соответственно.

В рамках программы УП уравнения модели ДРК-L решаются совместно с уравнениями газовой динамики, что представляет большие трудности, так как кинетические уравнения модели ДРК-L имеют характерные признаки жестких систем. Характерные времена описываемых процессов – газовой динамики и кинетики – могут существенно различаться. Поэтому для численного решения уравнений модели выбрана одна из наиболее перспективных на сегодняшний момент схем с повышенным запасом устойчивости, используемых для решения жестких систем – схема Розенброка ROS с комплексным параметром (CROS) [10].

При расчете пластической работы для металлов использовалась релаксационная модель прочности РИНГ, которая учитывает деформационное и компрессионное упрочнение, термическое разупрочнение, влияние скорости деформирования (вязкость) и уравнение состояния в форме Ми – Грюнайзена [11].

Результаты одномерных расчетов

Численное моделирование откольного разрушения урана проводилось при следующих параметрах модели ДРК-L: $R_{\min} = 10^{-5}$ см, $N_0 = 10^{10}$ 1/см³. В этом случае $\omega_{\min} = 2,5 \cdot 10^{-4}$. Значение критической поврежденности при $\varepsilon_{cr} = 0,3$ (рис. 1): $\omega_{cr} = 0,1$. Параметры $C_1 = 1,8$, $C_2 = 1,0$.

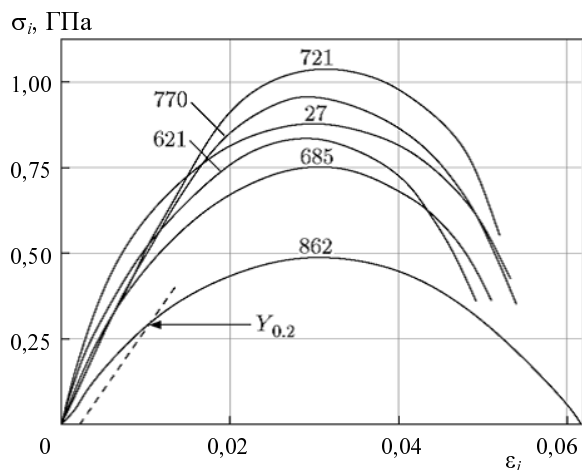


Рис. 1. Диаграммы сжатия природного урана из работы [1]

В первом приближении значения вязкости и поверхностного натяжения выбраны постоянными из условия наилучшего описания экспериментальных данных ($\sigma_0 = 1,4 \cdot 10^{-2}$ Н/м и $\mu_0 = 3,0 \cdot 10^{-4}$ Па·с).

Работа [1] посвящена исследованию влияния температуры на откольное разрушение урана. Природный нелегированный уран плотностью $19,03$ г/см³ нагревался до 20 – 860 °С (толщина образца составляла 2 мм). Диаграммы сжатия природного урана, полученные по профилям свободной поверхности для различных температур из работы [1], приведены на рис. 1.

Нагружение урана осуществлялось соударением с медным ударником толщиной 1 мм, прикрепленным к подложке из ПММА, в легкогазовой пушке диаметром 58 мм. Скорость ударника составляла 300 ± 5 км/с. В серии экспериментов с помощью лазерного интерферометра VISAR регистрировалась зависимость скорости движения свободной поверхности от времени.

Перед началом расчетов по откольному разрушению авторы внимательно проанализировали диаграммы деформирования природного урана, используемого в работе [1], так как они сильно отличаются от аналогичных диаграмм другого урана [12]. Также авторами работы были изучены фазовые диаграммы исследуемого материала. Известно, что при нормальном атмосферном давлении уран имеет четыре полиморфные модификации: до $T \approx 680$ °С уран состоит из α -фазы с орторомбической структурой, в диапазоне $T = 680$ – 770 °С переходит в β -фазу с гексогональной структурой и затем при $T > 770$ °С состоит из объемно-центрированной кубической решетки с γ -фазой, при температуре свыше 1130 °С происходит плавление [3]. Прочностные свойства урана в различных фазовых состояниях, как следует из работы [3], а также из диаграмм [1], приведенных на рис. 1, различны; α -фаза урана при $T < 680$ °С характеризуется заметным уменьшением предела текучести с ростом температуры и увеличением пластичности. Когда уран проходит через температуру альфа-бета-превращения ($T > 680$ °С), твердость и начальный предел текучести увеличиваются. В точке бета-гамма-превращения ($T > 770$ °С) твердость снова скачкообразно падает. Твердость γ -урана близка к твердости чистого свинца [3]. Эти данные указывают на сложное поведение урана с ростом температуры, что должно отражаться в модели прочности. На рис. 2 приведены значения условного начального предела текучести из работы [1]. Эти точки получены из анализа упругого предвестника, однако при расчете, видимо, использовался постоянный коэффи-

циент Пуассона, поэтому значения сдвиговой прочности оказались несколько выше. Там же нанесены значения Y_0 , полученные из описания диаграмм сжатия урана и используемые в модели РИНГ.

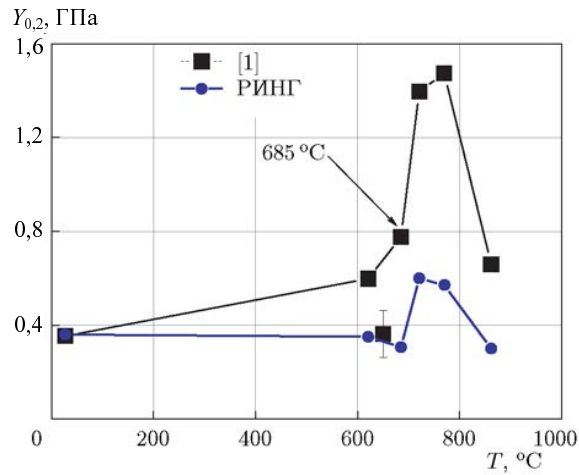


Рис. 2. Зависимость прочности (начальный предел текучести) от температуры



Рис. 3. Расчетная схема экспериментов

Расчетная схема экспериментов приведена на рис. 3, параметры экспериментов по ударно-волновому нагружению урана – в таблице.

Параметры экспериментов по ударно-волновому нагружению урана

Номер опыта	$T, ^\circ\text{C}$	$\Delta_{\text{уд}}, \text{мм}$	$\Delta_{\text{обр}}, \text{мм}$	$W_{\text{уд}}, \text{км/с}$
1	20	1	2	0,325
2	621			0,325
3	685			0,325
4	721			0,335
5	770			0,335
6	862			0,38

На рис. 4–9 приведены экспериментальные и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности от времени, полученные при различных начальных температурах начального разогрева (пунктирной линией показаны результаты эксперимента).

По результатам обработки диаграмм скорости движения поверхности ударно-нагруженного нагретого урана в работе [1] получены значения откольной прочности (σ_S) по формуле $\sigma_S = \rho C_0 \Delta W_p / 2$, где ρ , C_0 – плотность материала и скорость звука в нем, ΔW_p – величина спада скорости свободной поверхности. Эти данные представлены на рис. 10 в виде зависимости $\sigma_S(T_0)$. Аналогичным образом рассчитаны значения величины σ_S по расчетным профилям.

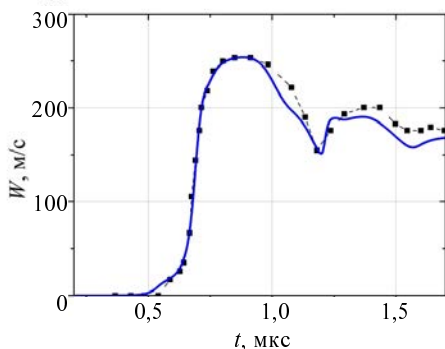


Рис. 4. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 27 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

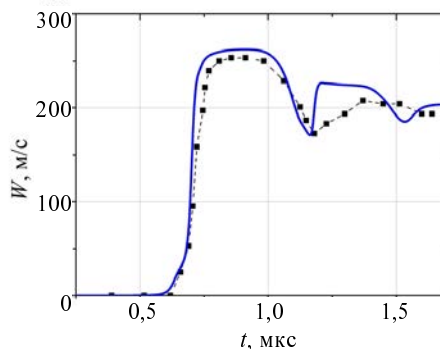


Рис. 5. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 612 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

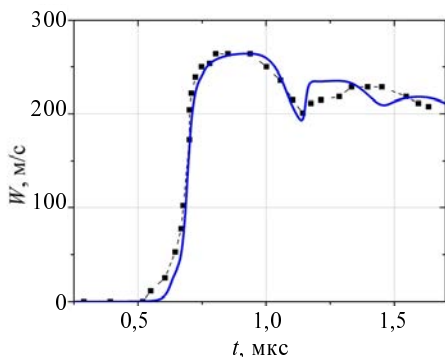


Рис. 6. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 685 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

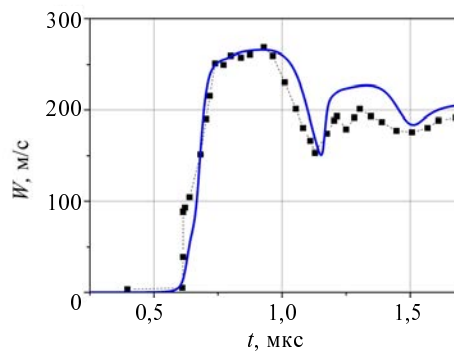


Рис. 7. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 721 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

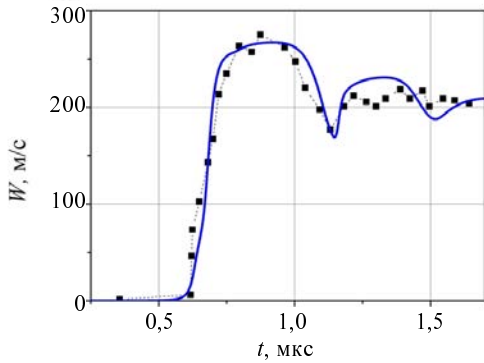


Рис. 8. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 770 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

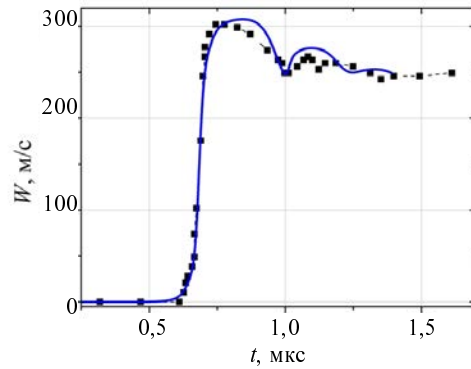


Рис. 9. Экспериментальные [1] и расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности урана ($T = 862 \text{ }^\circ\text{C}$) от времени

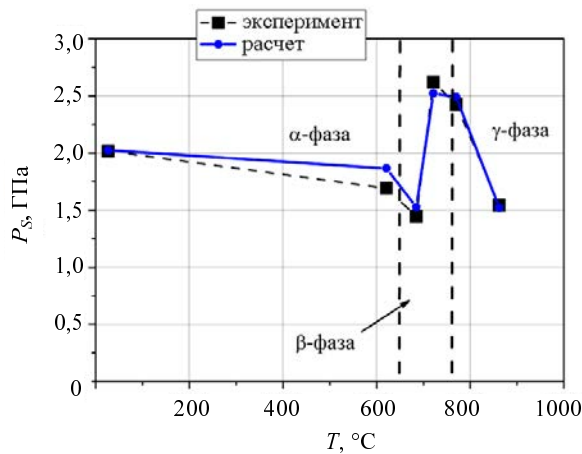


Рис. 10. Зависимость откольной прочности от температуры урана

Из рис. 4–10 видно, что расчетные зависимости, полученные с моделью ДРК- L, хорошо согласуются с экспериментальными.

Отметим, что в данном случае описать единообразно все экспериментальные данные удалось благодаря тому, что адекватно выбраны параметры модели сдвиговой прочности РИНГ. Другими словами, разрушение материалов непосредственно зависит от предела текучести.

Заключение

В статье приведены расчетные зависимости скорости движения свободной поверхности от времени ударно-нагруженного нагретого природного урана в сравнении с экспериментальными. Расчеты выполнены с использованием динамической модели роста и компактирования повреж-

денной среды (ДРК-L), учитывающей основные факторы, влияющие на рост и схлопывание пор – прочность, давление, поверхностное натяжение, вязкость и инерциальные силы. Применение модели ДРК-L и корректировка сдвиговой прочности в области полиморфных фазовых превращений урана (680–770 °С) позволили адекватно описать экспериментальные результаты [1] и, в частности, особенности влияния фазовых превращений на откольную прочность.

Авторы выражают благодарность Г. Г. Ивановой и В. Н. Софронову за помощь и внимание к работе.

Список литературы

1. Zaretsky E., Herrmann B., Shvarts D. Dynamic response of high temperature uranium phases // Shock Compression of Condensed Matter. 2005. P. 292–295.
2. Прочность и ударные волны / Под ред. С. А. Новикова. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1996.
3. Холден А. Н. Физическое металловедение урана. М.: Гос. науч.-техн. изд-во лит. по черной и цв. металлургии, 1962.
4. Seaman L., Curran D., Shockey A. Computational models for ductile and brittle fracture // J. Appl. Phys. 1976. Vol. 47, N 11. P. 4814–4826.
5. Десятникова М. А., Игнатова О. Н., Раевский В. А., Целиков И. С. Динамическая модель роста и схлопывания пор в жидкостях и твердых веществах // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53, № 1. С. 115–122.
6. Carroll M. M., Holt A. C. Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 43. P. 1626–1635.
7. Гаврилов Н. Ф., Иванова Г. Г., Селин В. И., Софронов В. Н. Программа УП-ОК для решения одномерных задач механики сплошной среды в одномерном комплексе // ВАНТ. Сер. Методики и программы числ. решения задач мат. физики. 1982. Вып. 3(11). С. 11–14.
8. Физические величины: справочник под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
9. Herrmann W. Constitutive equation for the dynamic compaction of ductile porous materials // J. Appl. Phys. 1969. Vol. 40, N 6. P. 2490–2499.
10. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
11. Глушак Б. Л., Игнатова О. Н., Надежин С. С., Раевский В. А. Релаксационная модель сдвиговой прочности пяти металлов // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 2. С. 25–36.
12. Андреева М. Л., Большаков А. П., Игнатова О. Н. и др. Исследование механических свойств урана ^{238}U с различной исходной структурой при скорости деформирования 10^{-3} – 10^3 с $^{-1}$ // Физ. мезомеханика. 2010. Т. 13, № 1. С. 107–112.

Simulation of Spall Damage of Uranium at Various Temperatures in a Region of Polymorphic Phase Transitions

M. A. Desyatnikova, O. N. Ignatova, V. A. Raevskiy

The results of numerical simulation of experiments of E. Zaretskiy on loading of natural uranium heated up to temperatures 27–862 °C in the area of phase transitions. Simulation of these tests is of great interest, because a peculiarity was revealed for spall damage with increasing temperature in a region of phase transitions. The authors managed to explain a found effect by the help of model spall damage and compaction of damage in solids and liquids DRK-L. This model takes into account an influence of strength properties, a pressure, surface tension and viscosity of materials as well as an inertial force on a growth process and a pore collapse. The calculations were fulfilled by using the program UP – a Lagrangian calculation technique for tasks of deformation of continuum mechanics in a one-dimensional approximation.