

基于扩散-内聚力耦合模型的316L不锈钢溶解氧环境下应力腐蚀开裂速率仿真分析*

NUMERICAL SIMULATION ON STRESS CORROSION CRACK GROWTH RATE OF 316L STAINLESS STEEL IN DISSOLVED OXYGEN ENVIRONMENT BASED ON A COUPLED DIFFUSION-COHESION MODEL

巴思博** 凌 玲 张骏杰 王学林***

(华中科技大学 机械科学与工程学院, 武汉 430074)

BA SiBo LING Ling ZHANG JunJie WANG XueLin

(School of Mechanical Science & Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

摘要 高温水环境下溶解氧是影响奥氏体不锈钢应力腐蚀开裂的主要环境参数之一。基于应力腐蚀的滑移-溶解理论,建立了一种氧扩散与内聚力耦合的应力腐蚀裂纹模拟模型。采用内聚力有限元数值方法模拟了在325℃高温水溶解氧环境下316L奥氏体不锈钢的应力腐蚀开裂行为,分析了溶解氧含量与加工硬化对裂纹扩展速率(Crack Growth Rate, CGR)的影响。结果表明,通过标定的模型参数,建立的模型可以预测不同溶解氧含量下材料应力腐蚀裂纹扩展速率,计算结果与文献中的实验测量结果一致。在模拟的高温水环境和应力强度因子条件下,316L不锈钢应力腐蚀裂纹扩展速率与屈服强度关系可表示为 $CGR \propto \sigma_y^{2.028}$ 。

关键词 有限元分析 应力腐蚀 内聚力模型 溶解氧

中图分类号 TG174

Abstract Dissolved oxygen is one of the main environmental parameter affecting of stress corrosion cracking of austenitic stainless steel in high temperature water environment. Based on the slip-dissolution of stress corrosion theory, a coupled diffusion and cohesion model was built for simulating stress corrosion crack. The stress corrosion cracking behavior of 316L austenitic stainless steel in high temperature water of 325℃ with dissolved oxygen was simulated by finite element analysis using cohesive element. The effects of dissolved oxygen content and cold working on crack growth rate (CGR) were analyzed. The results indicate that, by appropriately calibrating the model parameters, the built model can predict the CGR of stress corrosion cracking under different dissolved oxygen contents, showing that the calculated CGR agrees well with the experimental results reported in the literature. Furthermore, the relationship between the stress corrosion crack growth rate and the yield strength of 316L stainless steel can be fitted as $CGR \propto \sigma_y^{2.028}$ in the simulated high temperature water and stress intensity factor conditions.

Key words Finite element analysis; Stress corrosion; Cohesive zone model; Dissolved oxygen

Corresponding author: WANG XueLin, E-mail: wangxl@hust.edu.cn

The project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 51875219).

Manuscript received 20230222, in revised form 20230418.

0 引言

316L不锈钢兼具高强的力学性能和良好的耐腐蚀性能,是压水堆核电站一回路主管道的重要结构材料^[1],但是,在核电站环境下服役的316L不锈钢中,应力腐蚀开裂(Stress Corrosion Cracking, SCC)故障时有发生。SCC常在水停滞、水化学和操作温度没有精确

控制的部件中发现,例如安全系统的辅助管道等^[2]。这些部位会导致溶解氧(Dissolved Oxygen, DO)积聚甚至保持高氧浓度一段时间,诱发316L材料发生SCC失效^[3],因此研究溶解氧环境下奥氏体不锈钢SCC扩展具有重要意义。

目前,研究者们主要通过实验对溶解氧环境下材料SCC进行研究,FENG Z等^[4]^[171-177]利用极化曲线研究

*20230222收到初稿,20230418收到修改稿。国家自然科学基金项目(51875219)资助。

**巴思博,男,1998年生,辽宁沈阳人,汉族,华中科技大学硕士,主要研究方向为材料应力腐蚀开裂仿真分析。

***王学林(通信作者),男,1963年生,湖北武汉人,汉族,华中科技大学教授,博士,主要研究方向为机械系统动力学、多场耦合有限元计算。

了不同溶解氧环境下材料钝化膜的电化学行为,表明溶解氧加速了阳极与阴极过程。CUI T等^[5]利用慢应变速率拉伸试验探究了溶解氧含量与309L SCC敏感性的关系。吴文博等^[6]利用高温高压腐蚀测试系统,研究了溶解氧含量对热老化316L应力腐蚀裂纹扩展速率(Crack Growth Rate, CGR)的影响。GONG K等^[7]研究了低氯高温水环境下溶解氧含量对SCC生长的影响。LOU X等^[8]利用慢应变速率试验和电化学测试研究了不同溶解氧含量对预腐蚀X100钢母材和焊接接头在干湿循环条件下SCC的影响。然而,通过数值模拟溶解氧条件下应力腐蚀裂纹扩展行为的研究较少。

内聚力模型已经广泛地应用于不同材料裂纹扩展数值模拟。BARENBLATT G I等^[9-10]最早引入内聚力模型,之后XU X P等^[11]发展内聚网格用来模拟裂纹扩展和分支现象。JEMBLIE L等^[12]耦合氢扩散分析和内聚区模型模拟了热轧粘合复合钢管中氢致裂纹的萌生。PU C等^[13]提出了一种扩散耦合内聚力模型,用于模拟沿晶界的SCC过程和晶界滑动、分离的力学响应,并结合晶体塑性有限元模型模拟了腐蚀环境下多晶材料的沿晶断裂,仿真结果与试验结果一致。李云龙等^[14]基于梯形内聚本构模型,模拟了高强度钢氢致裂纹萌生和断裂过程。SEDLAK M等^[15]¹⁰⁶⁵⁴³利用内聚力与氯离子扩散的耦合分析,模拟了奥氏体不锈钢晶间应力腐蚀开裂行为,在此基础上,他们又提出了一种基于滑移-氧化的有限元模型,分析了双相氧化物对SCC的影响^[16]。虽然内聚力模型在氢脆、应力腐蚀开裂数值模拟方面取得了初步进展,但是环境诱导的材料断裂问题影响因素复杂,针对不同环境因素的数值模型仍有待开发。

本文建立了一种扩散-内聚力耦合模型,通过在有限元分析软件Abaqus上二次开发计算,实现溶解氧环境下316L奥氏体不锈钢SCC裂纹扩展模拟。首先,结合菲克扩散方程和断裂力学的内聚力模型,通过裂纹扩展中溶解氧累计消耗与材料降解的关联,对裂纹采用混合模式断裂(Park Paulino Roesler, PPR)的内聚力本构模型进行建模。通过PPR参数退化因子与裂纹中DO累计消耗量,建立环境影响下材料的退化模型。然后,通过文献中的试验数据标定模型参数,并将模型进一步与试验结果比较,验证模型的准确性。在此基础上,分析高温水环境下DO和冷加工硬化(Cold Working, CW)对316L不锈钢CGR的影响。

1 扩散-内聚力耦合模型

材料应力腐蚀断裂过程主要由裂纹萌生、扩展和断裂三个阶段组成。材料在加工制造、成形或使用阶段可能产生位错、损伤、点蚀等局部缺陷,导致裂纹萌

生,之后受不同的环境因素及拉应力的作用使裂纹扩展直至断裂。应力腐蚀裂纹扩展速率取决于材料机械性质、应力水平和环境条件。在裂纹应力强度因子大于应力腐蚀裂纹临界应力强度因子条件下,裂纹发生扩展^[17]²²⁸⁻²³⁴。本文针对裂纹扩展阶段高温水溶解氧环境下应力腐蚀裂纹扩展速率模拟开展分析研究。

1.1 扩散模型

DO在材料中扩散采用菲克定律描述,扩散系数与材料损伤相关。溶解氧扩散以晶界和相应裂纹处为主导,以TURNBULL A^[18]采用的质量守恒方程为基础,假设SCC裂纹为长裂纹,扩散项远大于电迁移与对流项对溶解氧扩散的影响,电迁移与对流项的影响忽略不计。因此,溶解氧扩散模型为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(\eta) \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

式中, c 为DO含量,扩散速率取决于裂纹处损伤状态,通过定义与内聚单元损伤因子 η 相关的扩散系数 $D(\eta)$ 来实现。裂纹中扩散系数 $D(\eta)$ 利用DO在液体与固体中的扩散系数插值计算。本文假定DO通过退化断裂内聚力模型来影响SCC过程,单元失效过程中扩散系数与损伤因子的关系用线性插值进行取值, $D(\eta)$ 表达式为

$$D(\eta) = (D_l - D_s)\eta + D_s \quad (2)$$

式中, D_l 为DO在溶液中的扩散系数, $D_l = 2 \times 10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}^[19]; D_s 为固体中扩散系数,根据FENG Z C等^[4]¹⁷⁷试验数据拟合得到, $D_s = 1.5 \times 10^{-13} \text{ mm}^2/\text{s}$ 。$

1.2 内聚力模型

内聚力模型用牵引分离定律(Traction-Separation Law, TSL)定义材料断裂过程本构关系。本文内聚单元采用由PARK K等^[20]提出的基于势能的PPR模型为基础来描述材料的断裂及其退化过程,其中单元退化由初始状态与完全退化状态描述,退化单元TSL形状可由初始TSL曲线与完全退化TSL曲线以及退化因子来定义。

裂纹内聚单元的本构关系是由势能推导出来的,PPR势能 $\Psi(\Delta_n, \Delta_t)$ 表达如式(3),断裂势能的1阶导数表达为其断裂表面上的牵引力,2阶导数提供本构关系。对 $\Psi(\Delta_n, \Delta_t)$ 求导得到法向与切向内聚牵引力矢量 $T_n(\Delta_n, \Delta_t)$, $T_t(\Delta_n, \Delta_t)$,如式(4)所示。

$$\begin{aligned} \Psi(\Delta_n, \Delta_t) = & \min(\phi_n, \phi_t) + \left[\Gamma_n \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^\alpha \right. \\ & \left. \left(\frac{m}{\alpha} + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^m + \langle \phi_n - \phi_t \rangle \right] \left[\Gamma_t \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^\beta \right. \\ & \left. \left(\frac{n}{\beta} + \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^n + \langle \phi_t - \phi_n \rangle \right] \quad (3) \end{aligned}$$

$$\begin{cases}
 T_n(\Delta_n, \Delta_t) = \frac{\Gamma_n}{\delta_n} \left[m \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^\alpha \left(\frac{m}{\alpha} + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^{m-1} - \right. \\
 \quad \left. \alpha \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^{\alpha-1} \left(\frac{m}{\alpha} + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^m \right] \left[\Gamma_t \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^\beta \cdot \right. \\
 \quad \left. \left(\frac{n}{\beta} + \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^n + \langle \phi_t - \phi_n \rangle \right] \\
 T_t(\Delta_n, \Delta_t) = (\pm 1) \frac{\Gamma_t}{\delta_t} \left[\Gamma_n \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^\alpha \left(\frac{m}{\alpha} + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right)^m + \right. \\
 \quad \left. \langle \phi_n - \phi_t \rangle \right] \left[n \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^\beta \left(\frac{n}{\beta} + \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^{n-1} - \right. \\
 \quad \left. \beta \left(1 - \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^{\beta-1} \left(\frac{n}{\beta} + \frac{|\Delta_t|}{\delta_t} \right)^n \right]
 \end{cases} \quad (4)$$

本文取切向内聚参数与法向相同,其中 ϕ_n 、 ϕ_t 分别为法向、切向断裂能; m 、 n 、 α 、 β 均为法向与切向TSL形状参数; Γ_n 、 Γ_t 为法向、切向能量常数,计算式为式(5); δ_n 、 δ_t 分别定义为法向、切向裂纹最大开口张开位移,计算式为式(6); λ_n 、 λ_t 分别为法向、切向坡度指标,定义为临界裂纹开口张开位移与裂纹最大开口张开位移的比值; $\sigma_{\max}$ 、 $\tau_{\max}$ 分别为法向与切向最大内聚牵引力。

$$\Gamma_n = \left(-\phi_n \right) \left(\frac{\alpha}{m} \right)^m, \Gamma_t = \left(\frac{\beta}{n} \right)^n \quad (5)$$

$$\begin{cases}
 \delta_n = \frac{\phi_n}{\sigma_{\max}} \alpha \lambda_n (1 - \lambda_n)^{\alpha-1} \left(\frac{\alpha}{m} + 1 \right) \left(\frac{\alpha}{m} \lambda_n + 1 \right)^{m-1} \\
 \delta_t = \frac{\phi_t}{\tau_{\max}} \beta \lambda_t (1 - \lambda_t)^{\beta-1} \left(\frac{\beta}{n} + 1 \right) \left(\frac{\beta}{n} \lambda_t + 1 \right)^{n-1}
 \end{cases} \quad (6)$$

内聚单元的状态通过损伤因子 η 与DO累计消耗量 Q 定义,其中损伤因子 η 可用于确定裂纹尖端位置,最后一个已完全失效单元即 $\eta = 1$ 的内聚单元所在位置即为裂纹尖端。

损伤因子 η 具体定义为式(7),其中 T_{eff} 为加载过程中的有效内聚牵引力; T_χ 为当前状态下TSL最大内聚牵引力。

$$\eta = 1 - \sqrt{(T_{\text{eff}}^n)^2 + (T_{\text{eff}}^t)^2} / \sqrt{(T_\chi^n)^2 + (T_\chi^t)^2} \quad (7)$$

模型的加载卸载过程需满足不可逆性,其具体实现方法参考PARK K等^[21]提出的模型。如图1所示,黑色曲线为初始TSL曲线,浅色曲线为退化后当前TSL曲线,灰色曲线为卸载与再加载TSL曲线。退化因子 χ 定义为当前损失断裂能与初始断裂能的比值,如式(8)所示。 ϕ_{ini} 、 ϕ_{end} 分别为初始与完全退化内聚能; ϕ_χ 为当前有效内聚能。

$$\chi = \frac{\phi_{\text{ini}} - \phi_\chi}{\phi_{\text{ini}} - \phi_{\text{end}}} \quad (8)$$

通过定义有效TSL曲线输入参数 λ_{eff} 、 α_{eff} 、 σ_{eff} 关于退化因子的函数来实现对TSL曲线的退化,如式(9)所

示。其中 c_1 、 c_2 、 c_3 分别为有效TSL曲线参数关于退化因子 χ 的指数参数。

$$\begin{cases}
 \lambda_{\text{eff}} = \lambda_{\text{ini}} + (\lambda_{\text{end}} - \lambda_{\text{ini}}) \chi^{c_1} \\
 \alpha_{\text{eff}} = \alpha_{\text{ini}} + (\alpha_{\text{end}} - \alpha_{\text{ini}}) \chi^{c_2} \\
 \sigma_{\text{eff}} = \sigma_{\text{ini}} - (\sigma_{\text{ini}} - \sigma_{\text{end}}) \chi^{c_3}
 \end{cases} \quad (9)$$

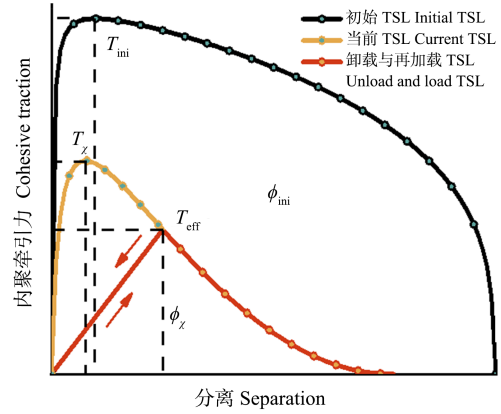


图1 降解对TSL曲线的影响

Fig. 1 Effect of degradation on the TSL

1.3 钝化膜降解模型

针对高温水环境下的奥氏体不锈钢SCC行为,TERACHI T等^[22]提出了滑移-溶解模型:SCC过程是裂纹尖端钝化膜破裂-再钝化成膜反复循环的过程。DO对不锈钢应力腐蚀开裂的促进机制为:裂纹尖端的再钝化过程会消耗局部DO,DO因浓度梯度扩散进入裂纹尖端再次被消耗,导致尖端和基体间电势差增大,裂纹尖端处形成局部的碱性环境,致使钝化膜稳定性降低,加剧尖端金属溶解而加速裂纹扩展。

本文通过将内聚单元的TSL从初始状态降解为完全退化状态来模拟氧化膜的断裂特性,在整个降解过程中,DO累计消耗量 Q 通过DO消耗速率 K 关于时间的积分表示,如式(10)所示。本文假设DO累计消耗量与裂纹尖端的金属基体溶解量是线性相关的,裂纹尖端溶解对切向与法向方向内聚力的影响是线性且相等的^{[15]106543},则当前有效内聚能表达式如式(11)所示,其中 $k_{Q_n}^\phi$ 、 $k_{Q_t}^\phi$ 、 k_Q^ϕ 分别为材料断裂能与裂尖溶解量、裂尖溶解量与DO累计消耗量、断裂能与DO累计消耗量的转换系数。在DO对内聚单元的降解与外部载荷的共同作用下,裂纹扩展,持续暴露原始金属材料进行氧化降解,该过程随DO的扩散不断重复。

$$Q = \int K(c, T_{\text{eff}}) dt \quad (10)$$

$$\phi_\chi = \phi_{\text{ini}} - k_{Q_n}^\phi Q_m = \phi_{\text{ini}} - k_{Q_n}^\phi k_Q^{Q_n} Q = \phi_{\text{ini}} - k_Q^\phi Q \quad (11)$$

假设断裂沿着晶界,DO从裂纹开口扩散到裂纹尖端,氧化削弱了裂纹尖端材料的稳定性,对裂纹尖端材料内聚能产生累积影响,进而削弱了材料断裂韧性,整体模型计算过程如图2所示。

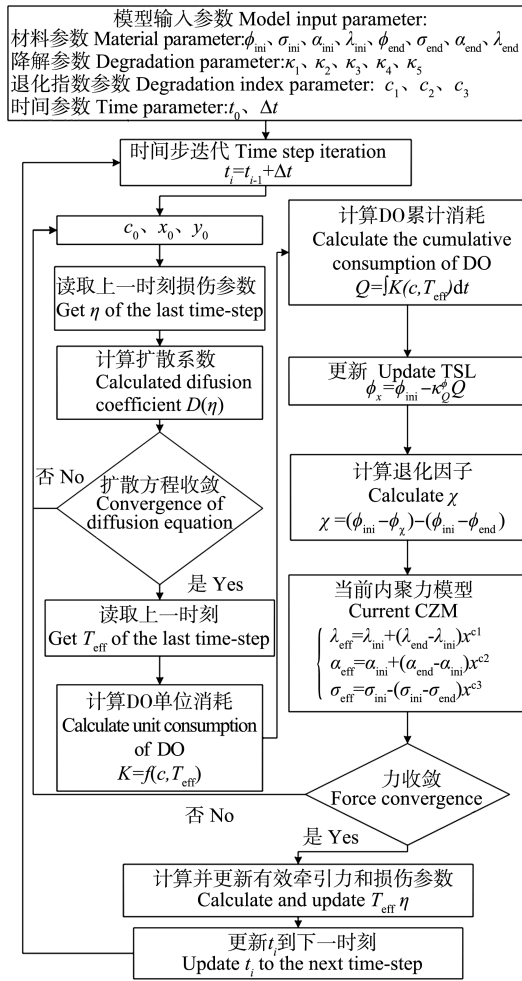
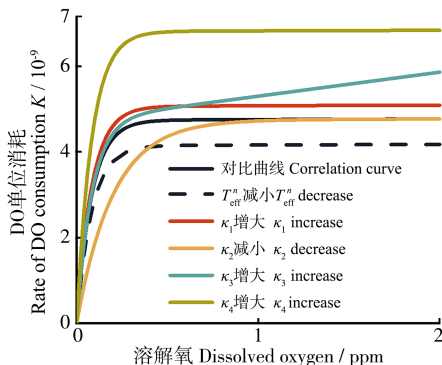


图2 耦合模型计算过程

Fig. 2 Calculation process of the coupling model diagram

本文中, DO 消耗速率 K 定义为关于 DO 含量与法向有效内聚牵引力的函数, 呈现形式如式(12)所示, 其中 k_1 为调整因子, 根据不同实验材料与实验环境进行标定; T_{eff}^n 与参数 k_4 协同影响整个线性相位, k_4 越大 T_{eff}^n 对消耗速率影响越大; k_2 影响函数从指数到线性的转换速度, 体现消耗速率对 DO 含量的依赖性; k_3 影响线性阶段消耗速率对浓度的依赖。为直观表示各参数对曲线形状的影响, 图3比较了参数变化前后曲线

图3 降解模型中各参数对 K 影响Fig. 3 Effect of each parameter on the K in the degradation model

的变化趋势。

$$K = k_1 [(1 - e^{(-k_2 c)}) (T_{eff}^n)^{k_4} + c T_{eff}^n k_3] \quad (12)$$

1.4 模型参数确定

本文用 DU D 等^[17] 高温水环境下 316L 不锈钢材料的应力腐蚀开裂试验验证模型。计算模型中零厚度内聚力单元通过 Fortran 编程利用 Abaqus 用户子程序 *UEL 来实现, 将 2D 自定义单元插入到裂纹路径中, 利用隐式方法求解扩散与内聚力耦合模型。以 1/2T-CT 试样^[23] 为计算对象, 初始裂纹长度取 11 mm, 厚度取 12.7 mm。塑性单元选用平面 CPE4RT 单元, 在裂纹路径附近细化网格。通过 Abaqus 中 *TIE 命令将 4 个自定义 UEL 单元与 1 个塑性单元进行绑定, 对裂纹两侧单元添加表面-表面接触, 防止路径单元穿透, 整体计算模型如图 4 所示, 其中横线为初始裂纹位置。

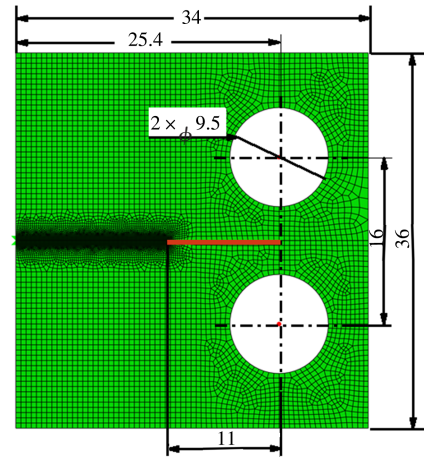


图4 1/2T-CT 试样几何形状与有限元网格

Fig. 4 1/2T-CT specimen geometry and finite element mesh

模拟高温水环境, 温度为 325 °C, 材料为奥氏体 316L 不锈钢。材料屈服强度^[24]、弹性模量^[25]与应力-应变曲线采用 VAN EETEN P 等^[26] 的试验数据, 如图 5、图 6 所示。材料泊松比取 0.27。材料本构模型为具有分段线性硬化的弹塑性材料。

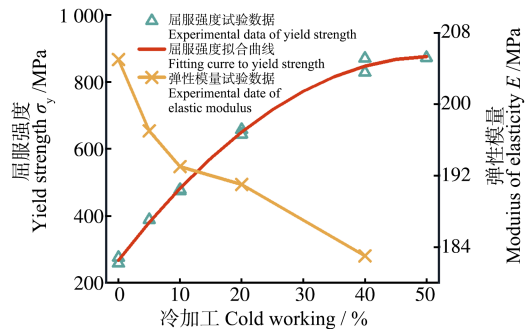


图5 屈服强度、弹性模量随加工硬化程度的变化

Fig. 5 Changes of yield strength and modulus of elasticity with degree of cold working

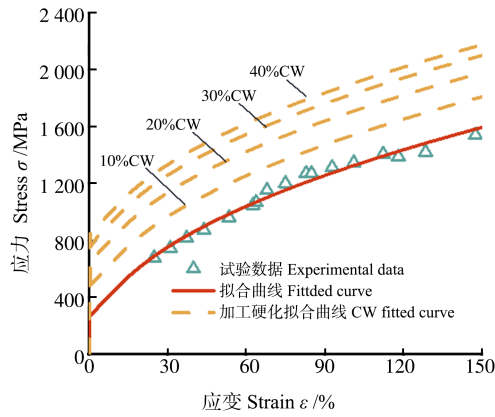


图 6 不同冷加工硬化量 316L 试验数据与拟合应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain curves for the 316L with CW

内聚力模型参数确定过程如下:

首先,建立 1T-CT ($t = 25.4 \text{ mm}$) 试样有限元计算模型,通过位移线性加载,模拟断裂韧性实验^{[27]45-82},由迭代计算得到了 316L 材料的内聚力模型基本参数,结果为 $\phi_{\text{ini}} = 300 \text{ N/mm}$, $\sigma_{\text{ini}} = \tau_{\text{ini}} = 2150 \text{ MPa}$, $\lambda_{\text{ini}} = 0.04$, $\alpha_{\text{ini}} = \beta_{\text{ini}} = 1.3$ 。模型计算的裂纹尖端应变与应力结果如图 7、图 8 所示,其中法向为垂直于裂纹扩展方向。由图 7、图 8 可以看出,材料完好情况下,裂纹尖端处产生较大塑性应变,其最大值出现在裂尖前方,同时裂纹前端一段距离会产生较大的法向应力。根据 MORAN B 等^[28-29]基于高斯定理提出的等效区域积分概念,本文计算该模型 J 积分值为 713.1 kJ/m^2 ,接近 325°C 下 316L 平均值,也在 MILLS W J^{[27]49} 试验的上下界范围内。

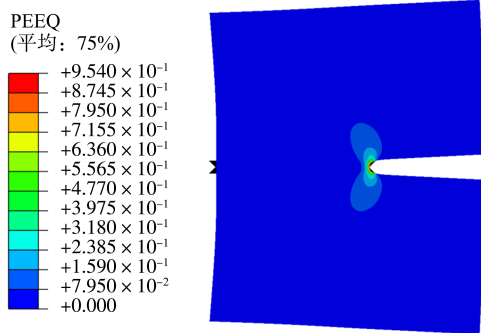


图 7 试件等效塑性应变云图

Fig. 7 Nephogram of specimen equivalent plastic strain

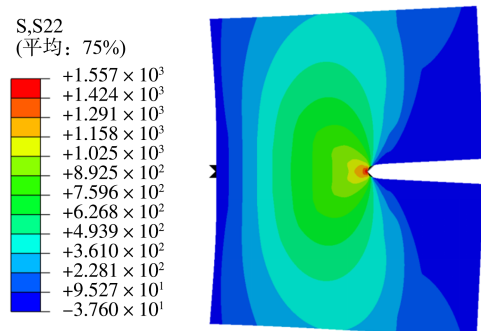


图 8 试件法向应力云图

Fig. 8 Nephogram of specimen normal stress

其次,确定完全退化参数。考虑高 DO 环境 CGR 对 DO 含量依赖性减弱^{[17]228},因此本文取 4×10^{-6} DO 为完全退化环境状态,通过迭代计算 ZHANG L 等^{[30]15-26} 试验结果,拟合得到完全退化参数: $\phi_{\text{end}} = 1 \text{ N/mm}$, $\sigma_{\text{end}} = \tau_{\text{end}} = 300 \text{ MPa}$, $\lambda_{\text{end}} = 0.04$, $\alpha_{\text{end}} = \beta_{\text{end}} = 6$ 。

再次,确定退化与降解参数。为保证材料的退化过程可以保持较长时间的延展性后再步入脆性阶段,本模型有效 TSL 曲线参数关于退化因子 χ 的指数参数取 $c_1 = 1$, $c_2 = 30$, $c_3 = 5$,最终 TSL 曲线如图 9 所示。降解模型由 ZHANG L 等^{[30]15-26} 试验结果迭代拟合,取值为: $k_2 = 12$, $k_3 = 0.971$, $k_4 = 1.8$, $k_5 = 6 \times 10^5$,由这些值代入的消耗速率方程较好地拟合了 DU D 等^{[17]233} 的实验结论,当 DO 浓度大于 0.2×10^{-6} 时,CGR 对 DO 含量的依赖性减弱。

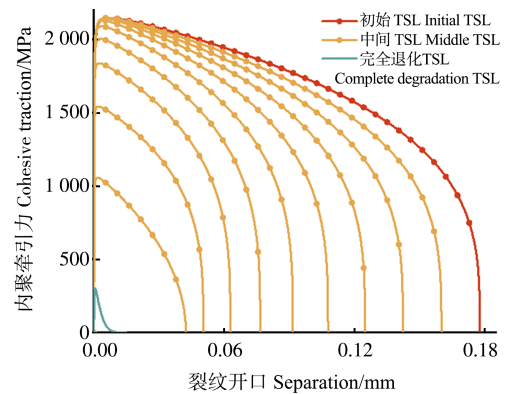


图 9 降解过程内聚牵引力变化图

Fig. 9 Degradation effect on TSL

CT 试样的负载通过应力强度集中因子设定,根据美国材料试验学会规范 E399-20a^{[23]20} 紧凑拉伸试样应力强度因子可通过式 (13) 求得。本文外载取 $P = 8395 \text{ N}$,对应应力强度因子约为 $K_I = 33 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 。

$$K_I = \frac{P}{B\sqrt{W}} \left(2 + \frac{a}{W} \right) \left[0.886 + 4.64 \frac{a}{W} - 13.32 \left(\frac{a}{W} \right)^2 + 14.72 \left(\frac{a}{W} \right)^3 - 5.6 \left(\frac{a}{W} \right)^4 \right] / \left(1 - \frac{a}{W} \right)^{3/2} \quad (13)$$

最后,确定坡度指标。由图 9 可以看出,坡度指标对 CGR 有较大影响。较小的坡度指标导致自定义内聚单元 TSL 前期线性阶段斜率变大,更快进入损伤阶段,即 DO 扩散更快,导致较大的 CGR。图 10、图 11 显示了其他参数不变时,坡度指标对裂纹扩展的影响。图 10 中曲线出现波动主要是由于单元失效导致的弹性跳动,较小的初始坡度指标会导致计算模型收敛困难。为同时兼具稳定性与计算效率,在后续仿真中,取 $\lambda = 0.04$ 。

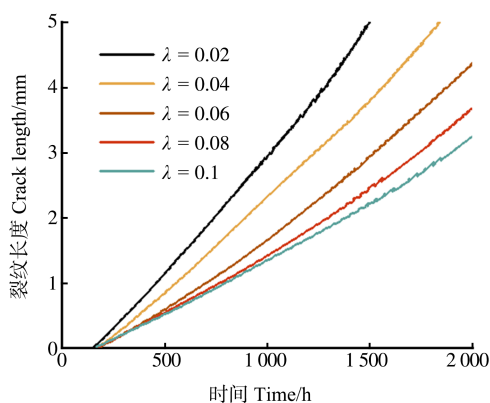


图 10 不同坡度指标裂纹扩展长度

Fig. 10 SCC crack growth under various slope indicator

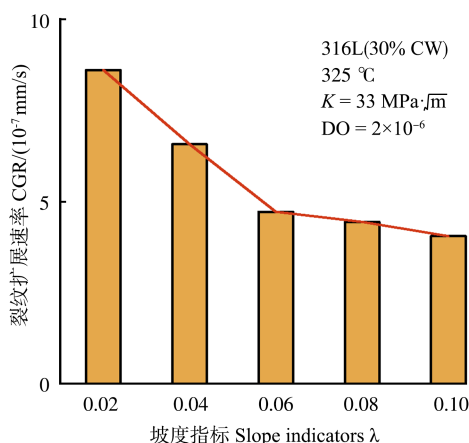


图 11 坡度指标对 CGR 的影响

Fig. 11 Effect of slope indicator on the CGR

2 结果与讨论

2.1 溶解氧对 CGR 的影响

本文根据 DU D 等^{[17]232} 试验标定调整因子 $k_1 = 1.03 \times 10^{-14}$, 实验条件如下: 恒应力强度因子 $K_I = 33 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, 环境温度 325°C , 30% CW, DO 含量 $0 \sim 2 \times 10^{-6}$ 。裂纹扩展速率的仿真与实验结果比较如表 1 与图 12 所示, 在 0.2×10^{-6} DO 含量时仿真与实验平均 CGR 误差在 9.12%, 其他两点误差在 4% 以下。由表 1、图 12 可以看出 DO 会对 CGR 产生较大影响, 当 DO 含量超过 0.2×10^{-6} 以后, CGR 对 DO 含量依赖性缓慢下降。本文所建模型与实验结果趋势吻合度很高, 验证了本文模型的准确性。

表 1 不同 DO 含量 CGR 仿真结果与试验^{[17]228-234} 结果比较

Tab. 1 Comparison between experimental and simulation results of CGR in different DO contents

DO 含量 DO content/ 10^{-6}	试验 CGR 值 Experiment CGR Value/(10^{-7} mm/s)	仿真 CGR 值 Simulation CGR Value/(10^{-7} mm/s)	误差 Error/%
0.2	4.585	4.167	9.117
0.7	5.63	5.833	3.606
2	6.383	6.575	3.008

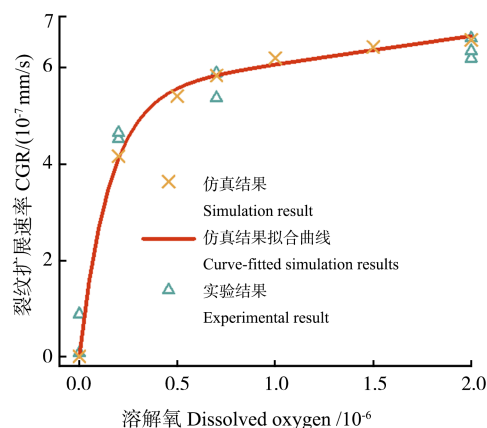


图 12 DO 含量对 CGR 的影响

Fig. 12 The effect of DO content on the CGR

CGR 随加载时间变化如图 13 所示。在前 165 h 为溶解氧扩散、加载阶段, 在此阶段裂纹尖端单元没有达到材料完全损伤状态, 裂纹不发生扩展。计算不同时间的裂纹尖端应力强度因子, 结果显示, 由于裂纹扩展导致裂纹长度变大, 仿真中的恒力加载方式导致裂纹应力强度因子变大, 得到的 CGR 符合 TERACHI T 等^{[31] 59-70} 通过试验结果总结发现规律: $13 \sim 40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 的区域, 裂纹扩展速率随着应力强度因子的增加而增加。

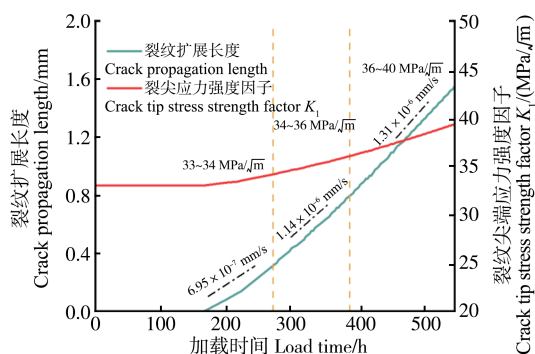


图 13 加载过程中裂纹扩展长度与应力强度因子变化

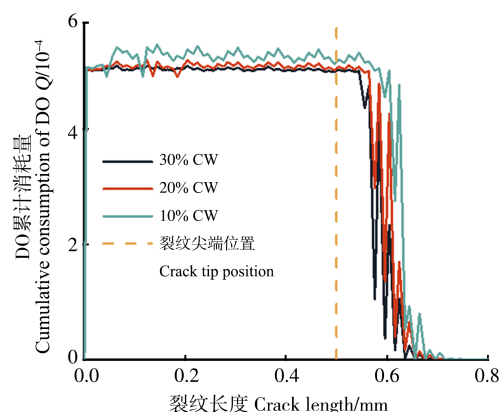
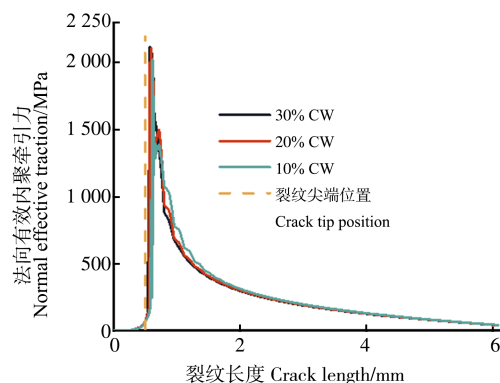
Fig. 13 Variation of crack propagation length and stress intensity factor during loading

2.2 加工硬化对 CGR 的影响

加工硬化会改变材料屈服强度, 屈服强度被许多学者证明是 SCC 过程中影响 CGR 的重要因素之一。大量实验测试表明, 加工硬化显著加速了奥氏体不锈钢 SCC 扩展速率, 甚至可以加速高达三个数量级^[32]。本文采用应力驱动裂纹扩展, 扩散-内聚力耦合模型可在确定模型与环境参数后, 仅改变屈服强度来预测屈服强度对裂纹扩展的影响。本文模拟屈服强度 250~900 MPa, 在仿真过程中过程 DO 累计消耗量如图 14 所示, 法向有效内聚牵引力如图 15 所示。

如图 14 所示, 较低 CW 需要更高的 DO 累计消耗 Q 才能实现钝化膜降解, 主要是因为较低的 T_{eff} 峰值需要更高的 DO 含量才能对内聚单元造成较大的影响。本

模型中单个塑性单元与4个内聚单元的绑定,内聚单元退化失效时会发生几个退化单元的跳跃,导致噪声较大、曲线波动。但从图4可以看出,当裂纹扩展后,如果CGR恒定,则 Q 将达到稳态值,如果CGR改变,则稳态 Q 也将随之改变,而其中 Q 的增长累计大多来自 T_{eff} 峰值时刻。

图14 屈服强度对 Q 的影响Fig. 14 Effect of yield strength on Q 图15 屈服强度对 T_{eff} 的影响Fig. 15 Effect of yield strength on T_{eff}

如图15所示,距离裂纹尖端越近, T_{eff} 越大,法向有效内聚牵引力峰值集中在裂纹尖端前方。加工硬化程度越高,屈服强度越大。模型计算结果显示较低的屈服强度会导致裂纹钝化,产生较大的塑性应变,降低有效内聚牵引力。加工硬化提高材料的屈服强度,会降低塑性变形量,提高有效内聚牵引力,导致更快的裂纹扩展速度。SEDLAK M^{[15]11}等总结试验与仿真结果发现在一定的应力强度因子下CGR与屈服强度 σ_y 在双对数坐标中呈线性关系(图16)。本文计算条件 $K_I = 33 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$,将仿真结果绘制于双对数坐标中,结果如图16所示,数据拟合曲线显示 $\text{CGR} \propto \sigma_y^{2.028}$ 。在320℃时,奥氏体不锈钢CT试件在应力强度因子为25~35 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ 时,文献中实验测量CGR与 σ_y 间的关系为 $\text{CGR} \propto \sigma_y^\alpha (\alpha = 2\sim 3)^{[31]69[33]}$,本文仿真结果与试验结果相符。

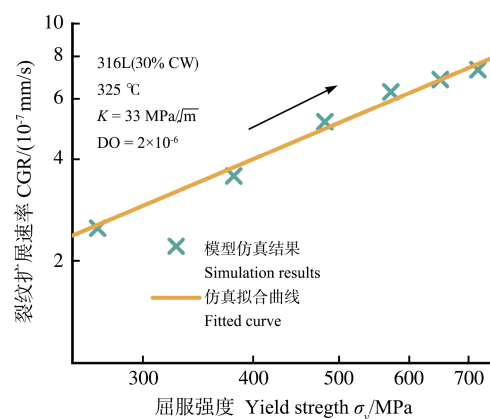


图16 屈服强度对CGR影响

Fig. 16 Effect of yield strength on CGR

3 结论

本文基于应力腐蚀的滑移-溶解理论,开发了一种扩散-内聚力耦合模型,对DO环境下316L不锈钢SCC过程进行了仿真研究,得到以下重要结论:

1) 通过标定的模型参数,模拟了高温水溶解氧环境下316L不锈钢应力腐蚀开裂过程,计算得到了不同溶解氧含量下材料应力腐蚀开裂裂纹扩展速率。

2) 模拟了高温水溶解氧环境下加工硬化对316L不锈钢应力腐蚀开裂的影响,计算结果表明,在模拟的325℃高温水中含 2×10^{-6} 溶解氧环境下,应力强度因子 $K_I = 33 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 时,316L不锈钢应力腐蚀开裂的CGR与屈服强度关系为 $\text{CGR} \propto \sigma_y^\alpha (\alpha = 2.028)$ 。

参考文献(References)

- [1] 张利涛,王俭秋. 国产锻造态核级管材316L不锈钢在高温高压水中的应力腐蚀裂纹扩展行为[J]. 金属学报, 2013, 49(8): 911-916.
- [2] ZHANG LiTao, WANG JianQiu. Stress corrosion crack propagation behavior of domestic forged nuclear grade pipe 316L stainless steel in high temperature and high pressure water [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2013, 49(8): 911-916 (In Chinese).
- [3] SCOTT P M, COMBRADE P. Corrosion in the nuclear power industry[J]. ASM Handbook, 2006, 13: 363-385.
- [4] ZHANG L T, WANG J Q. Effect of temperature and loading mode on environmentally assisted crack growth of a forged 316L SS in oxygenated high-temperature water[J]. Corrosion Science, 2014, 87: 278-287.
- [5] FENG Z C, CHENG X Q, DONG C F, et al. Effects of dissolved oxygen on electrochemical and semiconductor properties of 316L stainless steel[J]. Journal of Nuclear Materials, 2010, 407(3): 171-177.
- [6] CUI T M, XU X H, PAN D, et al. Comparison of stress corrosion cracking susceptibilities of 308L and 309L cladding layers in high-temperature water with various dissolved oxygen concentrations[J]. Journal of Nuclear Materials, 2022, 569: 153913.
- [7] 吴文博,张志明,王俭秋,等. 热老化316L不锈钢在模拟核电

- 溶解氧/氢高温高压水中应力腐蚀裂纹扩展行为[J]. 材料导报, 2020, 34(3): 6144-6150.
- WU WenBo, ZHANG ZhiMing, WANG JianQiu, et al. Stress corrosion cracking behavior of thermally aged 316L SS in simulated oxygenated/hydrogenated high temperature and pressure water in nuclear power plants[J]. Materials Reports, 2020, 34(3): 6144-6150 (In Chinese).
- [7] GONG K, WU M, XIE F, et al. Effect of dissolved oxygen concentration on stress corrosion cracking behavior of pre-corroded X100 steel base metal and the welded joint in wet-dry cycle conditions[J]. Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2020, 77: 103264.
- [8] LOU X Y, ANDRESEN P L, YANG J F, et al. Mechanical and metallurgical considerations on the effects of ppb-level chloride on stress corrosion cracking of low alloy steels in high-temperature water[J]. Corrosion Science, 2021, 179: 109136.
- [9] BARENBLATT G I. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture[J]. Advances in Applied Mechanics, 1962, 7: 55-129.
- [10] DUGDALE D S. Yielding of steel sheets containing slits [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1960, 8(2): 100-104.
- [11] XU X P, NEEDLEMAN A. Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1994, 42(9): 1397-1434.
- [12] JEMBLIE L, OLDEN V, MAINÇON P, et al. Cohesive zone modelling of hydrogen induced cracking on the interface of clad steel pipes[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(47): 28622-28634.
- [13] PU C, GAO Y F, WANG Y L, et al. Diffusion-coupled cohesive interface simulations of stress corrosion intergranular cracking in polycrystalline materials[J]. Acta Materialia, 2017, 136: 21-31.
- [14] 李云龙, 陈 波, 张克实. 45CrNiMoVA 高强度合金钢氢致断裂有限元模拟与试验研究分析[J]. 热加工工艺, 2024(2): 90-96.
- LI YunLong, CHEN Bo, ZHANG KeShi. Analysis finite element simulation and experimental study on hydrogen-induced fracture of 45CrNiMoVA high strength alloy steel [J]. Hot Working Technology, 2024(2): 90-96 (In Chinese).
- [15] SEDLAK M, ALFREDSSON B, EFSING P. A coupled diffusion and cohesive zone model for intergranular stress corrosion cracking in 316L stainless steel exposed to cold work in primary water conditions[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2019, 217: 106543.
- [16] SEDLAK MOSESSON M, ALFREDSSON B, EFSING P. A duplex oxide cohesive zone model to simulate intergranular stress corrosion cracking[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2021, 197: 106260.
- [17] DU D H, CHEN K, YU L, et al. SCC crack growth rate of cold worked 316L stainless steel in PWR environment [J]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 456: 228-234.
- [18] TURNBULL A. Modelling of crack chemistry in sensitized stainless steel in boiling water reactor environments[J]. Corrosion Science, 1997, 39(4): 789-805.
- [19] LI C Y, WAGNER M, LACKNER S, et al. Assessing the influence of biofilm surface roughness on mass transfer by combining optical coherence tomography and two-dimensional modeling [J]. Biotechnology and Bioengineering, 2016, 113(5): 989-1000.
- [20] PARK K, PAULINO G H, ROESLER J R. A unified potential-based cohesive model of mixed-mode fracture [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, 57(6): 891-908.
- [21] PARK K, PAULINO G H. Computational implementation of the PPR potential-based cohesive model in Abaqus: educational perspective [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2012, 93: 239-262.
- [22] TERACHI T, FUJII K, ARIOKA K. Microstructural characterization of SCC crack tip and oxide film for SUS 316 stainless steel in simulated PWR primary water at 320 °C[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2005, 42(2): 225-232.
- [23] ASTM. Standard test method for linear-elastic plane-strain fracture toughness of metallic materials: ASTM E399-20a [S]. West Conshohocken: ASTM International, 2021.
- [24] KAMAYA M, KAWAKUBO M. True stress-strain curves of cold worked stainless steel over a large range of strains [J]. Journal of Nuclear Materials, 2014, 451(1/2/3): 264-275.
- [25] KAMAYA M. Elastic-plastic failure assessment of cold worked stainless steel pipes [J]. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 2015, 131: 45-51.
- [26] VAN EETEN P, NILSSON F. Constant and variable amplitude cyclic plasticity in 316L stainless steel [J]. Journal of Testing and Evaluation, 2006, 34(4): 298-311.
- [27] MILLS W J. Fracture toughness of type 304 and 316 stainless steels and their welds [J]. International Materials Reviews, 1997, 42(2): 45-82.
- [28] MORAN B, SHIH C F. A general treatment of crack tip contour integrals [J]. International Journal of Fracture, 1987, 35(4): 295-310.
- [29] SHIVAKUMAR K N, RAJU I S. An equivalent domain integral method for three-dimensional mixed-mode fracture problems [J]. Engineering Fracture Mechanics, 1992, 42(6): 935-959.
- [30] ZHANG L T, WANG J Q. Effect of dissolved oxygen content on stress corrosion cracking of a cold worked 316L stainless steel in simulated pressurized water reactor primary water environment [J]. Journal of Nuclear Materials, 2014, 446(1/2/3): 15-26.
- [31] TERACHI T, YAMADA T, MIYAMOTO T, et al. SCC growth behaviors of austenitic stainless steels in simulated PWR primary water [J]. Journal of Nuclear Materials, 2012, 426(1/2/3): 59-70.
- [32] ARIOKA K, YAMADA T, TERACHI T, et al. Cold work and temperature dependence of stress corrosion crack growth of austenitic stainless steels in hydrogenated and oxygenated high-temperature water [J]. Corrosion, 2007, 63(12): 1114-1123.
- [33] 张克乾, 胡石林, 唐占梅, 等. 冷加工核电结构材料在高温高压水中应力腐蚀裂纹扩展行为的研究进展 [J]. 中国腐蚀与防护学报, 2018, 38(6): 517-522.
- ZHANG KeQian, HU ShiLin, TANG ZhanMei, et al. Review on stress corrosion crack propagation behavior of cold-worked nuclear structural materials in high temperature and high pressure water [J]. Journal of Chinese Society for Corrosion and Protection, 2018, 38(6): 517-522 (In Chinese).