

УДК 621.039 + 519.28

АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЕАКТОРНОЙ СТАЛИ МЕТОДАМИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И ПРИКЛАДНОЙ СТАТИСТИКИ

Рачков В.И., Образцов С.М., Конобеев Ю.В., Соловьев В.А. (ГНЦ РФ — ФЭИ им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск), Беломытцев М.Ю., Моляров А.В. (НИТУ «МИСиС», г. Москва)

В 1955—1961 гг. в ФЭИ под руководством В.А. Малых был разработан и внедрен в промышленное производство твэл с оболочкой из ферритно-мартенситной стали для использования в свинцово-висмутовом теплоносителе. Решение важной государственной задачи — создание высокоскоростных атомных подводных лодок — также стало возможным после оригинальной разработки твэла [1]. В последующие годы не прекращалось совершенствование стали ферритно-мартенситного класса с 12%-ным содержанием хрома, которая применяется в качестве конструкционного материала в быстрых реакторах.

Одним из направлений новой технологической платформы, принятой в настоящее время в Государственной корпорации «Росатом», выбрана разработка инновационных быстрых реакторов с напряженными температурными и дозовыми нагрузками, использующих свинец, свинец—висмут и натрий в качестве теплоносителя. В этой связи не потеряла актуальность разработка ферритно-мартенситной стали, обладающей повышенными характеристиками прочности и пластичности.

Определение оптимального химического состава и условий термообработки осложнено многофакторностью задачи и ее нелинейностью. Интенсификация исследований в этой области возможна на основе современных способов многомерного статистического анализа экспериментальных данных и нейросетевого моделирования [2, 3]. Развитие и применение методов, ориентированных на массивованные вычисления, в значительной мере обусловлено увеличением вычислительных мощностей современных компьютеров.

Ретроспектива применения нейросетевых и статистических методов в радиационном материаловедении. В 2002 г. в ФЭИ начали собирать и анализировать экспериментальную информацию о свойствах ферритно-мартенситной стали, накопленную в атомной отрасли, в целях нейросетевого моделирования процессов эволюции свойств под воздействием

нейтронного облучения. К 2009 г. были разработаны нейросетевые модели и выполнены расчеты, позволившие приступить к экспериментам [4—8].

В период с 2009 по 2012 г. в НИТУ «МИСиС» были получены экспериментальные сплавы с оптимизированным химическим составом. Результаты испытаний образцов опытных сплавов подтвердили корректность нейросетевых прогнозов и позволили определить диапазон содержания легирующих элементов в опытной стали для быстрых реакторов [9].

Прогнозы упрочнения ферритно-мартенситной стали марки ЭП-823 в зависимости от температуры облучения на основе нейросетевой модели при использовании бутстреп-метода были подтверждены экспериментальными исследованиями на ускорителе тяжелых ионов [10, 11]. Эксперименты показали, что разрабатываемая ферритно-мартенситная сталь имеет высокий предел текучести [12].

Наряду с компьютерной разработкой новой стали проводили исследования, уточняющие энергию активации самодиффузии железа в чистом железе, закономерности охрупчивания корпусной стали ВВЭР, распухания аустенитной стали, коррозионного растрескивания циркониевых сплавов [13—17]. Таким образом, методами нейросетевого моделирования и прикладной статистики был охвачен широкий диапазон актуальных задач радиационного материаловедения.

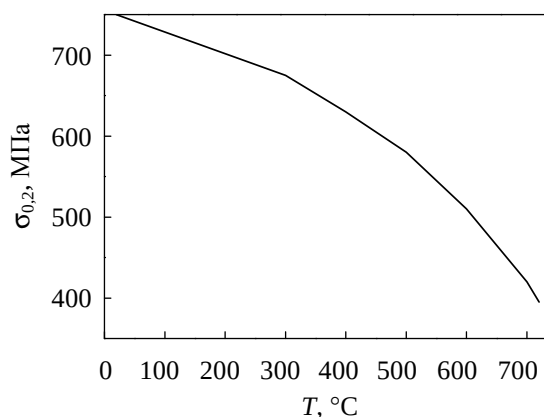
В настоящей статье приведены результаты компьютерного расчета распределения легирующих элементов в оптимальном по прочности химическом составе ферритно-мартенситной стали.

Вычислительный эксперимент. В компьютерном эксперименте использовали нейросетевую модель зависимости предела текучести от химического состава, условий термообработки и температуры испытания, разработанную на основе испытания образцов экспериментальных сплавов [18]. Целью численного эксперимента являлось определение содержания углерода,

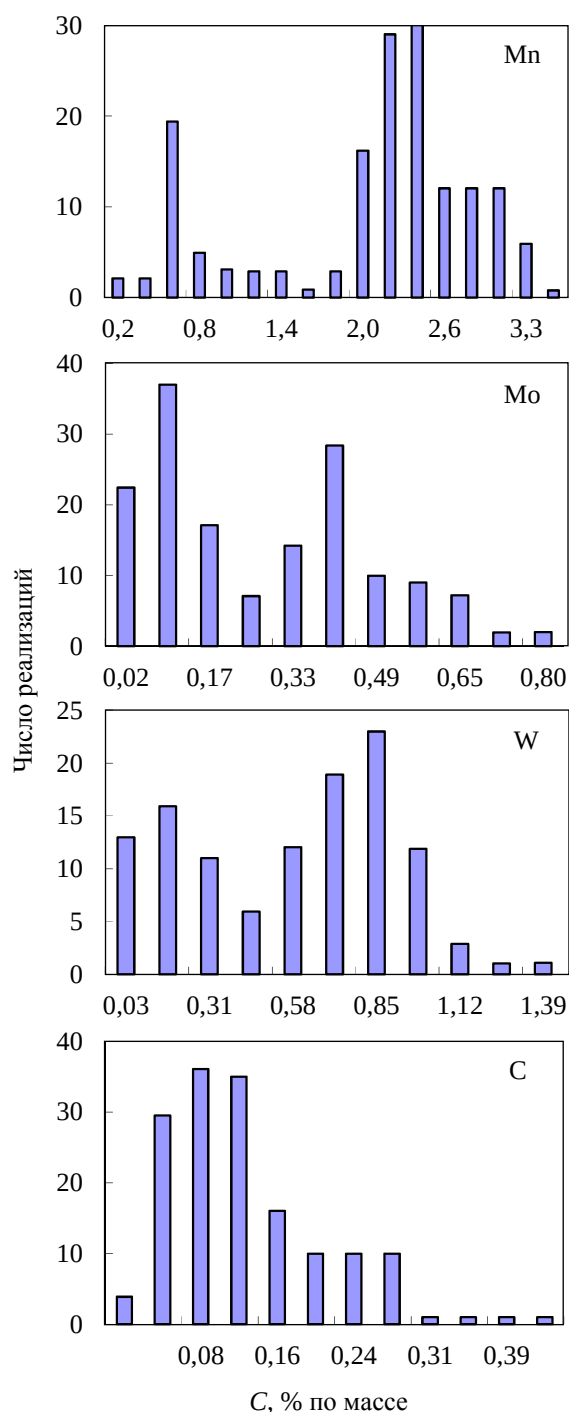
марганца, кремния, ванадия, молибдена и вольфрама, обеспечивающего максимальный предел текучести в высокотемпературном интервале 500—700 °С, содержание остальных легирующих элементов сохранялось на постоянном уровне. Одновременно при комнатной температуре на предел текучести было наложено технологическое ограничение 600—800 МПа.

Предварительные расчеты показали, что температурная зависимость предела текучести имеет пологий вид, без характерного для ферритно-мартенситной стали спада прочности после 600 °С (рис. 1). Расчетное содержание варьируемых легирующих элементов обеспечивает максимальное приближение к заданному пределу текучести. За основу был выбран следующий химический состав, % по массе: углерод 0,14, марганец 2,1, хром 12, никель 0,05, кремний 0,7, ванадий 0,3, вольфрам 0,9, бор 0,004, молибден 0,5, азот 0,04, железо — остальное. Принятая термообработка — нормализация от 1050 °С, 30 мин, отпуск 720 °С, 2 ч.

Для начального содержания расчет осуществлялся 150 раз. По численному эксперименту строили частотные гистограммы распределения содержания химических элементов. Расчеты показали, что содержание ванадия составляет 0,25, кремния — 0,8% по массе. Частотные гистограммы распределения содержания вольфрама, молибдена и марганца имеют двугорбую форму (рис. 2). Это может свидетельствовать в пользу существования двух диапазонов содержания углерода, марганца, кремния, ванадия, молибдена и вольфрама, обеспечивающих примерно одинаковый предел текучести с разным соотношением содержания легирующих элементов. Другими словами, между содержа-



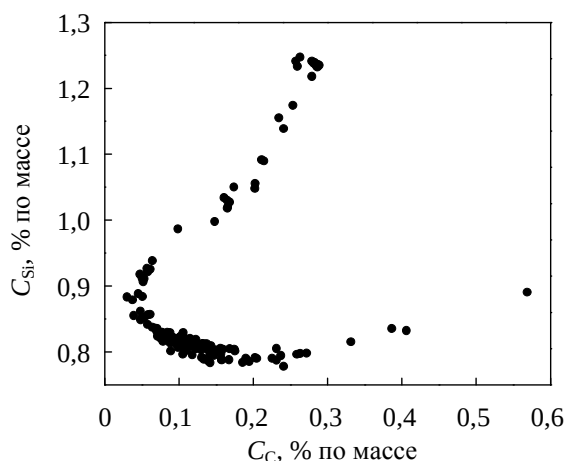
Р и с. 1. Модельная температурная кривая предела текучести



Р и с. 2. Частотная гистограмма распределения содержания марганца, молибдена, вольфрама, углерода в оптимальных химических составах опытных сплавов

нием компонентов сплавов могут существовать взаимосвязи, благодаря которым сохраняется постоянство предела текучести [8]. Так, показанная на рис. 3 зависимость с двумя расходящимися ветвями имеет начало при содержании кремния ~0,9% по массе.

Обсуждение результатов. Содержание кремния ~0,8% по массе в оптимальном хими-



Р и с. 3. Зависимость содержания кремния от содержания углерода

ческом составе соответствует эксперименту, свидетельствующему о том, что в стали 12% Cr—Mo—W—V—Nb при этой концентрации существует максимум предела прочности и текучести [19]. Более того, предполагается, что превышение этого порогового содержания приводит к снижению прочностных свойств. Содержание кремния 1% по массе является максимально допустимым для стали с 12%-ным содержанием хрома. Отметим, что на рис. 3 видно резкое изменение характера расчетной кривой при содержании кремния ~1% по массе. Такое ограничение содержания кремния может быть вызвано выделением при длительном нагреве сложных силицидов [19]. Растворенный ванадий не упрочняет твердый раствор, но способен образовывать высокодисперсные карбиды, нитриды и карбонитриды. Вероятно, эти противоположные свойства ванадия и определяют его оптимальное содержание, которое согласно численному эксперименту равно 0,25% по массе.

Таким образом, компьютерный эксперимент качественно совпадает с опытными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Прометеевский человек. К 90-летию со дня рождения В.А. Малых (1923—1973). Воспоминания, документы, фотографии. Обнинск, ГНЦ РФ—ФЭИ, 2013. 258 с.
2. Горский В.Г. Прикладная математическая статистика — наш профиль. — Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 1997, № 1, с. 96—100.
3. Kemp R., Cottrell G., Bhadeshia H. e.a. Neural-network analysis of irradiation hardening in low-activation steels. — J. Nucl. Mater., 2006, v. 348, p. 311—328.
4. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Нейросетевая модификация стали ферритно-мартенситного класса ЭП-450 по критерию максимума прочности и пластичности. — Перспективные материалы, 2005, № 4, с. 14—19.
5. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Соловьев В.А., Рачков В.И. Нейросетевое моделирование прочностных свойств реакторных сталей. — В сб.: XV Межд. конф. по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению. Алушта, 10—15 июня 2002, с. 105—106.
6. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Нейросетевой анализ кратковременных механических свойств сталей ферритно-мартенситного класса. — Физика и химия обработки материалов, 2004, № 2, с. 92—97.
7. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Разработка нейросетевой модели кратковременных механических свойств реакторных сталей и интерфейса пользователя. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Материаловедение и новые материалы, 2006, вып. 1(66), с. 418—424.
8. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Нейросетевые эксперименты по взаимовлиянию легирующих элементов на механические свойства 12% Cr ферритно-мартенситных сталей. — Известия вузов. Ядерная энергетика, 2008, № 3, с. 119—124.
9. Беломытцев М.Ю., Михайлов М.А., Образцов С.М. и др. Экспериментальное исследование влияния марганца на прочностные свойства сталей ферритно-мартенситного класса с 12%-ным содержанием хрома. — Известия вузов. Черная металлургия, 2011, № 3, с. 45—47.
10. Obratsov S.M., Birzhevoy G.A., Konobeev Yu.V., Rachkov V.I. Bootstrap calculation of ultimate strength temperature maxima for neutron irradiated ferritic/martensitic steels. — J. Nucl. Mater., 2006, v. 359, p. 263—267.
11. Лысова Г.В., Биржевой Г.А., Образцов С.М. Температурная зависимость радиационного упрочнения стали ЭП-823 после облучения ионами Ni⁺⁺ с энергией 7 МэВ. — Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, № 4, с. 36—41.
12. Рачков В.И., Образцов С.М., Соловьев В.А. и др. Оптимизация химического состава ферритно-мартенситной стали в целях повышения кратковременных механических свойств. — Атомная энергия, 2013, т. 115, вып. 1, с. 22—27.
13. Рачков В.И., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Бутстреп-анализ температурной зависимости самодиффузии железа в α -, γ - и δ -фазах железа. — В сб.: XVIII Межд. сов. «Радиационная физика твердого тела». М., 2008, с. 277—288.
14. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В. и др. Нейросетевой анализ влияния легирующих элементов на радиационное охрупчивание материалов корпусов ВВЭР-440. — Атомная энергия, 2006, т. 101, вып. 5, с. 353—358.
15. Образцов С.М., Конобеев Ю.В., Печенкин В.А., Рачков В.А. Нейросетевое исследование зависимости охрупчивания от упрочнения стали для реакторов

- ВВЭР. — Вопросы материаловедения, 2009, № 4, с. 101—107.
16. **Образцов С.М., Конобеев Ю.В., Печенкин В.А., Соловьев В.А.** Нейросетевое исследование влияния кремния и титана на радиационное набухание аустенитной нержавеющей стали. — В сб.: XX Межд. сов. «Радиационная физика твердого тела». Севастополь, 2010, с. 63—67.
17. **Образцов С.М., Печенкин В.А., Примаков Н.Г., Андрианов А.Н.** Нейросетевой прогноз максимума предела текучести сплава Zr+2,5% Nb в зависимости от коэффициента стехиометрии гидрида циркония. — Физика и химия обработки материалов, 2009, № 2, с. 33—35.
18. **Рачков В.И., Беломытцев М.Ю., Конобеев Ю.В. и др.** Анализ предела текучести ферритно-мартенситной стали методами нейросетевого моделирования и главных компонентов. — Вопросы материаловедения, 2014, № 1(77), с. 11—19.
19. **Ланская К.А.** Высокохромистые жаропрочные стали. М.: Металлургия, 1976. 216 с.

УДК 621.039.58

НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ТРАНСМУТАЦИИ Np , Am , Cm *Власкин Г.Н., Рачков В.И., Хомяков Ю.С. (ИТЦП «Прорыв», г. Москва)*

Одним из преимуществ быстрых реакторов является повышенный избыток нейтронов, не участвующих в поддержании цепной реакции. Фундаментальные ядерные свойства основных актиноидов — урана и плутония, такие, как большее число вторичных нейтронов деления в сочетании с меньшим сечением захвата нейтронов в быстрой области энергии дали импульс идеям расширенного воспроизводства топлива, полного энергетического использования ресурсов природного урана в условиях замкнутого ядерного топливного цикла. Впервые измеренный на реакторе БР-1 коэффициент воспроизводства топлива составил $2,5 \pm 0,2$, хотя последующие исследования его снизили до технической реализуемого $\sim 1,5$.

Однако воспроизводство — не единственный способ извлечения пользы от избытка нейтронов в быстрых реакторах. В настоящее время приемлемым считается КВ $\sim 1,05$. По разным соображениям рассматриваются варианты активной зоны без зон воспроизводства, хотя и не все специалисты разделяют это мнение. Не вступая в дискуссию, отметим, что изучение и раскрытие дополнительных и новых возможностей использования нейтронного потенциала быстрых реакторов представляется крайне полезным, отметим две возможности — трансмутация Np , Am , Cm и производство изотопов для радиационной технологии, медицины и научных исследований. Обе используют, по сути, ту же идею утилизации невостребованных в цепной

реакции нейтронов для трансмутационных процессов в широком их понимании как процессов, связанных с превращением одних нуклидов в другие. Только список материалов при этом расширяется на нептуний, америций, кюрий и стартовые мишени для получения изотопов.

Совмещение трансмутации или производства изотопов с выработкой электроэнергии создает предпосылки для достижения высоких технико-экономических показателей установки, решения не только технических, но и социальных задач по уничтожению радиоактивных отходов и получению полезных и востребованных радионуклидов. Это важно, поскольку обе проблемы в настоящее время рассматриваются как затратные. В настоящей статье основное внимание уделено нейтронно-физическим аспектам трансмутации нептуния и америция.

Специфика трансмутации в быстрых реакторах. Трансмутация получила количественное выражение в виде принципа радиационно-эквивалентного захоронения [1]. Как известно, его суть заключается в достижении радиационной эквивалентности между потребляемым природным ураном (и торием) и направляемыми на захоронение радиоактивными отходами. Исследования [1] показали, что радиационная эквивалентность не может быть достигнута при захоронении в составе отходов Np , Am , Cm . С нейтронно-физической точки зрения их ядерные свойства не привлекательны из-за высоких сечений радиационного захвата. Тем не менее при