

11. **Nogita K., Une K.** Irradiation induced recrystallization in high burnup UO_2 fuel. — *Ibid.*, 1995, v. 226, p. 302—310.
12. **Une K., Hirai M., Nogita K. e.a.** Rim structure formation and high burnup fuel behavior of large-grained UO_2 fuels. — *Ibid.*, 2000, v. 278, p. 54—63.
13. **Schimtz F., Papin J.** High burnup effects on fuel behaviour under accident conditions: the tests CABRI REP-Na. — *Ibid.*, 1999, v. 270, p. 55—64.
14. **Spino J., Baron D., Coquerelle M., Stalios A.** High burn-up rim structure: evidences that xenon depletion, pore formation and grain subdivision start at different local burnups. — *Ibid.*, 1998, v. 256, p. 189—196.
15. **Spino J., Papaioannou D.** Lattice parameter changes associated with the rim-structure formation in high burnup UO_2 fuels by micro X-ray diffraction. — *Ibid.*, 2000, v. 281, p. 146—162.
16. **Thomas L., Beyer C., Charlot L.** Microstructural analysis of LWR spent fuels at high burnup. — *Ibid.*, 1992, v. 188, p. 80—89.
17. **Nakae N., Harada A., Kirihaara T., Nasu S.** Irradiation induced lattice defects in UO_2 . — *Ibid.*, 1978, v. 71, p. 314—319.
18. **Nakae N., Kirihaara T., Nasu S.** Irradiation induced volume change in UO_2 . — *Ibid.*, 1978, v. 74, p. 1—9.
19. **Matzke HJ., Wiss T.** Radiation damage in nuclear materials. — Rev. Article in Annual Report of Institute for Transuranium Elements, 2000, p. 30—42.
20. **Rest J., Hofman G.** An alternative explanation for evidence that xenon depletion, pore formation, and grain subdivision begin at different local burnups. — *J. Nucl. Mater.*, 2000, v. 277, p. 231.
21. **Kinoshita M.** Towards the mathematical model in rim structure formation. — *Ibid.*, 1997, v. 248, p. 185—190.
22. **Griesmeyer J., Ghoniem N.** The response of fission gas bubbles to the dynamic behaviour of point defects. — *Ibid.*, 1979, v. 80, p. 88—101.
23. **Хирт Дж., Лоте И.** Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
24. **Olander D.** Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements. TID-26711-P1, US Technical Information Center, Springfield, VA, 1976.
25. **Chkuaseli V., Matzke HJ.** Modeling of Microstructure Transformation (Rim Effect) in High Burnup LWR Nuclear Fuels. The Physical Aspects of the RIM Effect in Uranium Dioxide. Institute for Transuranium Elements, Intern. Report, July, 1996.
26. **Spino J., Vennix K., Coquerelle M.** Detailed characterization of the rim microstructure in PWR fuels in the burnup range 40—67 GW/tU. — *J. Nucl. Mater.*, 1996, v. 231, p. 179.
27. **Baron D., Hermitte B., Piron J.** Microstructure and fracture toughness characterization of irradiated PWR fuels in the burnup range 40—67 GW/tU. — In: Proc. IAEA Techn. Committee Meeting on Advances in Pellet Technology for Improved Performance at High Burnups, Tokyo, Japan, Oct. 29—Nov. 1, 1996.

Поступила в Редакцию 18.08.03

УДК 519.28+621.039

НЕЙРОСЕТЕВОЙ АНАЛИЗ ПЛАСТИЧНОСТИ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭП-450 ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ

*Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В., Соловьев В.А., Силкина О.С.
(ГНЦ РФ — ФЭИ им. А.И. Лейтунского), Рачков В.И. (Минатом РФ)*

Сталь ферритно-мартенситного класса находит все более широкое применение в ядерной энергетике. Ее главными преимуществами являются высокое сопротивление распуханию, низкая скорость радиационной ползучести и невысокий уровень наведенной активности. Немаловажна и дешевизна по сравнению со стоимостью стали аустенитного класса или высоконикелевых сплавов. К сожалению, сталь это-

го типа не лишена недостатков, к которым, в первую очередь, следует отнести склонность к низкотемпературному радиационному охрупчиванию [1, 2], недостаточную жаропрочность, пониженную коррозионную стойкость при хранении в бассейнах выдержки отработавших ТВС [1]. Среди 12%-ной хромистой стали ферритно-мартенситная ЭП-450 (1X13M2БФР) получила наибольшее распространение. В частности, она используется для изготовления шестигранных чехлов и гильз СУЗ БН-600.

Модификация химического состава реакторной стали в принципе позволяет получить конструкционные материалы, физико-механические свойства которых удовлетворяют требуемым для проектируемых ядерных реакторов. Продуктивным способом исследования влияния химического состава на механические свойства может оказаться использование нейросетевой технологии [3], показавшей свою эффективность при прогнозировании пределов прочности стали указанного типа [4].

В настоящей статье представлены результаты вычислительного эксперимента с нейросетевой моделью, имитирующей влияние химического состава на пластические свойства стали ЭП-450.

Экспериментальные данные и нейросетевая модель. На основе данных испытаний образцов различных марок ферритно-мартенситной стали рассматриваемого класса (ЭП-450, ЭП-823 и др.) был сформирован массив экспериментальных данных с указанием температуры облучения и испытания, повреждающего флюенса, концентрации легирующих добавок, условий термообработки, степени холодной деформации. Матрица независимых переменных состоит из 26 столбцов и 230 строк и содержит информацию о результатах испытаний как исходных, так и облученных нейтронами образцов. Максимальный флюенс и наибольшая температура облучения составляют 108 смещ./ат. и 700 °С соответственно, максимальная температура испытаний 800 °С. В качестве зависимой переменной было выбрано общее относительное удлинение.

Подготовленную выборку применяли для поиска настроечных коэффициентов искусственной нейронной сети типа 4-слояного перцептрона [5]. Структуру сети выбирали по критерию минимума суммы квадратов отклонений между расчетными и экспериментальными значениями относительного удлинения. В результате была получена конфигурация, включающая 26 нейронов во входном слое, 12 — в первом ассоциативном и 18 — во втором. Выходной слой состоял из одного узла.

Тестирование разработанной модели. Адекватность модели проверяли по данным измерения относительного удлинения необлученной стали ЭП-450, которые не использовали при обучении. Ее химический состав приведен в таблице. Условия термообработки: нормализация 1050 °С в течение 30 мин, отпуск 720 °С, 1 ч. На рис. 1 видно, что экспериментальные и расчетные данные удовлетворительно согласуются.

Затем модель использовали для модификации химического состава по критерию максимума суммарной пластичности (Δ , %) — суммы относительного удлинения при температуре испытания 20, 300, 350, 400, 500, 600 °С:

$$\Delta = \sum_i \delta_i(T). \quad (1)$$

Реальный и расчетный химический состав стали ЭП-450

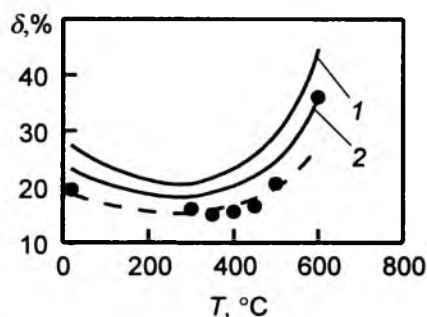
Элемент	Состав, мас. доля, %		
	Исходный	Модифицированный	
		1	2
C	0,14	0,05	0,1
Si	0,2	0,003	0,11
Mn	0,31	4,3	4,76
Cr	12,95	11	11
Ni	0,2	0,11	0,073
V	0,22	0,04	0,055
Mo	1,54	1,13	0,78
Nb	0,47	0,23	0,21
B	0,004	0,0017	0,0021
S	0,009	0,001	0,001
P	0,017	0,011	0,012

Результаты вычислительного эксперимента. Целью эксперимента являлась максимизация величины Δ , рассчитанной по разработанной модели, путем варьирования химического состава при фиксированных условиях термообработки и нулевой холодной деформации. Массовая доля хрома была ограничена 11—13%, суммарная массовая доля легирующих компонентов поддерживалась равной ~17%. Первоначально нижняя граница изменения массовой доли углерода выбиралась равной 0,05%, доли остальных компонентов оставались свободными (см. таблицу, модифицированный химический состав 1, обеспечивающий более высокие значения пластичности, что и демонстрирует кривая 1 на рис. 1).

Так как на практике затруднительно получить сталь с очень низкой массовой долей углерода и кремния, были введены ограничения этой доли: 0,1% каждого (см. таблицу, состав 2, кривую 2 на рис. 1).

Сравнение расчетных кривых для всех трех химических составов показывает, что полученные результаты согласуются с известными данными о влиянии некоторых легирующих добавок на пластические свойства реакторной стали. Например, увеличение содержания углерода и кремния приводит к снижению пластичности [6].

Отметим значительное повышение содержания марганца в составах 1 и 2 по сравнению с исходным. Это заставило подробнее исследовать изменение содержания легирующих компонентов при последовательном повышении массовой доли углерода от 0,01 до 0,175% с вычислением на каждом шаге оптимального содержания остальных компонентов с учетом ограничений на концентрацию хрома.



Р и с. 1. Расчетная по нейросетевой модели с исходным (—) и модифицированным химическим составом 1 (1), 2 (2) и экспериментальная зависимость (●) относительного удлинения необлученной стали ЭП-450 от температуры испытания

Было проведено 18 вычислений и соответственно получено 18 химических составов. По этим данным оценивалась [7] мультипликативная модель, позволяющая при вычислении пластичности по выражению (1) учесть возможные корреляции между концентрацией легирующих компонентов, вызванные образованием фаз различного состава:

$$\Delta = \frac{138,9 C_{\text{Mn}}^{0,00083} C_{\text{Ni}}^{0,085} C_{\text{B}}^{0,0077} C_{\text{P}}^{0,019}}{C_{\text{C}}^{0,22} C_{\text{Si}}^{0,053} C_{\text{Mo}}^{0,012} C_{\text{Nb}}^{0,022} C_{\text{S}}^{0,023} C_{\text{V}}^{0,048}}, \quad (2)$$

где C — массовая доля соответствующего элемента, %. Массовая доля хрома для всех рассчитанных химических составов сохранялась равной 11% — нижней границе выбранного интервала.

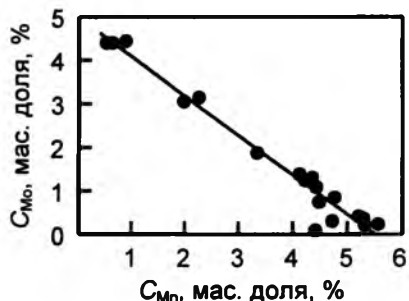
По уравнению (2) была рассчитана суммарная пластичность необлученной ферритно-мартенситной стали ЭИ-852, отожженной при 850 °С и испытывавшейся при той же температуре, что и сталь ЭП-450, следующего химического состава, мас. доля, %: С 0,12, Si 2,04, Mn 0,33, Ni 0,39, Mo 1,66, S 0,007, P 0,008. Незначительное расхождение между расчетной 124,6% и экспериментальной пластичностью 122,6% говорит о корректности этого уравнения.

На рис. 2 представлена зависимость суммарной пластичности от содержания углерода, из которой видно резкое ее изменение при массовой доле углерода 0,17%. На этом же рисунке приведена аппроксимирующая кривая, рассчитанная по эмпирическому уравнению

$$\Delta = \alpha \left[\beta + \ln \left(\frac{\gamma}{C_{\text{C}}} - 1 \right) \right]. \quad (3)$$

Параметры этого уравнения $\alpha = 26,3$, $\beta = 10,8$, $\gamma = 0,192$ оценивали с помощью методов нелинейного регрессионного анализа [8].

Р и с. 2. Зависимость суммарной пластичности, рассчитанной по нейробсетевой модели (●) и уравнению (3) (—), от концентрации углерода



Р и с. 3. Взаимное влияние концентрации молибдена и марганца в оптимальном составе: ● — вычислительный эксперимент; — — расчет по уравнению (4)

На рис. 3 видно, что между содержанием марганца и молибдена в стали существует отрицательная корреляция. Здесь же приведена аппроксимирующая кривая, рассчитанная по регрессионному уравнению

$$C_{\text{Mo}} = 5 - 0,9 C_{\text{Mn}}. \quad (4)$$

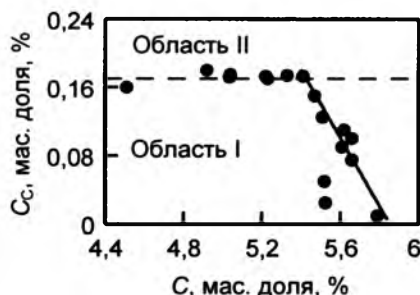
Обсуждение результатов. Изменение характера зависимости пластичности от массовой доли углерода в критической точке $C_{\text{C}} \sim 0,17\%$ (см. рис. 2), возможно, вызвано переходом углерода из раствора в карбиды. Согласно выражению (3) его массовая доля не может превышать 0,192%, так как логарифм отрицательных чисел не существует. Следовательно, эта доля асимптотически ограничивает сверху интервал, в пределах которого справедливо уравнение (3).

Уравнение (4), вероятно, отражает существование в ферритно-мартенситной стали интерметаллида переменного состава, образованию которого, в частности, способствует высокое содержание молибдена. Известно, что присутствие этой фазы снижает пластичность и коррозионную стойкость ферритно-мартенситной стали [9]. В принципе, снижение концентрации молибдена и увеличение концентрации марганца в соответствии с уравнением (3) может благоприятно отразиться на антикоррозионных свойствах стали ЭП-450. Кроме того, это может дать значительный экономический эффект, так как марганец гораздо дешевле молибдена, а также понизить наведенную радиоактивность. Однако радиационная стойкость ферритно-мартенситной стали с высоким содержанием марганца почти не изучена.

Так как основой численного эксперимента являлся расчет пластичности при нарастании содержания углерода, то другой возможной причиной связи концентрации молибдена и марганца является их перераспределение в сложных карбидах. Если это предположение правильно, то изменение содержания углерода, марганца и молибдена должно быть согласовано.

Приведенная на рис. 4 расчетная зависимость массовой доли углерода от суммарной массовой доли марганца и молибдена показывает, что данные можно разделить на две группы, границей между которыми является изоконцентрационная линия $C_C = 0,17\%$. В области $5,4\% < C < 5,84\%$ между ними просматривается почти линейная зависимость. Если игнорировать две точки при $C \sim 5,5\%$, то эта линейная зависимость имеет вид

$$C_C = 2,3 - 0,4C. \quad (5)$$



Р и с. 4. Зависимость концентрации углерода от суммарной концентрации марганца и молибдена: ● — расчет по нейросетевой модели; — — аппроксимация (5)

При этом коэффициент детерминации равен 0,89, критерий Фишера — 42, что говорит об адекватности регрессии (5). При массовой доле углерода 0,17% и выше зависимость (5) не соблюдается. Такое поведение можно интерпретировать как результат формирования карбидной и интерметаллидной фаз в области I и достижение состояния равновесия в области II (см. рис. 4).

Заметим, что тенденция к снижению концентрации никеля, молибдена и ниобия и повышению содержания марганца в рассчитанных химических составах совпадает с направлением поиска химического состава стали 16X12B2ФТаР [10] с быстрым спадом наведенной активности, мас. доля, %: С 0,14, Si 0,37, Mn 0,94, Cr 11,2, Ni < 0,01, V 0,29, Mo 0,01, Nb < 0,01, В 0,004.

Качественное соответствие результатов машинного (см. таблицу) и реального химического состава стали 16X12B2ФТаР говорит о принципиальной возможности компьютерной разработки стали с заранее заданными свойствами: при этом большое значение имеет расширение множества варьируемых факторов путем включения в их число условий термообработки, от которых существенно зависит структурное состояние и фазовый состав. С практической точки зрения необходим расчет химического состава и режимов термообработки по комбинированному критерию максимума прочности и пластичности.

В настоящее время в ГНЦ РФ — ФЭИ в этом направлении интенсивно проводятся работы по накоплению обобщенного массива экспериментальных данных для ферритно-мартенситной стали и поиск адекватной нейросетевой модели.

Выводы. На основе экспериментальных данных разработана адекватная нейросетевая модель изменения относительного удлинения стали ферритно-мартенситного класса с 12%-ным содержанием хрома в зависимости от химического состава. Имитационный эксперимент показал принципиальную возможность компьютерного моделирования химического состава конструкционных материалов ядерных реакторов с заранее заданными свойствами. Необходима разработка нейросетевой модели и расчет с ее помощью оптимального химического состава и режимов термообработки по комбинированному критерию максимума прочности и пластичности облученной нейтронами стали.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Медведева Е.А., Бибилашвили Ю.К., Казеннов Ю.И. и др. Перспективные высокохромистые стали для применения в оболочках твэлов реакторов на быстрых нейтронах. — Физика и химия обработки материалов, 2001, № 6, с. 26—31.
2. Васина Н.К., Гришмановская Р.Н., Игнатов В.А. и др. Влияние больших повреждающих доз облучения на аустенитную и ферритно-мартенситную стали для активной зоны быстрых реакторов. — Труды Межд. конф. по радиационному материаловедению, Алушта, 22—25 мая 1990 г., т. 3, Харьков, 1990, с. 35—42.
3. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации. М.: Финансы и статистика, 2002.
4. Образцов С.М., Биржевой Г.А., Соловьев В.А., Рачков В.И. Нейросетевое моделирование прочностных свойств реакторных сталей. — Труды XV Межд. конф. по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению, Алушта, Крым, 2002, с. 105—106.
5. Розенблатт Ф. Принципы нейродинамики. Перцептрон и теория механизмов мозга. М.: Мир, 1965.
6. Меськин В.С. Основы легирования стали. М.: Metallurgizdat, 1959.
7. Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е. Прикладной линейный регрессионный анализ. М.: Финансы и статистика, 1987.
8. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. Т. 2. М.: Финансы и статистика, 1986.
9. Томашов Н.Д., Чернова Г.П. Теория коррозии и коррозионно-стойкие конструкционные сплавы. М.: Metallurgiya, 1986.
10. Иолтуховский А.Г., Леонтьева-Смирнова М.В., Чернов В.М. и др. Разработка жаропрочной 12%-ной хромистой стали 16X12B2ФТaP нового поколения с быстрым спадом наведенной активности для атомной энергетики России. — Металловедение и термическая обработка металлов, 2002, № 11, с. 60—64.

Поступила в Редакцию 30.07.03

УДК 621.039.519

ВЛИЯНИЕ ГЛУБИНЫ ВЫГОРАНИЯ И ВЫДЕРЖКИ ОБЛУЧЕННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА НА ОТНОШЕНИЕ МАССЫ Am, Cm, Np И ДЕЛЯЩЕГОСЯ ПЛУТОНИЯ

*Габараев Б.А., Ганев И.Х., Лопаткин А.В., Муратов В.Г., Орлов В.В.
(ФГУП НИКИЭТ им. Н.А. Доллежалея)*

Перспективы ядерной энергетики нашей страны состоят в развитии системы быстрых реакторов наряду с существующей и увеличивающейся системой тепловых реакторов, работающих на обогащенном уране до исчерпания запасов природ-