УДК 519.28 + 621.039

# НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО ВЗАИМОВЛИЯНИЮ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНЫХ СТАЛЕЙ С 12-ПРОЦЕНТНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ХРОМА

<u>С.М. Образцов\*, Г.А. Биржевой\*, Ю.В. Конобеев\*, В.И. Рачков\*\*,</u> В.А. Соловьев\*

\*ГНЦРФ-Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск

<sup>\*\*</sup>Росатом, г. Москва



Перспективной стратегией в разработке ферритно-мартенситной ( $\phi/m$ ) стали с повышенной жаропрочностью для БН-800 может явиться применение методов искусственного интеллекта. В настоящей работе представлены результаты компьютерных экспериментов, выполненных на основе нейросетевой модели. В частности, расчеты показали, что увеличение содержания марганца вместе с согласованным уменьшением содержаний молибдена и ниобия может повысить жаропрочность  $\phi/m$  сталей.

# **ВВЕДЕНИЕ**

Исследование комплексного влияния легирующих элементов на механические свойства реакторных сталей является важной задачей при поиске материалов с улучшенными служебными характеристиками [1, 2, 3]. Например, для надежной работы БН-800 необходима ф/м сталь с повышенной жаропрочностью. Полнофакторные эксперименты требуют значительных финансовых затрат и времени, поскольку номенклатура легирующих добавок и примесей ф/м сталей включает не менее 12 позиций [4], что исключает возможность быстрого получения необходимого результата. Перспективной стратегией решения этой проблемы является сочетание математических расчетов по поиску химического состава (x/c), обеспечивающего необходимое качество, с последующей экспериментальной проверкой полученных результатов.

Одним из мощных способов разработки адекватных моделей сложных физикохимических процессов изменения под облучением служебных свойств сталей ф/м класса с 12-процентным содержанием хрома является нейросетевой анализ экспериментальных данных испытания образцов этих сталей. В работе [5] разработана и тестирована нейросетевая модель изменения прочности и пластичности этих сталей, там же изложены результаты расчета химического состава сталей с повышенной жаропрочностью. Поскольку изменение служебных свойств сталей

<sup>©</sup> С.М. Образцов, Г.А. Биржевой, Ю.В. Конобеев, В.И. Рачков, В.А. Соловьев, 2008

в процессе эксплуатации ЯЭУ вызвано эволюцией микроструктуры и фазового состава, то интерес представляют компьютерные эксперименты по выявлению особенностей взаимовлияния легирующих добавок.

В настоящей работе представлены результаты компьютерных экспериментов, проделанные на основе нейросетевой модели [5].

### УСЛОВИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Целью вычислительного эксперимента было выяснение деталей механизма влияния различных комбинаций некоторых легирующих элементов на кратковременные прочностные и пластические свойства 12%Сг ф/м сталей под облучением. Предварительные расчеты [5] показали, что наибольшее воздействие на повышение предела прочности  $\sigma_{\rm B}$  и полного относительного удлинения  $\delta_{\rm O}$  оказывают согласованные вариации содержаний Мп, Мо и Nb, а также В и V. В данной работе эти расчеты были продолжены с целью поиска оптимальных химических составов при изменении содержания указанных элементов и ограничении содержания остальных добавок.

Поскольку задача состоит в поиске одновременно максимальных прочностных и пластических характеристик, то она является двухкритериальной, что резко ее усложняет. Более того, радиационное упрочнение стали приводит к потере пластичности, как это, например, видно из экспериментальных данных, приведенных в [5]. Это квалифицирует поставленную задачу как конфликтную, когда крайне трудно найти решение, одинаково хорошо удовлетворяющее двум критериям. Для разрешения этой коллизии часто применяют компромиссный критерий: выбирается главный показатель, который путем подбора факторов максимизируют; на другой критерий накладывается требование не уменьшения его значения ниже некоторой заданной величины [6].

В соответствии с этим критерием план модельного эксперимента можно представить следующим образом.

1. Критериями оптимизации выбраны суммарные значения предела прочности. МПа

$$S = \sum_{i} \sigma_{\scriptscriptstyle B}(T_{i}) \tag{1}$$

 $S = \sum_{i} \sigma_{_{\rm B}} (T_{_i})$ и общего относительного удлинения, %

$$E = \sum_{i} \delta_{o}(T_{i}), \qquad (2)$$

где T — температура испытания.

Каждое значение  $\sigma_{\rm B}$  и  $\delta_{\rm O}$  рассчитывается при фиксированных значениях температуры испытания  $T_i$  = 20, 100, 200, 300, 400, 500, 600 и 710°С. Повреждающая доза полагалась равной 100 сна. Принимая во внимание то, что в быстрых реакторах температура облучения оболочки твэлов может достигать 710°С, то именно это значение было заложено в расчет суммы (1). Поскольку ф/м стали обнаруживают низкотемпературное радиационное охрупчивание, то температура облучения принималась равной 300°С при вычислении суммы (2). Таким образом, компьютерные эксперименты были направлены на поиск состава стали, подавляющего эти отрицательные качества.

2. В качестве базового химического состава был выбран состав стали ЭП-450, приведенный в табл. 1 (из статьи [4]).

Базовая термообработка: нормализация 1050°C, 30 мин; отпуск 720°C, 1 ч.

**3.** Приоритетным критерием рассматривалась величина *S*, которая максимизировалась путем расчета по нейросетевой модели [5] оптимальных содержаний

Химический состав стали ЭП-450 (вес.%)

Таблица 1
-----------

С	Si	Mn	Cr	Ni	V	Мо	Nb	В	S	Р
0.14	0.25	0.30	12.0	0.10	0.10	1.2	0.30	0.004	0.01	0.01

легирующих элементов. На величину E было наложено ограничение, согласно которому она не должна уменьшаться более чем на 5% относительно стартового значения.

4. Эксперимент включал два этапа. На первом этапе содержание Мп задавалось в диапазоне 0.2÷6 вес.%. В процессе оптимизации содержания Мо и Nb оставались свободными и выбирались такими, которые обеспечивают максимальную прочность во всем диапазоне температуры испытания. На втором этапе варьировались содержания бора и ванадия и фиксировались значения других легирующих элементов. В первом и во втором случаях баланс поддерживался за счет изменения содержания железа.

# РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены вычисленные значения суммарного предела прочности *S* в зависимости от содержания марганца. Из этого рисунка отчетливо видно значительное повышение прочности стали при повышении содержания марганца. С увеличением содержании марганца от 0.2 до 2.0 вес.% значение *S* возрастает более чем в 1.5 раза.

На рис. 2 приведена зависимость суммарного относительного удлинения E от содержания марганца.

Важно отметить, что пластичность с ростом прочности практически не меняется. Этот факт хорошо согласуется с данными о том, что марганец заметно повышает прочность, не снижая пластичности, и резко снижает красноломкость стали, т.е. хрупкость при высоких температурах испытания [7].

Результаты расчета также позволяют сделать вывод о наличии отрицательной корреляции между содержанием марганца, с одной стороны, и содержанием молибдена и ниобия, с другой. В частности, на основе результатов компьютерного эксперимента можно получить следующую линейную регрессионную зависимость между содержаниями (в вес. %) марганца и молибдена:

$$[Mo] = 6.28 - 1.04 \cdot [Mn].$$
 (3)

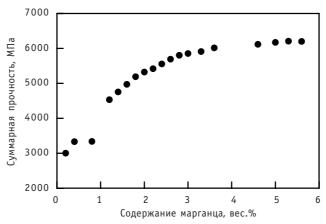


Рис. 1. Расчетная зависимость суммарного значения предела прочности от содержания марганца

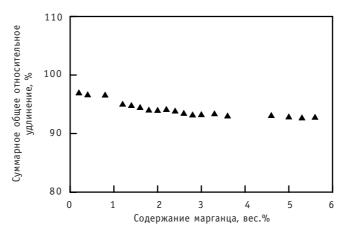


Рис. 2. Расчетная зависимость суммарного общего относительного удлинения от содержания марганца

На рис. 3 представлены результаты компьютерного эксперимента и прямая, рассчитанная по уравнению (3).

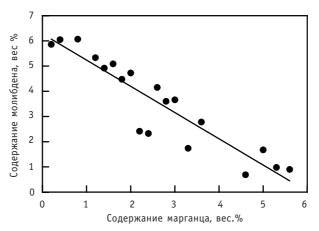


Рис. 3. Содержание молибдена как функция содержания марганца для оптимизированных химических составов: ● – результаты компьютерного эксперимента; — — расчет по уравнению (3)

Регрессионная зависимость содержания ниобия от содержания марганца может быть представлена в виде полинома второй степени:

$$[Nb] = 0.546 - 0.056 \cdot [Mn] + 0.007 \cdot [Mn]^{2}.$$
(4)

На рис. 4 представлены результаты компьютерного эксперимента и кривая, рассчитанная по уравнению (4).

Из рис. 3 и 4 видно, что в сталях оптимизированного химического состава содержание Мп отрицательно коррелирует с содержаниями Мо и Nb. Эту корреляцию можно использовать в практических целях при поиске 12%Сг ф/м стали с улучшенными служебными свойствами.

На втором этапе имитационного эксперимента была исследована зависимость пластичности и прочности ф/м сталей от содержания бора в диапазоне 0.002÷0.06 вес.% при стандартном (0.1 вес.%) и повышенном (0.7 вес.%) содержании ванадия. Содержание остальных элементов было фиксировано (см. табл. 1).

Проведенные расчеты показали, что суммарная пластичность практически не меняется с увеличением содержания бора и ванадия, а прочность слабо возрастает. На рис. 5 представлены результаты расчета суммарного предела прочности в

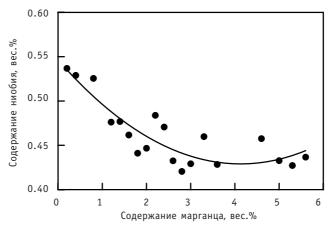


Рис. 4. Содержание ниобия в зависимости от содержания марганца для оптимизированных химических составов: ● – результаты компьютерного эксперимента; — — расчет по уравнению (4)

зависимости от содержания В при двух значениях концентрации V. Из рис. 5 виден линейный рост прочности при повышении содержания бора. Увеличение содержания ванадия приводит к сдвигу этой прямой вверх на постоянную величину.

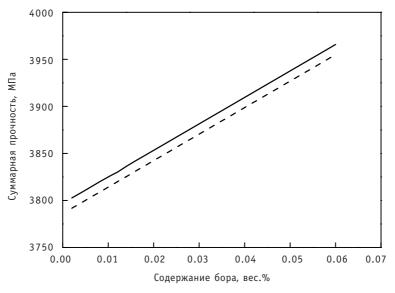


Рис. 5. Зависимость суммарной прочности  $\phi/м$  стали от содержания бора при двух значениях содержания ванадия: — — — -[V]=0.7%; — — — -[V]=0.1%;

Для определения совместной зависимости суммарной прочности S от концентраций B и V был рассчитан регрессионный полином второго порядка в диапазонах изменения содержания  $0.1 \le [V] \le 0.7$  вес.% и  $0.004 \le [B] \le 0.7$  вес.%:

$$S$$
, M $\Pi a = 3785 + 2598[B] + 16.9[V] + 8499[B] + 0.2[V]. (5)$ 

Интересно отметить, что введение дополнительного слагаемого в выражение (5) в виде произведения концентраций В и V не увеличило точность аппроксимации, что говорит об отсутствии кооперативного воздействия В и V на прочность. Согласно (5) практический интерес могут представить 12%Сг ф/м стали с повышенным содержанием бора и ванадия.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Компьютерные эксперименты показали, что определенным изменением химического состава можно дать существенное приращение прочности ф/м сталей с 12-процентным содержанием хрома при сохранении приемлемой пластичности.

В оптимизированных химических составах содержания некоторых легирующих элементов взаимосвязаны: так, увеличение содержания Мп приводит к пропорциональному уменьшению содержаний Мо и Nb. Заметим, что увеличение содержания Мп не выводит стали с повышенной прочностью из  $\phi/m$  класса, т.к марганец расширяет  $\gamma$  — область железа, из которой происходит закалка на мартенсит.

Отметим, что вклад в увеличение прочности содержаний бора и ванадия является положительным, однако крайне незначительным.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 08-08-13607 — офи\_ц и № 07-08-13642 — офи\_ц).

# Литература

- 1. Ланская К.А. Высокохромистые жаропрочные стали. М.: Металлургия, 1976.
- 2. Меськин В.С. Основы легирования стали. М.: Металлургиздат, 1959.
- 3.Aстафьев А.А., Mарков С.И., Kapk  $\Gamma$ .С. Статистический анализ совместного влияния никеля, меди и фосфора на радиационное охрупчивание перлитных сталей//Атомная энергия. 1977. Т.42. Вып. 3. С.187.
- 4. *Khabarov V.S.* at all. Microstructure, irradiation hardening and embitterment of 13Cr2MoNbVB ferritic-martensitic steel after neutron irradiation at low temperatures//Journal of Nuclear Materials. 1996. V. 233-237. P.236.
- 5. *Образцов С.М., Биржевой Г.А., Конобеев Ю.В., Соловьев В.А., Рачков В.И.* Нейросетевая модификация стали ферритно-мартенситного класса ЭП-450 по критерию максимума прочности и пластичности//Перспективные материалы. 2005. № 4. С.14-19.
- 6. Вентцель Е.С. Исследование операций: задачи, принципы, методология. М.: Наука, 1980.
- 7. Курс материаловедения. <a href="http://ngo.sitc.ru/Grantwork/material/main.html">http://ngo.sitc.ru/Grantwork/material/main.html</a>.

Поступила в редакцию 18.06.2008

## УДК 621.039.5

Numerical Analysis of Influence Minor Geometrical Distortions of Flow-Though Part of the Hydraulic Model on Flowrates Distribution in Vessel-Type Reactor Working Channels \ I.A. Chusov, V.A. Sarkisov, A.P. Loobenskiy, Yu.S. Yuryev, D.V. Zaytsev; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnich zavedeniy. Yadernaya energetica» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). — Obninsk, 2008. — 70 pages, 5 illustrations. — References, 11 titles.

The results of the numerical analysis of the stationary distribution of flowrates via the simulators of the working channels of the vessel-type reactor hydraulic model are provided. The analyses have been performed for the case of the core axis deviation from the axis of the reactor plant model vessel. The variants of the deviation to the 1st degree inclusively are provided. It was shown that the significant re-distribution of flowrates takes place in the channels simulators at minor declination angles. The hypothesis on the probable reasons of the eddy motion in the lower distribution header has been proposed.

### УДК 621.039.5+519.85

Direct Taking into account the Initial Data Uncertainty during Monte Carlo Calculations \P.A. Androsenko, K.M. Kolganov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnich zavedeniy. Yadernaya energetica» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2008. – 11 pages, 6 illustrations, 3 tables. – References, 6 titles.

The new method of taking into account the initial data uncertainty during Monte Carlo calculations is described. Distribution laws of initial data uncertainty are supposed to be specified and random values of initial parameters are simulated directly during Monte Carlo calculation. Possibilities of the suggested method are demonstrated by using model examples of integral calculations with nondistinct specified parameters. The problem is aimed at studying the uncertainty budget associated with the air kerma delivered by a simplified calibration beam which could be used for radiotherapy and radiation protection. This problem was suggested as an international test in the framework «Uncertainty Assessment in Computational Dosimetry – CONRAD» (A COrdinated Network for RAdiation Dosimetry) for independent comparison of calculations which were to be made by various codes.

### УДК 519.28+621.039

Neural Network Experiments on Cross Influence of Alloying Elements on Mechanical Properties of 12 % Cr Ferritic-Martensitic Steels \S.M.Obraztsov, G.A. Birzhevoy, Yu.V. Konobeev, V.I. Rachkov, V.A. Solovyev; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnich zavedeniy. Yadernaya energetica» (Communications of High Schools. Nuclear Power Engineering). — Obninsk, 2008. — 6 pages, 5 illustrations, 1 table. — References, 7 titles.

A perspective strategy of development of ferritic-martensitic (F-M) steel with the high temperature strength for BN-800 reactor might be application of methods of the artificial intellect. In the present work results of computer experiments carried out using a neural network model are presented. In particular, calculations have shown, that an increase of manganese content together with the coordinated reduction of molybdenum and niobium contents may result in an increase of high temperature strength of F-M steels.