

УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора по научной и
инновационной деятельности
АО «ИРМ»


_____ А.В. Варивцев

« 10 » 03 2022 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ

на выполнение составной части научно-исследовательской, опытно-
конструкторской работы
**«Разработка физической модели и алгоритма расчета для определения
скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и
ЭК164»**

Заречный
2022

СОДЕРЖАНИЕ

РАЗДЕЛ 1. НАИМЕНОВАНИЕ РАБОТЫ

РАЗДЕЛ 2. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ

Подраздел 2.1 Выбор направления работы

Подраздел 2.2 Цель и задачи работы

Подраздел 2.3 Стадийность (этапы)

РАЗДЕЛ 3. ОПИСАНИЕ РАБОТ

РАЗДЕЛ 4. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

Подраздел 4.1 Исходные данные

РАЗДЕЛ 5. ТРЕБОВАНИЯ К ТЕХНИЧЕСКИМ РЕЗУЛЬТАТАМ РАБОТЫ

Подраздел 5.1 Основные требования к выполнению работы

Подраздел 5.2 Внедрение результатов работы

РАЗДЕЛ 6. ТРЕБОВАНИЕ К СРОКУ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТ

РАЗДЕЛ 7. ТРЕБОВАНИЯ К ОТЧЕТНОСТИ

Подраздел 7.1 Отчетные материалы

Подраздел 7.2 Формат отчетной документации

РАЗДЕЛ 8. ТРЕБОВАНИЯ К КОНФИДЕЦИАЛЬНОСТИ

1. НАИМЕНОВАНИЕ РАБОТЫ

Разработка физической модели и алгоритма расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164.

2. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ

2.1. Выбор направления работы

Пластическая деформация металлических материалов в пределе малых скоростей деформаций – ползучесть, возникает при характерных напряжениях значительно меньших, чем предел текучести, и является серьезной проблемой для надежности элементов конструкций ядерных реакторов. Несмотря на малую скорость деформации в режиме ползучести, при временах до нескольких десятков лет, на которые требуется обоснование поведения реакторных материалов, суммарная деформация может достигать весьма значительных величин и приводить к механическим повреждениям материалов.

По предварительным оценкам пластическая деформация образцов оболочек твэлов из стали ЭП823 при облучении в течение 2-х лет до достижения дозы около 70 сна при тангенциальном напряжении в оболочке 80 МПа при температуре около 600 °С может достигать 0,6 %. В оболочках твэлов из стали ЭК164 при двухлетней эксплуатации в различных участках при температурах от 500 до 600 °С и дозах от 60 до 99 сна накапливается пластическая деформация от 0,3 до 0,7 %, при этом условия нагружения оболочки неоднородны по времени.

Для предсказания величины пластической деформации, накопленной вследствие радиационно-индуцированной ползучести, в настоящее время используются реакторные эксперименты, имитационные эксперименты и математическое моделирование с применением аналитических моделей.

Самые достоверные результаты получаются в реакторных экспериментах. Однако такие эксперименты являются самыми дорогими. Кроме того, для достижения значительных повреждающих доз под действием нейтронного облучения требуется большое количество времени. Повреждающие дозы порядка 100 сна достигаются на оболочках твэлов при облучении в реакторе в течение двух лет. Поэтому, как правило, реакторные эксперименты используются для параметризации достаточно простых аналитических моделей.

Использование имитационных экспериментов с облучением материалов тяжелыми ионами позволяет сократить время для набора определенной повреждающей дозы. Однако даже в имитационных экспериментах их стоимость является серьезным сдерживающим фактором для набора повреждающих доз, характерных для реакторных материалов после десятков лет эксплуатации. Кроме того, существует проблема пересчета повреждающих доз между реакторными и имитационными испытаниями. В настоящее время среди экспертов нет единого мнения относительно того, какой должна быть корректная методика такого пересчета. Данный факт затрудняет оценку возможных погрешностей имитационных экспериментов.

Простые аналитические модели для прогнозов скорости ползучести содержат параметры, значения которых для практического использования моделей в целях предсказания величины пластической деформации должны быть каким-то образом оценены. Главной проблемой применения таких моделей при оценке входящих в них параметров на основе экспериментов является плохая переносимость результатов, полученных на одном материале, на другие материалы. При изменении состава материала и микроструктуры, необходимо проводить новые эксперименты и заново параметризовать модели.

Во всех моделях ползучести, как термической, так и радиационной, отмечается и считается надежно установленной ключевая роль движения дислокаций и точечных дефектов и их взаимодействия друг с другом (Gary S. Was, "Fundamentals of Radiation Materials Science" 3rd edition, Springer, 2017; M.E. Kassner, "Fundamentals of Creep in Metals and Alloys" 3rd edition, Elsevier, 2015).

Доминирующий механизм ползучести определяется температурой, внешним напряжением, скоростью набора повреждающей дозы, на основании деформационных карт. На рисунке ниже приведена характерная деформационная карта для сталей ферритно-мартенситного класса (Zinkle S, Lucas GE (2003) Deformation and fracture mechanisms in irradiated FCC and BCC metals, US department of energy, semi-annual report, DOE-ER-0313/34. US DOE, Washington, DC).

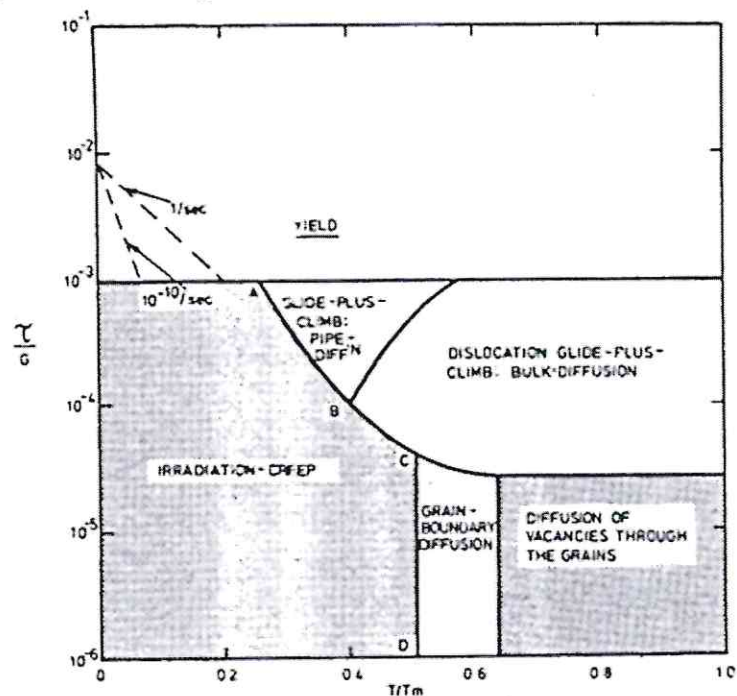


Рисунок – Характерная деформационная карта для сталей ферритно-мартенситного класса. Температура нормирована на температуру плавления, напряжение нормировано на модуль сдвига

Для перспективных реакторов на быстрых нейтронах рабочие температуры могут достигать величин $T > T_m/2$, а внешние напряжения превосходить значения 10^{-4} от модуля сдвига. При этом, как видно из рисунка, такие значения температур и напряжений попадают в область деформационной карты, находящуюся на границе режимов радиационно-

индуцированной ползучести (“Irradiation Creep”) и термической ползучести (“Dislocation Glide Plus Climb: Bulk diffusion”). Таким образом, в этом случае заранее невозможно сделать вывод о том, какой механизм ползучести будет преобладающим.

Среди моделей ползучести можно выделить модели инженерные, фактически являющиеся интерполяцией и экстраполяцией экспериментальных данных, и модели физические, при построении которых делаются попытки учесть явления, происходящие внутри материалов.

В случае термической ползучести основной массоперенос достигается за счёт движения дислокаций, а скорость пластической деформации определяется диффузией точечных дефектов, миграция которых вблизи ядер дислокаций позволяет дислокациям преодолевать препятствия, тормозящие движение дислокаций. Инженерная формула, используемая для описания скорости установившейся термической ползучести $\dot{\epsilon}$ температуры T и напряжения σ , имеет вид:

$$\dot{\epsilon} = A_0 \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \left(\frac{\sigma}{E}\right)^n, \quad (1)$$

где A_0 – константа, зависящая от материала,

Q – энергия активации,

E – модуль Юнга.

$n \approx 5$ – показатель, который является универсальным в широких интервалах T и σ , характерных для эксплуатационных режимов перспективных ядерных энергетических установок для большого набора материалов.

В случае радиационно-индуцированной ползучести, под действием облучения образуются точечные дефекты с концентрациями, на много порядков превосходящими термодинамически равновесные концентрации точечных дефектов в кристаллах. Вследствие этого, пластическая деформация может осуществляться за счёт переноса только точечных дефектов, для которых дислокации служат стоками. Для такого режима скорость установившейся ползучести описывается формулой:

$$\dot{\epsilon} = B_{ic} \sigma \dot{F}, \quad (2)$$

где B_{ic} – модуль радиационной ползучести;

\dot{F} – скорость набора повреждающей дозы.

При эксплуатационных параметрах перспективных реакторов на быстрых нейтронах могут происходить процессы, описываемые как формулой (1), так и формулой (2).

Для оценки скорости радиационно-индуцированной ползучести предложено несколько физических моделей. Модели различаются тем, что в них предполагаются в качестве доминирующих различные механизмы массопереноса: за счёт движения точечных дефектов, дислокаций, либо дефектов обоих типов.

К таким моделям относятся следующие:

1. Stress Induced Preferential Nucleation of Loops (SIPN). В данной модели предполагается, что приложение внешнего напряжения нарушает симметрию в вероятности образования дислокационных петель вакансионного и междоузельного типов. Междоузельные петли с большей вероятностью будут образовываться в плоскостях перпендикулярных приложенному напряжению, а вакансионные петли – в плоскостях параллельных приложенному напряжению. Тогда для оценки скорости ползучести можно использовать выражение:

$$\dot{\epsilon}_{SIPN} = \frac{2}{3} f b \rho_L \dot{\gamma}_L, \quad (3)$$

где b – величина вектора Бюргерса,

ρ_L – плотность дислокационных петель,

r_L – характерный радиус дислокационной петли,

f – коэффициент, зависящий от материала.

2. Stress Induced Preferential Adsorption (SIPA). В данной модели предполагается, что основной массоперенос достигается за счёт перемещения дислокаций перпендикулярно плоскости скольжения (переползания). Относительно быстрое, по сравнению с термической ползучестью, переползание достигается за счёт двух факторов: образования под действием облучения точечных дефектов с концентрациями на несколько порядков, превышающими термодинамически равновесные концентрации и нарушения под воздействием приложенного внешнего напряжения симметрии собственного силового поля дислокаций, определяющего разность интенсивностей поглощения вакансий и междоузлий. Скорость ползучести при использовании такого механизма определяется следующим образом:

$$\dot{\epsilon}_{SIPA} = \frac{2}{9} \Omega \varrho_d [\Delta z_i^d D_i c_i - \Delta z_v^d D_v c_v], \quad (4)$$

где Ω – атомный объем,

ϱ_d – плотность дислокаций,

D_i и D_v – коэффициенты диффузии междоузлий и вакансий соответственно,

c_i и c_v – концентрации междоузлий и вакансий,

Δz_i^d и Δz_v^d – эффективности захвата дислокациями междоузлий и вакансий.

2. Preferential Absorption Glide (PAG). В дополнение к модели SIPA в механизме PAG считается, что заметный вклад в массоперенос, вносит также перемещение дислокаций в плоскости скольжения. Таким образом, данный механизм объединяет черты как термической, так радиационно-индуцированной ползучести. Дополнительно к выражению (4) в скорости ползучести в модели PAG присутствует слагаемое:

$$\dot{\varepsilon}_{PAG} = \frac{4}{9} \frac{\sigma \Omega}{bE} \Omega (\pi \rho_d)^{1/2} \Delta z_i^d D_i c_i, \quad (5)$$

где σ – величина внешнего напряжения,

b – величина вектора Бюргерса,

E – модуль Юнга, остальные обозначения такие же, как в формуле (4).

Наличие разнообразных моделей радиационной ползучести говорит о том, что полного понимания физических механизмов данного явления нет.

Как в инженерных формулах (1) – (2), так и формулах, основанных на физических моделях (3) – (5) присутствуют феноменологические параметры, которые могут оцениваться из экспериментов для каждого конкретного материала.

В предлагаемом проекте планируется определение феноменологических параметров с помощью атомистического моделирования движения дислокаций и их взаимодействия с точечными дефектами. При этом будет использовано статистическое описание миграции точечных дефектов в поле механических напряжений, которое позволит оценить вклад в скорость ползучести механизма массопереноса, производимого при радиационно-индуцированной диффузии точечных дефектов.

Основным достоинством предлагаемого метода является бóльшая переносимость полученных результатов: параметры в простых аналитических моделях уже не будут просто «черными ящиками». Появится возможность определить границы применимости формул (1) – (5) и, при необходимости, предложить новые модели, объединяющие черты моделей (1) и (2), а также оценить зависимость параметров, используемых в них, от состава материала и микроструктуры. Такой подход сделает модели применимыми для широкого круга материалов с проведением минимального количества дополнительных экспериментальных исследований. После проведения верификации предлагаемого подхода на одном классе материалов на экспериментальных данных, разрабатываемый метод будет адаптирован для экспресс-анализа свойств других материалов путём менее дорогостоящих численных экспериментов и отбора кандидатных материалов для проведения более дорогих реакторных испытаний. Таким образом, будут сокращены время и стоимость разработки новых реакторных материалов. Возможность использования данного подхода обусловлена появлением высокопроизводительных вычислительных комплексов.

Для верификации разрабатываемых моделей в настоящей работе планируется проведение аналитической обработки данных уже выполненных послереакторных экспериментов и выполнение новых реакторных экспериментов для верификации разрабатываемых моделей.

Таким образом, реализация данного проекта, а также проекта по разработке и обоснованию методики имитационных испытаний позволит создать законченную технологическую цепочку для прогнозирования деградации конструкционных элементов ядерных реакторов вследствие

ползучести. При этом материалы, предварительно отобранные по результатам расчётов с помощью разработанных моделей, верифицированным на основе данных реакторных экспериментов, будут использованы в дальнейшем для имитационных испытаний.

В качестве материалов для моделей и алгоритмов, планируемых к разработке в 2020 – 2022 гг. выбраны аустенитные и ферритно-мартенситные стали, используемые в качестве материалов оболочек твэлов и пэлов реакторов на быстрых нейтронах. Эти материалы работают в более жёстких, по сравнению ВВЭР и ЖСР условиях: до доз, превышающих 100 сна (в будущем, до 160 сна), при температурах эксплуатации выше половины температуры плавления.

В настоящее время в российских научных организациях создан задел, необходимый для успешного решения задачи. Разработаны алгоритмы моделирования движения дислокаций на микроскопическом уровне с помощью методов молекулярной динамики и кинетического Монте-Карло, отлажены экспериментальные методики исследований пластической деформации и микроструктуры аустенитных и ферритно-мартенситных сталей. Концепции аппаратных технологий, необходимых для реализации задачи, отработаны с использованием вычислительных мощностей многопроцессорных вычислительных комплексов.

2.2. Цель и задачи работы

Целью работы является разработка физических моделей, алгоритмов расчёта для определения скорости радиационной ползучести элементов конструкций ядерных реакторов на быстрых нейтронах и верификация на полученных экспериментальных данных.

В рамках Этапа 4 данной работы, выполняемого в 2022 году, необходимо выполнить задачи:

1. построение многомасштабной модели для описания влияния микроструктуры и содержания легирующих элементов на скорость радиационной ползучести в сталях ЭП823 и ЭК164;
2. разработка алгоритма расчёта для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164 в условиях эксплуатации в режиме оболочек твэлов реакторов на быстрых нейтронах;
3. верификация физической модели и алгоритма расчёта на экспериментальных результатах по величине деформации радиационной ползучести, фрагментов конструкции, прошедших эксплуатацию в реакторах на быстрых нейтронах.

2.3. Стадийность (этапы)

№ п/п	Наименование этапа	Содержание этапа	Сроки выполнения	
4.	Разработка физической модели и алгоритма расчета для	4.1 Построение многомасштабной модели для описания влияния микроструктуры и	с момента заключения договора	30.10. 2022

	<p>определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164</p>	<p>содержания легирующих элементов на скорость радиационной ползучести в сталях ЭП823 и ЭК164.</p> <p>4.2 Разработка алгоритма расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164 в условиях эксплуатации в режиме оболочек твэлов реакторов на быстрых нейтронах.</p> <p>4.3 Верификация физической модели и алгоритма расчёта на экспериментальных результатах по величине деформации радиационной ползучести, фрагментов конструкции, прошедших эксплуатацию в реакторах на быстрых нейтронах.</p>		
--	--	--	--	--

3. ОПИСАНИЕ РАБОТ

3.1 Этап 4. «Разработка физической модели и алгоритма расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164».

3.1.1. При разработке физической модели и алгоритма расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164:

3.1.1.1. Построение многомасштабной модели для описания влияния микроструктуры и содержания легирующих элементов на скорость радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164;

3.1.1.2. создание алгоритма расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164;

3.1.1.3. верификация физической модели и алгоритма расчета на экспериментальных данных;

3.1.1.4 проведение патентных исследований по теме НИОКР;

3.1.1.5 оформление уведомлений о РИД (не менее одного).

4. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

4.1. Исходные данные

Результаты экспериментов, выполненных в ходе выполнения проекта ЕОТП МТ-245 «Разработка физических моделей, алгоритмов расчёта для определения скорости радиационной ползучести элементов конструкций ядерных реакторов на быстрых нейтронах и проведение послереакторных исследований по определению величины деформации ползучести».

5. ТРЕБОВАНИЯ К ТЕХНИЧЕСКИМ РЕЗУЛЬТАТАМ РАБОТЫ

5.1. Основные требования к выполнению работы

5.1.1 Разработанные физические модели и алгоритмы расчета должны быть способны обеспечить определение скорости ползучести аустенитных и ферритно-мартенситных сталей применительно к сталям ЭП823 и ЭК164 для реакторов на быстрых нейтронах при радиационном воздействии до 100 сна.

5.1.2 Полученные при расчетах результаты должны быть верифицированы на экспериментальных данных измерения деформации радиационной ползучести, фрагментов конструкции, прошедших эксплуатацию в реакторах на быстрых нейтронах. Допускается использовать материал заказчика после предыдущих исследований с представлением полного описания в части предварительной подготовки и набранной дозы облучения.

5.1.3 По завершении этапа работы 2022 года необходимо предоставить данные по свойствам изученных материалов, протекающих в них процессах и методах исследования для включения в базу данных по свойствам материалов, разрабатываемую в рамках проекта ЕОТП-МТ-65 (подтверждается письмом в адрес Заказчика). Формат передачи данных необходимо согласовать с Заказчиком.

5.1.4 Результаты работ этапа 2022 года должны содержать научно-техническую информацию, описывающую разработанные физические модели и алгоритмы расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164.

5.1.5 В результате выполнения этапа работ 2022 года должно быть создано не менее 1 результата интеллектуальной деятельности, которым в соответствии с законодательством Российской Федерации предоставляется правовая охрана, и определен вид объекта интеллектуального права (ст. 1225 ГК РФ): изобретения, полезные модели, промышленные образцы, программы для ЭВМ, базы данных, секреты производства (ноу-хау), топологии интегральных микросхем, произведения науки и литературы.

5.1.6 Разработанная физическая модель должна прогнозировать скорость установившейся ползучести в зависимости от температуры, повреждающей дозы, скорости набора повреждающей дозы, характеристик структуры

(исходной и радиационно-индуцированной), механического напряжения (вызванного давлением топлива и внутритвельных газов) для сталей аустенитного и феррито-мартенситного класса с учетом их химического состава.

5.1.7 Разработанные физические модели и алгоритмы расчёта для определения скорости ползучести в условиях радиационного облучения должны обеспечивать возможность вычислять скорость ползучести под действием сложного напряженного состояния при параметрах облучения и напряжений реакторов на быстрых нейтронах.

5.1.8 В результате выполнения проекта должны быть разработаны физическая модель и алгоритмы расчета для определения скорости радиационной ползучести применительно к сталям ЭП823 и ЭК164. В качестве входных параметров алгоритмы расчета будут использовать: характеристики излучения, температуру, параметры материала (состав, кристаллическая решетка, отдельные характеристики микроструктуры), напряженное состояние. В результате выполнения алгоритмов расчёта определяется скорость пластической деформации.

5.1.9 В качестве характеристик микроструктуры, влияющих на скорость ползучести, в создаваемой модели должны быть рассмотрены преципитаты и поры с размерами, рассмотрение которых является технически возможным с учетом объема вычислительных мощностей доступных Исполнителю.

5.1.10 В разрабатываемых физических моделях и алгоритмах расчёта должно быть учтено влияние на скорость ползучести движения дислокаций с системами скольжения, экспериментально наблюдаемыми в соответствующих кристаллических структурах.

Подраздел 5.2 Внедрение результатов работы

Результаты выполнения научно-исследовательской работы будут использованы для предсказания скорости ползучести в зависимости от температуры, напряжения, дозы облучения, микроструктуры материала. Таким образом, в результате выполнения проекта будут установлены пределы применимости существующих моделей ползучести и, при необходимости, предложены новые модели.

6. ТРЕБОВАНИЕ К СРОКУ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТ

Начало работ: с момента заключения договора;
Окончание работ: 30.10.2022 г.

7. ТРЕБОВАНИЯ К ОТЧЁТНОСТИ

7.1 Отчетные материалы

По окончании работы в 2022 году Заказчику представляются следующие материалы:

- Отчет о НИОКР (заключительный);

- протокол верификации физической модели и алгоритма расчёта на основе экспериментальных результатов по скорости радиационной ползучести;
- отчёт о патентных исследованиях;
- уведомления о создании РИД (не менее 1);
- акт сдачи-приемки.

К комплекту документов прикладывается протокол НТС Организации-Исполнителя и сведения о результатах интеллектуальной деятельности, которым в соответствии с законодательством Российской Федерации предоставляется правовая охрана.

Документация передаётся на бумажном носителе и на магнитном либо оптическом носителе в отсканированном виде в формате PDF и в редактируемых форматах.

7.2 Формат отчетной документации, порядок приемки

7.2.1 Структура и правила оформления отчёта о НИОКР должны соответствовать ГОСТ 7.32-2017.

7.2.2 Патентные исследования должны быть проведены в соответствии ГОСТ Р 15.011-96.

7.2.3 Работа проходит экспертизу научно-технического совета Исполнителя.

7.2.4 Работа принимается комиссией, назначаемой Заказчиком с участием Исполнителя.

8. ТРЕБОВАНИЯ К КОНФИДЕНЦИАЛЬНОСТИ

8.1 Защита сведений, составляющих коммерческую тайну и служебную информацию ограниченного распространения, осуществляется в соответствии с законодательными и нормативными правовыми актами Российской Федерации, а также нормативными актами Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом».

8.2 Открытая публикация данных, полученных в ходе выполнения настоящей технологической работы, в полном объеме не предусматривается. Публикация отдельных данных, полученных в результате проведения работ, будет осуществляться на основании результатов экспертизы, проведенной в установленном порядке, и получения разрешения на информационный обмен.

Начальник ОРМ



Н.В. Глушкова