

ПРЕДПРИЯТИЕ ГОСКОРПОРАЦИИ «РОСАТОМ»

Многомерный анализ данных на основе результатов расчетов ядерной трансмутации в циркониевых сплавах

© Белозерова А.Р., Белозеров С.В., Шамардин В.К., 2019

Всероссийская научно-техническая конференция «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики», г. Обнинск







РАДИАЦИОННЫЙ РОСТ ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Таблица 1 – Измерение размеров ленты и канальной трубы в результате радиационного роста

	-	Геометриче	ские размеры, мм	Изменения, мм					
Изделие	Параметр	Исходные	После облучения	Абсолютные	Относительные				
Канальная	Длина в активной зоне	350	362,6*	12,6*	3,6*				
труба	Наружный диаметр	98,2	96	-2,2	-2,24				
	Толщина стенки	6	5,92*	-0,08*	-1,4*				
Лента	Длина	500	520	20	3,8				
	Ширина	15	14,5*	0,5*	3,3*				
	Толщина	0,5	0,46*	0,04*	-7,1*				
* Расчетные значения									

Высокопоточный реактор СМ



- (5)(Д) Канал и его номер Компенсирующий орган Рабочий орган АР Рабочий орган АЗ в бериллиевом вкладыше Ячейка активной зоны с ТВС 61 ТВС с экспериментальными ячейками Ø 12 мм ្តំំំំំំំំំ

 - Петлевой канал Ø 68 мм ТВС с экспериментальной ячейкой Ø25 мм

Цыканов В.А., Давыдов Е.Ф., Куприенко В.А., Шамардин В.К., Покровский А.С., Кобылянский Г.П., Косенков В.М., Гончаренко Ю.Д. Изменение размеров изделий из циркониевых сплавов, облученных в реакторе СМ-2 до большого флюенса. // Атомная энергия, т.55, с. 211-214, вып.4, октябрь 1983.



ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕГО ЭЛЕМЕНТА Мо НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ



A. Huilong Yanga, Jingjie Shena, Yoshitaka Matsukawab, Yuhki Satohb, Sho Kanob, Zishou Zhaoa, Yanfen Lib, Feng Lia and Hiroaki Abeb. Effects of alloying elements (Sn, Nb, Cr, and Mo) on the microstructure and mechanical properties of zirconium alloys *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2014 <u>http://dx.doi.org/10.1080/00223131.2014.996622</u>

B. Moon J,Kim S, Jang J, Lee J, Lee C. Orowan strengthening effect on the nanoindentation hardness of the ferrite matrix in microalloyed steels. *Mater Sci Eng A*. 2008;487:552–557.



ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ ОБЛУЧЕНИЯ

Место облучения	Номинальная тепловая мощность, МВт	Плотность нейтронов, ×10 ¹⁵ см ⁻² ·с ⁻¹	Плотность нейтронов (Е>0,5 МэВ), ×10 ¹⁴ см ⁻² ·с ⁻¹							
Исследовательские реакторы:										
о активная зона СМ-3	90	4,48	6,23							
о активная зона БОР-60	50	1,80	8,33							
Энергетические реакторы:										
о активная зона ВВЭР- 1000	3200	0,46	1,41							
о активная зона PWR	200	3,46	14,97							
3 #CH-0-1 29 4 #CH-C-17 21 5 #CH-C-22 26 6 #CH-C-3 10 7 #Boa_10M 47 8 #CH-0-1 37 9 #CH-0-1 37 9 #CH-0-1 37 9 #CH-0-1 37 9 #CH-0-1 10 10 #9 362 11 # 89 12 #(1) 92 13 #15 90 14 #8 9 #CH-C-2 15 #10 40 10 16 #CH-C-2 17 #CH-C-1 18 #CH-C-2 19 #CH-C-2 10 #Soa_10M 48 #Boa_10M 48 #CH-C-1 10 #Grad_1M 20 #Grad_1M 21 #Boa_10M 48 #CH-C-1 23 #Boa_10M 44 #CH-C-1 26 #CH-C-4 27 #CH-0-8 28 #CH-C-1 10 #Grad_1M 11 #		поля, связанные с: усир сики. Материал а другие поля а другие	– Отчет по ам, сформированный OLAP-куба. ем способ MOLAP, т.е. ия OLAP-куба на основе ных БД.							





Рисунок 1 – OLAP-куб с группой мер «Материал», «Место», «Время» и иерархические структуры в базисе измерений

- 1. http://downloads.fyxm.net/download-now-ABC-Amber-Clarion-Converter-Coding-File-Editors-38296.html
- 2. https://scalabium.com/clarion/

www.niiar.ru



МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ НУКЛИДНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Трансмутация (Transmutation) - превращение одного нуклида в другой в результате одной или нескольких ядерных реакций и спонтанных распадов радионуклидов.

$$\begin{cases} \frac{dx_i}{dt} = \sum_k A_i^k x_k - \sum_l A_l^i x_i, i = 1, 2...N \end{cases}$$
(1)

 x_i – концентрация ядер нуклида **i** $x_i(0) = \begin{cases} x_{i,0}, ecли нуклид i codeржится в исходном веществе 0, ecли нет \end{cases}$

 $X_{i,0}^{i}$ – концентрация нуклида і в начальный момент времени $A_{n}^{i} = \int_{0}^{\infty} \sigma_{n}^{i}(E) \Phi(E) dE - скорость реакции \begin{cases} A_{n}^{i} = \lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}} - cкорость распада \\ \lambda - постоянная распада \\ T_{\frac{1}{2}} - nериод полураспада \end{cases}$ $\sigma_{n}^{i}(E) - дифференциальное сечение реакции$ $<math>\Phi(E) - дифференциальная плотность потока нейтронов$

(2)



СПЕЦИФИКА ЗАДАЧИ ДИСКРЕТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

<u> Вадача ядерной трансмутации</u>

Удаляя из ориентированного мультиграфа $G = \langle M, U, P, f, g \rangle$ дуги, нужно прийти к такому подграфу G', в котором количество вершин в любом блоке не превышало бы заданного числа *Dim_{max}* и *P'* ⊂ *P*. С учётом того, что для каждой отбрасываемой дуги (a,u,b) потеря концентрации равна интегралу превращения по соответствующему каналу за рассматриваемое время облучения материала, необходимо отброшенные дуги перенаправить в коллекторную вершину <u>Other</u>. Операцией добавления к графу $G = \langle M, U, P, f, g \rangle$ вершины Other образуется граф $G' = \langle M \cup \{Other\}, U, P, f, g \rangle$, где f(Other) = 0. Операции удаления дуги (a, u, b) и добавления дуги (a, u, Other) к графу G' состоят в образовании графа $G'' = \langle M \cup \{Other\}, U, P \cup \{(a, u, Other)\} \setminus \{(a, u, b)\}, f, g \rangle$, при этом элемент g(u) – вес дуги uсохраняется. Цель задачи ядерной трансмутации состоит в минимизации значения коллекторной Other концентрации вершины графа для $G'' = \langle M \cup \{Other\}, U, P \cup \{(a, u, Other)\} \setminus \{(a, u, b)\}, f, g \rangle.$





– нуклид стартового состава в необлученном сплаве, радионуклид и стабильный нуклиды, наработанные при облучении, соответственно

На схеме нуклидных превращений для циркониевого сплава можно выделить фрагмент изотопного ряда молибдена, который совпадает с набором стабильных нуклидов этого химического самым, процесс легирования молибденом под нейтронным облучением Тем элемента. технологически удобен по своей природе. В вопросе влияния различных нейтронов, составляющих нейтронный спектр реакторного облучения, на накопление молибдена нужно учитывать малое сечение поглощения тепловых нейтронов циркониевыми сплавами.

www.nijar.ru

МЕТОД "РАЗДЕЛЯЙ И ВЛАСТВУЙ"

НИИАР

Шar	Структура графа (каноническая нумерация и блочное представление)	Оценка методической погрешности, млн ^{.1}
1	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 5: Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Блок 3 dim 1: Zr-96 Блок 4 dim 1: Mo-92 Блок 5 dim 1: Zr-94 Блок 7 dim 3: Zr-90 Zr-91 Zr-92	3522
2	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 5: Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Блок 3 dim 1: Zr-96 Блок 4 dim 1: Nb-92 Блок 6 dim 1: Nb-93 Блок 6 dim 1: Zr-94 Блок 7 dim 4: Zr-90 Zr-90mZr-91 Zr-92	1690
3	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 5: Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Блок 3 dim 1: Mo-92 Блок 4 dim 1: Zr-96 Блок 5 dim 7: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-93 Zr-94 Nb-93	1012
4	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 5: Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Блок 3 dim 1: Mo-92 Блок 4 dim 2: Zr-96 Zr-97 Блок 5 dim 7: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-93 Zr-94 Nb-93	1012
5	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 1: Mo-92 Блок 3 dim 8:Zr-96 Zr-97 Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Блок 4 dim 7: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Nb-93	643
6	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 1: Mo-92 Блок 3 dim 1: Z-90 Z-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Nb-93 Блок 4 dim 6: Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98	630
7	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 1: Mo-92 Блок 3 dim 1: Z-99 Zr-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Nb-93 Блок 4 dim 8: Nb-95 Nb-95m Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98	384
8	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 1: Mo-92 Блок 3 dim 9: Zr-90 Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Блок 4 dim 10: Nb-93 Nb-94m Nb-95 Nb-95m Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98	384
9	Блок 1 dim 1: Mo-100 Блок 2 dim 1: Mo-92 Блок 3 dim 1: ZF-90 Zr-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Nb-97 Блок 4 dim 10: Nb-93 Nb-94 Nb-94 Nb-95 Nb-95m Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98	71
10	Блок 1 dim 1: Mo-92 Блок 2 dim 9: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Блок 3 dim 5: Nb-93 Nb-94 Nb-94 Nb-95 Nb-95m Блок 4 dim 8: Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Mo-99 Mo-100	71
11	Блок 1 dim 1: Mo-92 Блок 2 dim 9: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Блок 3 dim 5: Nb-93 Nb-94 Nb-94 Nb-95 Nb-95 m Блок 4 dim 10: Nb-97 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Mo-99 Mo-100 Tc-99 Tc-99m	59
12	Блок 1 dim 1: Mo-92 Блок 2 dim 10: Zr-90 Zr-90m Zr-91 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Nb-97 Блок 3 dim 5: Nb-93 Nb-94 Nb-94 Nb-95 Nb-95m Блок 4 dim 10: No-94 No-95 No-96 No-97 No-98 No-90 No-100 Tc-99 Tc-99m Tc-100	59





Геометрическая интерпретация идеи алгоритма



ПОИСК АССОЦИАТИВНЫХ ПРАВИЛ В СИСТЕМЕ [Zr + x% Nb + y% Mo]

	(n 2n)	(n 2n)	(n nn)	(n g)	(n n)	(n n')	(n, a)	IT_dec	b-	Тип		IT_deca			
	(11,211)		(1,1)	אייי)	(1, P)		(11,0)	ay	decay	сплава	(n,γ)	у	b-decay	(n,2n)	(n <i>,</i> n')
Zr-90				Zr-91		Zr-90m				Zr		CM-3	ввэр		
Zr-90m								Zr-90				PWR	БОР-60		
Zr-91	Zr-90			Zr-92						7r⊥1%N	CM-3		20.00	CM-3	D\//R
7- 02	Zr-90m			7: 02											
21-92 7r_02	ZI-91 7r-02			ZI-93 7r-94						D				DUP-00	
Zr-93	Zr-92	7r-92		Zr-94							PWR			PWR	
Zr-95	21 33	21 52		Zr-96					Nb-95	Zr+2,5%	CM-3			CM-3	ввэр
									Nb-95m	Nb	БОР-60			БОР-60	PWR
											PWR			PWR	
Zr-96	Zr-95			Zr-97						Zr+1%N		CM-3	CM-3		CM-3
Zr-97									Nb-97	h+0 5%		50P-60			50P-60
Nb-93			Zr-92	Nb-94	Zr-93					NTU, 370			F VVIN		DOF-00
				ND-94m						IVIO		ввэр			
Nb-94	Nb-93			Nb-95		Nb-94m			Mo-94	Zr+2,5%	ввэр	CM-3	CM-3	ввэр	CM-3
				Nb-95m						Nb+0,5		БОР-60	PWR		БОР-60
										%Mo					
Nb-94m								ND-94	M0-94						
Nb-95						Nh-05m			Mo-95						
110-33						110-35111			1010-35						
Nb-95m								Nb-95	Mo-95						
Nb-97									Mo-97						
Mo-94				Mo-95			Zr-91								
Mo-95	Mo-94			Mo-96											
Mo-96	Mo-95			Mo-97											
Mo-97	Mo-96			Mo-98			Zr-94								
Mo-98	IVI0-97			No-99					Te 00						
Mo 100	Mo 00			10-100					10-99						
Tc-99	1010-99			Tc-100		Tc-99m			Tc-99m						
Tc-99m				10 100		10 5511		Tc-99	10 5511						10





В последовательных реакциях лимитирующей стадией является самая медленная реакция: общая скорость последовательных реакций определяется скоростью самой медленной из них.





НАКОПЛЕНИЕ МОЛИБДЕНА В ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВАХ



Динамика накопления молибдена в циркониевых сплавах под облучением в зависимости от флюенса: экспериментальные результаты для сплава Zr+2,5%Nb, а.з. CM-3 – (1); результаты расчёта для сплава Zr+2,5%Nb – (2) и для сплава Zr+1%Nb – (3) в условиях CM-3, ЦБТМ, ячейка 2

- Изменение содержания молибдена в циркониевых сплавах в зависимости от флюенса в результате исследований лент из сплава Zr+1%Nb и центрального канала из сплава Zr+2,5%Nb, которые облучались длительное время в активной зоне высокопоточного реактора CM-3 при температуре ~373 К.
- Нейтронное облучение привело к заметному легированию сплава Zr+2,5%Nb молибденом, образовавшимся в результате ядерных реакций.
- Концентрация молибдена увеличивается примерно до 0,7 мас. % с ростом флюенса нейтронов.



ТРАНСМУТАЦИЯ В СИСТЕМЕ [Zr + x% Nb + y% Mo] ПРИ ОБЛУЧЕНИИ В СМ-3

Динамика накопления молибдена при облучении в СМ-3, ЦБТМ, ячейка 2 и при выдержке за один год по результатам расчета в циркониевых сплавах: Zr+2,5%Nb+0,5%Mo – (1); Zr+1%Nb+0,5%Mo – (2); Zr+2,5%Nb – (3); Zr+1%Nb – (4); Zr - (5).





- Реакторное облучение приводит к существенному накоплению молибдена в сплаве Zr+2,5%Nb в результате ядерных реакций: концентрация молибдена увеличивается примерно до 0,7 % с ростом флюенса нейтронов (E>0,1 MэB) до 1×10²³ см⁻².
- По результатам расчетов оценена динамика накопления молибдена при облучении в реакторе СМ, и последующей выдержке образцов за один год по результатам расчета в циркониевых сплавах: Zr+2,5%Nb+0,5%Mo; Zr+1%Nb+0,5%Mo; Zr+2,5%Nb; Zr+1%Nb



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- 1 Определена расчетная схема трансмутации элементов в сплавах системы [Zr + x% Nb + y% Mo]
- 2 Оценена динамика накопления молибдена при облучении в реакторе СМ (ЦБТМ, ячейка 2) и при выдержке за один год по результатам расчета эффектов ядерной трансмутации в циркониевых сплавах: Zr+2,5%Nb+0,5%Mo; Zr+1%Nb+0,5%Mo; Zr+2,5%Nb; Zr+1%Nb

Реакторное облучение приводит к существенному накоплению молибдена в сплаве Zr+2,5%Nb в результате ядерных реакций: концентрация молибдена увеличивается примерно до 0,7 % с ростом флюенса нейтронов (E>0,1 MэB) до 1.10²³ см⁻² при облучении в исследовательском реакторе CM.

Оценена динамика эффектов ядерной трансмутации циркония при облучении в активной зоне исследовательских (СМ-3, БОР-60) и энергетических (ВВЭР-1000, PWR) реакторов. Элемент Zr трансмутирует не больше, чем на 10% за 100 лет облучения. Накопление молибдена за это же время может составить до 104 млн-1 (аррт).

Проведенные расчеты и результаты их интеллектуального анализа с многомерным анализом на основе OLAP, исследуя многомерное пространство данных БД, дают знания в виде ассоциаций и классификаций в подтверждение необходимости разработки циркониевых сплавов с дополнительным легированием молибденом, которые могут обеспечить оптимальные физико-механические свойства, в частности характеристики радиационного роста, а также приемлемый уровень ядерно-физических и коррозионных свойств.

4

5