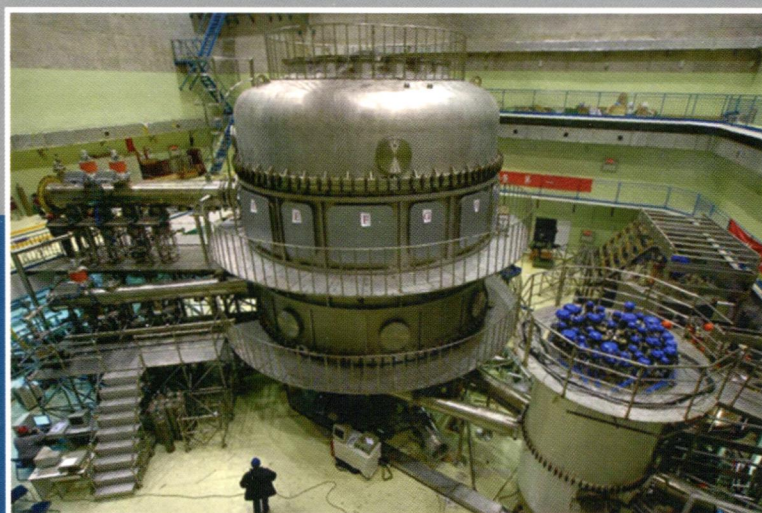


Э.Е. Сон, И.А. Абрикосов, А.В. Дуб,
К.Ю. Арефьев, Г.В. Белов, М.Х. Гаджиев,
В.Ю. Зицерман, С.К. Кунаков, П.Р. Левашов,
И.В. Морозов, К.А. Орлов, В.Ф. Очков, А.В. Хван,
К.Ю. Хромов, А.Е. Шапиева, М.А. Шейндлин,
В.В. Чеверикин, А.В. Янилкин

**БАЗЫ ДАННЫХ
МАТЕРИАЛОВ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ,
ПЕРВОПРИНЦИПНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ И МЕТОДОВ
ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА**



Москва 2021

Э.Е. Сон, И.А. Абрикосов, А.В. Дуб,
К.Ю. Арефьев, Г.В. Белов, М.Х. Гаджиев,
В.Ю. Зицерман, С.К. Кунаков, П.Р. Левашов,
И.В. Морозов, К.А. Орлов, В.Ф.Очков, А.В. Хван,
К.Ю. Хромов, А.Е. Шапиева, М.А. Шейндлин,
В.В. Чеверикин, А.В. Янилкин

**Базы данных
материалов атомной энергетики
на основе экспериментальных
исследований,
первопринципного
моделирования и методов
искусственного интеллекта**



Москва 2021



«Издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
по проекту №21-18-00015, не подлежит продаже».

УДК 621.039
ББК 31.46-03
С62

Рецензенты

Саркисов Ашот Араkelович – академик РАН, ИБРАЭ
Драгунов Юрий Григорьевич – член-корр. РАН НИКИЭТ
Ильгисонис Виктор Игоревич – Росатом

Э.Е. Сон, И.А. Абрикосов, А.В. Дуб и др. *Базы данных материалов атомной энергетики на основе экспериментальных исследований, первопринципного моделирования и методов искусственного интеллекта.* (Объединенный институт высоких температур РАН) – М.: Янус-К, 2021. – 704 с.

ISBN 978-5-8037-0827-8

Монография посвящена изложению физических основ, экспериментальных методов и результатов первопринципного моделирования, применению методов искусственного интеллекта, машинного обучения при разработке баз данных материалов атомной энергетики.

Коллективом авторов выполнен проект по Федеральной целевой программе с Индустриальным партнером – ОАО «Наука и инновации» Росатома. Приведены результаты проведенных исследований по созданию материалов для новых типов реакторов, обеспечению безопасности атомных станций, удовлетворяющих требованиям стандартов, долговременной эксплуатации и надёжности.

В книге описаны основные этапы моделирования создания новых материалов и приведено описание разработанной базы данных, которая может быть использована научными сотрудниками, аспирантами и студентами физико-технических специальностей.

© Коллектив авторов, 2021

ISBN 978-5-8037-0827-8

Оглавление

Предисловие	8
Глава 1 Классификация ядерных реакторов <i>Кунаков С.К., Шапиева А.Е.</i>	10
1.1 Виды ядерных реакторов	11
1.2 Виды промышленных реакторов	15
1.3 Общая характеристика проблем	39
1.4 Последствия процессов износа	46
1.5 Метод Монте–Карло	49
1.6 Воздействие радиации на конструкционные материалы	51
1.7 Основные критерии радиационной стабильности материалов	58
1.8 Фазовые превращения под воздействием интенсивной радиации	59
Список литературы к гл. 1	62
Глава 2 Базы данных материалов атомной энергетики <i>Очков В.Ф., Орлов К.А., Белов Г.В.</i>	65
2.1 Введение	65
2.2 Общие требования к базам данных по свойствам веществ и материалов	66
2.3 Обзор баз данных	67
2.4 Обзор баз данных материалов атомной энергетики	72
2.5 База данных МЭИ–ОИВТ РАН по рабочим телам, теплоносителям и материалам атомной промышленности	75
Список литературы к гл. 2	85
Глава 3 Термодинамическая база данных ИВТАНТЕРМО <i>Белов Г.В., Морозов И.В.</i>	99
3.1 История создания	99
3.2 Состав базы данных	101
3.3 Информационная система ИВТАНТЕРМО–Онлайн	105
Список литературы к гл. 3	108

Глава 4	Новые информационные технологии в реакторном материаловедении	
	<i>Морозов И.В., Зицерман В.Ю.</i>	111
4.1	Ключевые задачи информатизации отрасли	111
4.2	Принципы построения баз данных в области реакторного материаловедения	116
4.3	Онтологии и двухуровневая модель хранения данных	120
4.4	Основной инструментарий для работы с данными	129
	Список литературы к гл. 4	137
Глава 5	Квантовые методы моделирования свойств материалов атомной энергетики	
	<i>Абрикосов И.А., Сон Э.Е., Левашов П.Р.</i>	141
5.1	Квантово-механические расчеты свойств материалов для атомной энергетики	141
5.2	Теория функционала плотности	142
5.3	Основные программные пакеты, используемые для квантовомеханического моделирования	150
5.4	Первопринципное исследование сплавов на основе системы Fe-Cr	155
5.5	Методы машинного обучения в разработке баз данных	169
5.6	Базы данных результатов первопринципных расчетов	172
5.7	Первопринципные расчеты в создании новых материалов	176
5.8	Результаты применения методов машинного обучения в создании новых материалов	179
	Список литературы к гл. 5	192
Глава 6	Диаграммы состояния систем на основе железа и легирующих элементов	
	<i>Абрикосов И.А., Хван А.В., Чеверикин В.В., Родин А.О.</i>	200
6.1	Диаграммы состояния ограничивающих двойных систем	201
6.2	Диаграммы состояния ограничивающих тройных систем	236
6.3	Диаграммы состояния ограничивающих четырёхкомпонентных систем	281
	Список литературы к гл. 6	286
Глава 7	Диффузия в сталях и сплавах	
	<i>Хван А.В., Родин А.О.</i>	322
7.1	Введение	322
7.2	Параметры диффузии	325
7.3	Диффузия в стали и сплавах	336

7.4	Данные по теплопроводности сталей	343
7.5	Свойства ферритных сталей на основе системы Fe-(0-20) Ni-(5-20)Cr-(0-5)Al-(0-2)Mo-(0-1)C-(0-1)N-(0-1)W-(0-1)Nb-(0-1)V .	344
7.6	Описание структуры базы данных	347
	Список литературы к гл. 7	349
Глава 8 Структурные модели для ферритных сплавов <i>Абрикосов И.А.</i> 355		
8.1	Структурные модели для расчетов свойств сплавов	355
8.2	Структурные модели для свойств ферритных сплавов	363
8.3	Структурные модели для ферритных сплавов на основе метода эффективной среды	365
	Список литературы к гл. 8	382
Глава 9 Выбор параметров в пакетах VASP, EMTO, LSGF <i>Абрикосов И.А., Хван А.В., Чеверикин В.В.</i> 384		
9.1	Теоретические основы квантовых расчетов	384
9.2	Метод VASP	389
9.3	Метод локально самосогласованной функции Грина (LSGF)	391
9.4	Оптимизация параметров в пакете VASP	393
9.5	Заключение	488
	Список литературы к гл. 9	490
Глава 10 Экспериментальные методы исследований ядерных материалов <i>Шейндлин М.А., Гаджиев М.Х., Сон Э.Е</i> 492		
10.1	Обзор лазерных методов исследования материалов	492
10.2	Экспериментальные методы и установки	494
10.3	Обзор экспериментальных методов исследования	520
10.4	Методика эксперимента по плазменным исследованиям материалов	527
10.5	Результаты экспериментальных исследований	535
	Список литературы к гл. 10	553
Глава 11 Аэрокосмические методы исследований ядерных материалов <i>Арефьев К.Ю., Сон Э.Е</i> 560		
11.1	Аналитический обзор по аэрокосмическим методам	560
11.2	Жаростойкость и жаропрочность	561
11.3	Экспериментальное определение характеристик жаростойкости и жаропрочности	563

11.4	Композиционные материалы и их испытания	569
11.5	Результаты апробации методики проведения испытаний	574
11.6	Заключение	579
	Список литературы к гл. 11	581

Глава 12 Материалы в газовом, плазменном и конденсированных состояниях

*Апфельбаум Е.М., Дьячков С.А., Князев Д.В.,
Левашов П.Р., Минаков Д.В.*

583

12.1	Моделирование транспортных и оптических свойств неупорядоченных конденсированных сред	583
12.2	Обзор литературы по методам расчета электронных транспортных свойств (теплопроводность, электропроводность), оптических свойств газовых, жидких и плазменных материалов	584
12.3	Коэффициенты Онзагера и транспортные свойства	593
12.4	Описание методики расчета электронных транспортных и оптических свойств на основе теории линейного отклика	595
12.5	Расчет транспортных свойств из кинетического уравнения	598
12.6	Транспортное сечение рассеяния	600
12.7	Самосогласованный атомный потенциал и электронная плотность в конечно-температурной модели Томаса-Ферми	602
12.8	Учет дискретных состояний электронов	605
12.9	Квазиклассические уровни энергии и волновые функции дискретного спектра	605
12.10	Расчет самосогласованного потенциала в сферической атомной ячейке	609
12.11	Расчет транспортных коэффициентов плотной плазмы металлов в приближении Томаса-Ферми	611
12.12	Первопринципные расчеты транспортных свойств плотной плазмы металлов	614
12.13	Первопринципные расчеты транспортных (оптических) свойств плотной плазмы металлов	619
	Список литературы к гл. 12	622

Глава 13 Прогнозирование фазовой стабильности в сплавах при радиационном воздействии

Дуб А.В., Хромов К.Ю., Янилкин А.В.

627

13.1	База данных квантово-механических расчётов и многокомпо- нентные потенциалы для различных кристаллических решёток с учетом межузельных атомов и вакансий	631
------	--	-----

13.2	Прогноз фазовой стабильности и расчет кинетики эволюции предвыделений в исследуемых системах при различных температурах	640
	Список литературы к гл. 13	649
Глава 14 Методы моделирования динамики дислокаций для прогнозирования скорости ползучести		
	<i>Дуб А.В., Хромов К.Ю., Янилкин А.В.</i>	651
14.1	Разработка алгоритмов построения дислокаций различных типов в ОЦК и ГЦК кристаллах	657
14.2	Методика создания смешанных и краевых дислокаций в ОЦК кристалле	671
14.3	Молекулярно-динамическое моделирование движения дислокаций различных типов при различных температурах и напряжениях	672
14.4	Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия движущихся дислокаций с неподвижными дислокациями	683
14.5	Расчет энергии миграции точечных дефектов	688
14.6	Заключение	694
	Список литературы к гл. 14	696
	Заключение	699
	Перечень сокращений	701
	Список авторов	702