

## ENTENTE projekt: European database for multiscale modelling of radiation damage

### Sugárkárosodás multiscale modellezésére irányuló európai adatbázis

Az ENTENTE projekt az EURATOM 2019-2020-as keretprogram NFRP-01 Ageing phenomena of components and structures and Operational Issues felhívásában nyert támogatást 2020 évében. A projekt futamideje 4 év, mely 12 ország 27 partnerének közreműködésével 2020. szeptember és 2024 augusztus között valósul meg. A konzorcium tagjai között megtalálhatók a nukleáris szféra vezető ipari szereplői, kutató intézetei, kis- és közép vállalatai és műszaki támogató szervezetei. Magyar részről egyedüliként a Bay Zoltán Nonprofit Kft. Szerkezetintegritás és Gyártástechnológia Osztálya (BZN) vesz részt benne.

#### Előzmény

Az atomerőmű élete során különböző projektek által nagy mennyiségű adatgyűjtés történik a reaktortartály, belső szerkezetek és primerköri berendezések, valamint csővezetékek továbbá a gőzfejlesztő köpeny és csonkok anyagai mechanikai tulajdonságainak vonatkozásában. A vizsgálatok széles hőmérsékleti és besugárzási tartományok között (Charpy tesztek, törési szívósság mérésektől a szakítóvizsgálatokig, majd a keménységmérésekig) zajlottak, esetenként vizsgálva a környezeti, korróziós hatásokat is.

Ezen túl a felüyeleti programok eredményei különféle adatbázisokban kerültek összeállításra. Ámbar míg a mechanikai tulajdonságokra vonatkozó adatok többékevésbé strukturált módon kerülnek összegyűjtésre, addig a mikroszerkezeti adatok megfelelő gyűjteménye, amelyek kulcsfontosságúak az öregedési folyamatok mélyebb szinten történő elemzéséhez, és kapcsolatuk vizsgálata a megfelelő mechanikai tulajdonságok változásával, szinte teljesen hiányzik.

Az innovatív, mesterséges intelligenciára épülő technológia alkalmazásával az adatok teljes skáláját felölelve, lehetővé tehető az érintett öregedési jelenségekhez köthető ismeretek bővítése az atomerőművek biztonságának javítása és a hosszú távú biztonságos üzemelés (LTO) biztosítása érdekében.

#### A projekt fókuszterületei

A sugárzás okozta károsodások többléptékű - multiscale modellezésére irányuló európai adatbázis (ENTENTE) projekt átfogó célja, hogy a múltbéli projektek és a határon átnyúló szakértői csoportok felhasználásával összekapcsolja a reaktortartály (RPV) acélok elridegésével kapcsolatos modellezési és kísérleti tudás- és adatbázist és már meglévő eredményeket, és hogy a vonatkozó öregedési jelenségekkel kapcsolatos kiterjedt ismeretek tekintetében "entente-szövetségre" jussanak. Ily módon az ENTENTE hozzájárul az atomerőművek biztonságának javításához azáltal, hogy lehetővé teszi kvantitatív



Euratom 2019-2020 Grant agreement No 900018

előrejelző és/vagy javítómódszerek, operatív gyakorlatok kifejlesztését a hosszú távú biztonságos üzemeltetés támogatásának biztosítása érdekében, nemcsak a meglévő nukleáris flotta, hanem az új könnyűvízes reaktorok (III/III+ generáció) esetében is. A cél innovatív adatkezelési eszközök kifejlesztése a többléptékű modellezési programok eredményeihez való hozzáférés és azok felhasználásának maximalizálása érdekében.

#### A projekt átfogó célja és felépítése

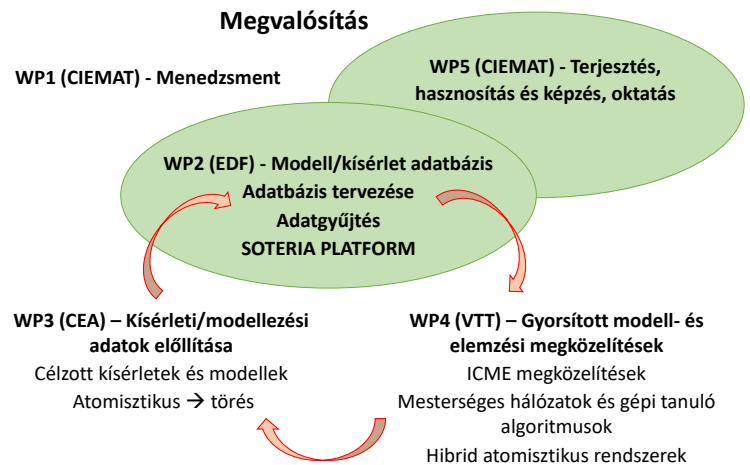
A többléptékű-multiscale modellezési megközelítés olyan fizikai modellek kidolgozásán alapul, amelyek leírják a különböző érintett tér- és időskálán a sugárzás okozta hatásokat, a számítógépes szimulációs technikák alkalmazását célzott kísérletekkel kombinálva. A SOTERIA Platform integrálta a PERFECT [1], PERFORM60 [2] és SOTERIA [3] már lezárult Európai Unió által támogatott projektek összes modellezési fejlesztését. A modellező eszközök fejlesztése érdekében a fent említett projektek nagy mennyiségű adatot állítottak elő az RPV acélok és a releváns modellötvezetek mechanikai tulajdonságainak (Charpy tesztek, törési szívósság mérésektől a szakítóvizsgálatokig és keménységmérésekig) széles skálájából sokféle besugárzási körülmény mellett, valamint – gyakran ugyanazon acélokon – kiterjedt mikroszerkezeti karakterizációs program végrehajtása, egymást kiegészítő technikák kombinációival valósult meg. Ezek az adatok felbecsülhetetlen értékűek, s az ENTENTE a FAIR (Findability, Accessibility, Interoperability, Reusability – Megtalálhatóság, Hozzáférhetőség, Interoperabilitás, Újrafelhasználhatóság) elveknek megfelelően összegyűjti és tárolja a reaktor nyomástartó edényeinek céljaira vonatkozó, rendkívül fontos adatokat. A projekt három, egymással összefüggő blokkból áll:

- Egyedülálló kísérleti/modellező adatbázis tervezése és karbantartása a modellek validálásához és kalibrálásához

Végső cél egy olyan egyedülálló adatbázis létrehozása, amelyben a teljes mikroszerkezeti jellemzők a mechanikai tulajdonságokkal és modellezési adatokkal – beleértve az anyagok származására vonatkozó információkat is – összekapcsolásra kerülnek, és amely a projekt során a modellfejlesztés és modell-finomítás tekintetében hasznosítható, valamint a reaktortartály acélok elridegésének mechanikai megértését is nagymértékben támogatja.

- Korábbi adatok összegyűjtése és az adatbázis gazdagítása mikroszerkezeti és a neutronbesugárzásnak kitett reaktortartályok anyagaira vonatkozó mechanikai adatokkal a hiányosságok pótlása érdekében. Az ENTENTE és a korábbi projektek keretében előállított összes adat FAIR elvek szerinti gyűjtése és tárolása lehetővé teszi azok szisztematizált és rendszerszintű felhasználását a reaktortartály acélok állapotértékelésének további javítására a meglévő modellek fokozatos és iteratív validálása és kalibrálása révén. Az adatgyűjtés formátumáról és minőségéről a már felállított szakértői bizottság segítségével és az adatminőségi tervek végrehajtásával gondoskodnak a projekt futamideje alatt. Az ENTENTE keretében végzett új kísérleti és modellezési tevékenységek az adatbázis hiányosságainak pótlására, valamint a kémiai/szerkezeti heterogenitások (kezdeti mikroszerkezet és/vagy a sugárkárosodás eloszlása) mechanikai és törési viselkedésre gyakorolt lehetséges szerepének feltárására összpontosítanak, beleértve a szemcsehatárok és helyi szerkezetük szerepének mélyreható értékelését az elridegségre vonatkozóan.
- Fejlett modellek fejlesztése adatelemzés/adatbányászat és korábbi ismeretek alapján. Ezek az integrált adatok példátlan lehetőséget jelentenek a fizika alapú modellfejlesztés számára a hagyományos kalibrálási és validálási felhasználáson túl: a modellfejlesztés jelenleg paradigmaváltást tapasztal a tudásorientált megközelítésről az adatvezérelt megközelítésre. A projekt egyik célja ezért egy általános módszertan felállítása és a legjobb gyakorlatok meghatározása a prediktív modellek ilyen összefüggésben történő kidolgozásához. Ez több szempontot foglal magában: az egyes adatok hibájának vagy szórásának értékelése, és annak következményeinek elemzése a modell előrejelzésére a bizonytalanságok számszerűsítése és terjedése révén, a kísérleti és modellezési adatokban további vizsgálatokat igénylő kiugró értékek azonosítása, a modell bemeneti paraméterek változására való érzékenységeinek ellenőrzése, metamodellek használata az előrejelzés felgyorsítására (a metamodell hibájának értékelése és a végső eredményekre való átvitelének vizsgálata), valamint az adatok közötti rejtett kapcsolatok vagy korrelációk feltárása, amelyek további kísérletekhez és ezzel párhuzamosan modellezési erőfeszítésekhez vezethetnek. A levont tanulságokat egy általános módszertanba foglalják össze. Különböző gépi tanuló algoritmusok kifejlesztése és tesztelése a reaktortartály acél neutron besugárzás hatására bekövetkező tulajdonságváltozásainak (mikroszerkezet, keményedés és ridegség) elemzésére vonatkozóan. A rendelkezésre álló digitális adatok alapján részletes képfeldolgozás neurális hálózatok segítségével a mikroszerkezetek típusának és mennyiségének felismerése és meghatározása, a szemcseméret kiszámítása, a karbid eloszlás, továbbá

a repedéskezdemenyek vagy üregképződmények lehetséges helyeinek azonosítása érdekében.



**1. ábra:** Az ENTENTE projekt WP1 – WP5 munkacsomagjai (zárójelben a munkacsomag vezetői) [4]

Az ENTENTE projekt 5 munkacsomagot ölel fel, melyeket összefoglalóan az 1. ábra szemléltet. A WP1 és a WP5 munkacsomagok a projekt teljes időtartama alatt együtt futnak, s ezek a projektmenedzsment tevékenységekkel (WP1) és terjesztési, kommunikációs-hasznosítási, továbbá képzés, oktatási tevékenységekkel (WP5) foglalkoznak. A három központi szakmai munkacsoport a műszaki és tudományos tevékenységekre fókuszál. A WP2-ben meghatározott ENTENTE adatbázis az ENTENTE projekt szerves, strukturális jellemzője. Míg a WP3-ban generált adatok ezen adatbázisba kerülnek, a WP4-en belül kifejlesztett különféle eszközöket alkalmazzák az adatbázisban az adatformátum vagy a gépi tanulási eszközök meghatározásához. Az adatkezelés és az adatbázis potenciális végfelhasználók általi értékelése a WP5 keretein belül történik.

## A BZN szerepvállalása a projektben

A Bay Zoltán Nonprofit Kft. (BZN) részéről a projektben a miskolci telephelyen működő Szerkezetintegritás és Gyártástechnológia Osztály vesz részt a WP4 Gyorsított modellezési és elemzési megközelítések munkacsomag T4.2 Gépi tanulás az RPV LTO modellezéséhez alfeladathoz kapcsolódóan, mely során különböző gépi tanuló algoritmusok fejlesztésére és tesztelésére fókuszál a tartályacélok neutron besugárzás hatására bekövetkező tulajdonságváltozásainak (mikroszerkezet, keményedés és ridegség) előrejelzésére vonatkozóan. Az alfeladat a vállalt feladatokat tekintve induló fázisban van, így a BZN az alábbi tevékenységek támogatására és végrehajtására fókuszál:

- Metaadatok gazdagítása gépi tanulással.
- Anyagtulajdonságok meghatározása, paraméterek a károsodási mechanizmusok (képlékeny- és szívsós törés, korrózió) értékeléséhez, adatbányászat adatbázison.

- Modellfejlesztés a digitális adatok (SEM – pásztázó elektronmikroszkóp, TEM – transzmissziós elektronmikroszkóp stb.) és a környezeti feltételek paramétereirei közötti kapcsolat leírására gépi tanulás és számítógépes látás algoritmusok segítségével.

A projekthez való hozzájárulásának koncepciója és a rendelkezésre álló digitális adatok alapján (a WP2 Modell/kísérleti adatbázis munkacsomag adatbázisában) a tervek szerint részletes képfeldolgozás végezhető neurális hálózatok segítségével annak érdekében, hogy felismerhető és meghatározható legyen a mikrostruktúrák típusa és mennyisége, megvalósítható legyen a szemcseméret, karbidok és egyéb kiválások meghatározása, továbbá azonosításra kerüljön a repedéskezdeményezés vagy az üregek kialakulásának lehetséges helyei. Ezen eredmények a WP2 Modell/kísérleti adatbázis munkacsomag számára is nagymértékben hasznosíthatóak, mivel a SEM képekből történő információ kinyerése nagy érdeklődésre tart számot, midőn a konvolúciós és neurális hálózatok használata sikeres történet mind a képelemzés, mind a képfeldolgozás területén.

További információk a honlapon:

<http://rdgroups.ciemat.es/web/materiales/entente-en>

**Dudra Judit, Szávai Szabolcs**

Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft.

## Köszönetnyilvánítás

Aszerzők köszönetet mondanak az Európai Bizottságnak a tanulmány részleges/teljes pénzügyi támogatásáért az Euratom 2019-2020-as kutatási és képzési programja keretében a 900018-as számú támogatási megállapodás keretében (ENTENTE projekt).

## Acknowledgments

The authors thank the European Commission for partial/total financial support of this study in the frame of the Euratom research and training programme 2019-2020 under grant agreement N° 900018 (ENTENTE project).

## Irodalomjegyzék

- [1] PERFECT "Prediction of Irradiation Damage Effects on Reactor Components" FP6 Grant agreement no.: F160-CT-2003-5088-40, 2004-2007.
- [2] PERFORM 60 "Prediction of the Effects of Radiation For reactor pressure vessel and in-core Materials using multi-scale modelling – 60 years foreseen plant lifetime; FP7 Grant agreement no.: 232612, 2009-2013.
- [3] SOTERIA "Safe long term operation of light water reactors based on improved understanding of radiation effects in nuclear structural materials" H2020 Grant agreement no.: 661913, 2015-2019.
- [4] European Database for Multiscale Modelling of Radiation Damage (ENTENTE) H2020 project, FAIRification put into practice, Conference presentation, October 13, 2021.

## Divíziók, főbb szervezeti egységek



- Biotechnológiai Divízió (BAY-BIO)**  
- SZEGED, BUDAPEST
- Mérnöki Divízió (BAY-ENG)**  
- MISKOLC, BUDAPEST, PÉCS, ZALAEGERSZEG
- Gyártási Divízió (BAY-PROD)**  
- MISKOLC, BUDAPEST, EGER, SZEGED, KECSKEMÉT
- Tudásmenedzsment Központ (BAY-TMK)**  
- BUDAPEST, SZEGED, MISKOLC
- Tématerületi Igazgatóság (BAY-TIG) és Üzletfejlesztés**  
- BUDAPEST
- Innovációs Park (BAY-INNO)**  
- BUDAPEST

