

СОДЕРЖАНИЕ

Н. Матаджи Каджури Сценарии развития ядерной энергетики в Иране на ВВЭР-1000 и быстрых реакторах нового поколения "Брест"	3
В.В. Титов Управление техническими и производственными рисками на объектах ядерной энергетики на основе автоматизированной системы регистрации и документирования сигналов	11
Н.В. Куликова, А.В. Мышев, П.И. Игнатенко Хаотическая динамика в задаче N-тел	19
М.М. Троянов, Ю.Д. Ильичев Возможности зондирования загрязняющих примесей в реальной атмосфере с помощью промышленных лазеров	28
К.М. Ефимов, Е.А. Ясько Прогнозирование загрязнений поверхностного слоя территории в районе АЭС	37
М.М. Троянов Вымывание аэрозольной фракции из тропосферы атмосферными осадками	41
Т.Е. Ларичева, А.А. Мачула, В.К. Милинчук Исследование влияния продуктов щелочного гидролиза при производстве трековых мембран на основе пленок полиэтилентерефталата	45
А.Э. Яновский Изучение фазовых распределений начальных и конечных состояний многочастичных систем в методе классических траекторий Монте-Карло	50
В.В. Коробейников Универсальный алгоритм метода Монте-Карло для расчета бланкетов электроядерных установок	59
Н.А. Виногоров, Д.Н. Жуковский О методе определения физических характеристик ядерного реактора при медленном возмущении реактивности	66
А.И. Трофимов, С.А. Виноградов, И.А. Чусов, В.И. Белозеров, М.А. Трофимов, И.А. Шевцов Исследование зависимости температуры стенки технологического канала реактора РБМК от величины зазора между ТК и графитовой кладкой	71
В.С. Хмелевская, Н.В. Куликова, А.В. Накин, В.Г. Малышкин Кластерные структуры в ГЦК-материалах при высоких уровнях радиационного повреждения	83
В.И. Пляскин, Р.А. Косилов Справочно-информационная система "Трансмутация нуклидов в ядерных реакторах"	89
В.С. Мастеров, Н.П. Савельев Расчет углового распределения реакции прямого подхвата трех нуклонов	98

CONTENTS

N. Mataji Kajuri Scenarios of Development of Nuclear Power Engineering on VVER-1000 and BREST-type Fast Reactors in Iran	3
V.V. Titov Management of Technical and Industrial Hazards on Objects of Nuclear Power Engineering Using the Automated System of Recording and Documenting of Signals	11
N.V. Kulikova, A.V. Mishev, P.I. Ignatenko Chaotic Dynamics in a Problem of N-bodies.....	19
M.M. Troyanov, Yu.D. Il'ichev The Possibilities of Sondage of Contaminants in the Real Atmosphere Using Industrial Lasers	28
K.M. Efimov, E.A. Yas'ko Prediction of Contaminations of Surface Stratum of Territory in Region NPP	37
M.M. Troyanov Removing of Aerosol Fraction from the Troposphere by Atmospheric Precipitation.....	41
T.E. Laricheva, A.A. Machula, V.K. Milinchuk Study of Influence of Alkaline Hydrolysis Products in Production of Track Membranes on the Basic of Polyethylenterephthalate Films.....	45
A.E. Yanovsky Study of Phase Distribution of Initial and Final States of Multiparticle Systems in the Monte-Carlo Method of Classical Trajectories.....	50
V.V. Korobeinikov Universal Algorithm of the Monte-Carlo Method for Calculation of Blankets of Accelerator-Driven Systems	59
N.A. Vinogorov, D.N. Jukovsky On the Method of Determination of Physical Characteristics of a Nuclear Reactor under Slow Reactivity Perturbation.....	66
A.I. Trofimov, S.A. Vinogradov, I.A. Tchusov, V.I. Belozarov, M.A. Trofimov, I.A. Shvetsov Study of Dependence of Wall Temperature in the Technological Channel of the RBMK-Reactor on the Gas Clearance between the channels and Graphite Blocks.....	71
V.S. Khmelevskaya, N.V. Kulikova, A.V. Nakin, V.G. Malynkin Cluster Structures in FCC-materials at High Levels of Radiation Damage.....	83
V.I. Plyaskin, R.A. Kosilov Information Reference System «Transmutation of Nuclides in Nuclear Reactors»	89
V.S. Masterov, N.P. Savelyev Calculation of Angular Distribution of Direct Pick-up Reaction with Transfer of Three Nucleons	98

УДК 621.311.25:621.039.004(55)

СЦЕНАРИИ РАЗВИТИЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ В ИРАНЕ НА ВВЭР-1000 И БЫСТРЫХ РЕАКТОРАХ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ «БРЕСТ»

Н. Матаджи Каджури

Тегеранский технический университет им. Шарифа, г. Тегеран



В статье рассматриваются различные сценарии развития ядерной энергетики в Иране до 2060 г. Подробно анализируется возможность введения в структуру ЯЭ Ирана быстрых реакторов типа БРЕСТ со свинцовым теплоносителем.

ВВЕДЕНИЕ

В современном мире исследования ресурсов энергии представляют собой одну из наиболее важных областей прикладных программ. При ожидаемом удвоении народонаселения мировая потребность в электрической энергии и топливе к середине следующего столетия увеличится, по крайней мере, в 3 и 2 раза соответственно. Исследования не только желательны, но также и необходимы. Исходя из этого, мы выполнили предварительный обзор перспектив развития ядерной энергетики в Иране в течение следующих нескольких десятилетий. Иран имеет большие запасы нефти и природного газа, и поэтому значение ядерной энергии для Ирана, на первый взгляд, едва ли понятно. Но нам необходимо учесть использование нефти и газа в других достойных и важных областях промышленности, в их экспорте и сохранении для будущих поколений. Принимая во внимание экономические, технологические и стратегические аспекты развития страны (в среднем и долговременном плане) и вышеупомянутые требования, исследование развития ядерной энергии в Иране оказывается необходимым.

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АЭС В ИРАНЕ

Рост населения и производства электричества в Иране

Чтобы выяснить роль ядерной энергии или других ресурсов энергии, необходимо иметь, по крайней мере, минимальную информацию относительно населения и скорости его роста, роста производства и потребления энергии. На кривых рис.1 мы использовали опубликованные данные и прогнозы (1).

Для второго шага мы приняли различные модели для темпа роста населения, производства электричества на душу населения и различные пути развития атомной энергетики в Иране. Здесь мы описываем одну из этих моделей и результаты ЯЭ при следующих условиях и прогнозах:

1- население Ирана увеличивается от нынешних 63 млн. чел. до 93 млн. чел. в 2010 г. и 120 млн. чел. в 2060 г.;

2- производство электричества до 2010 г. растет согласно кривой 2 на рис.2 (в со-

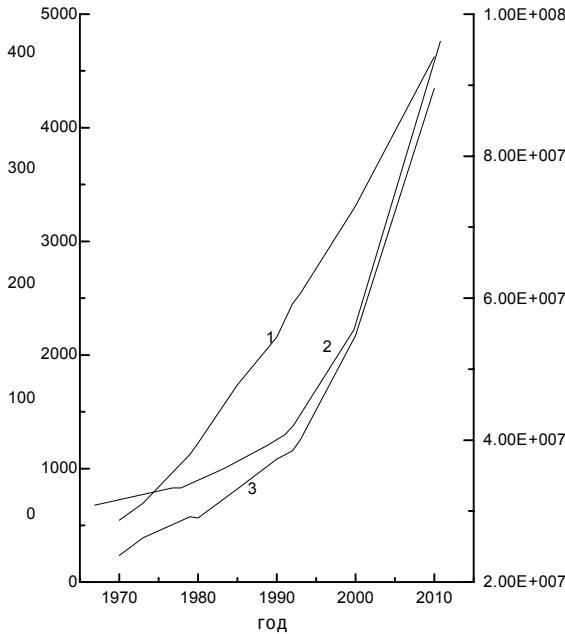


Рис.1. Данные по Ирану за 1970-1993гг. и государственный прогноз на 1993-2010 гг.: 1-население (2.0E007-1.0E008); 2-выработка электроэнергии (0-400 ТВт.Ч); 3 – выработка электроэнергии на душу населения(0-5000кВт.ч)

зительно 96 ТВт·ч, 30ГВт и 1500 кВт·ч; эти значения показывают хорошее согласие с прогнозами.

Роль ядерной энергии

Первый этап развития

Чтобы понять роль АЭС в производстве электрической энергии в первые десятилетия следующего столетия в Иране, мы изучали следующие варианты:

1- только 2 ВВЭР-1000 с мощностью 2000МВт(эл.) начнут работать в 2000 г.

2 - два ВВЭР-1000 начнут работать в 2000 г., в 2005 г. добавлены еще 2 блока и после каждых 5 лет вводятся 2 новых блока до значения 10ГВт(эл.) в 2020 г.; после этого новые блоки не будут строиться;

3 – строительство АЭС, обеспечивающее 3 различных уровня доли АЭС следующим образом:

3.1- 2 блока в 2000 г. и один блок в 2010 г. (3000МВт(эл.)) и конечную долю 2.6 % для АЭС в 2040 г.

3.2- 2 блока в 2000 г., один в 2015 г. и один блок в 2025. Конечная доля в этом случае была бы приблизительно 3.5 % в 2040 г.

3.3- 2 блока в 2000 г., один блок в 2010, один блок в 2015, два блока в 2020, два блока в 2025, два блока в 2030 и один блок в 2035 г.

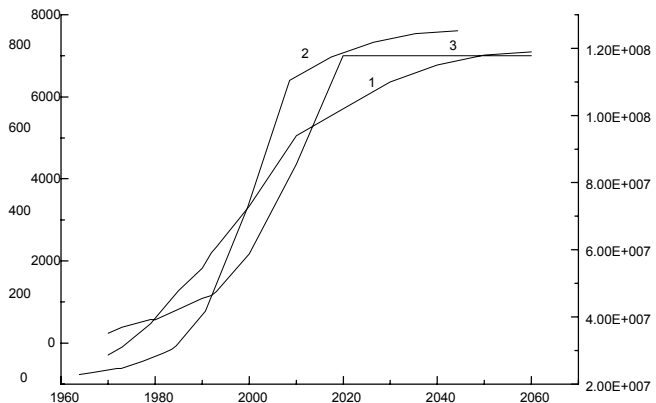


Рис.2. Модели для: 1- темп роста населения (2E007-12E008); 2-выработка электроэнергии (0-900 ТВт·ч); 3-выработка электроэнергии на душу населения (кВт·ч)

ответствии с государственными прогнозами от около 150ТВт·ч сейчас до 409ТВт·ч) и после этого производство электричества увеличивается, достигая значения 7000кВт·ч на душу населения в 2020 г. - примерно сегодняшнего потребления в России, Германии и Франции (мы думаем, что это значение - приемлемый и хороший выбор). Кривые рис.2 показывают результаты вычислений, основанных на вышеупомянутых предположениях.

Население Ирана в 2040 г., возможно, достигнет около 115 млн. и чтобы сохранить уровень электрического обеспечения (7000кВт·ч на душу) необходимо произвести около 805ТВт·ч электрической энергии (мощность около 120 ГВт). В прошлом году производство электричества, электрическая мощность и электрообеспечение на душу населения в Иране были соответственно прибли-

(всего 11ГВт_(эл.)). Конечная доля в 2040 г. была бы приблизительно 9.6 %.

Используя существующую информацию относительно ВВЭР-1000, данную в табл.1, мы выполнили вычисления для всех вышеназванных вариантов. Кривые 4,5,6 и 8 на рис.3 показывают полученные результаты, основанные на первых предположениях. Поскольку кривые относятся к 40 годам работы двух блоков, потребляется 18000 т природного урана или 2300 т обогащенного U. В это же время будет накоплено около 16000 кг делящегося Pu и останется 28000 кг ²³⁵U в отработанном топливе. Кривая 1 на рис.4 показывает относительную долю атомных электростанций в поставке электрической энергии. В этом случае доля АЭС в обеспечении электроэнергией монотонно уменьшалась бы.

Кривые 1,2,3 и 7 на рис.3 показывают полученные результаты для второго варианта. Что касается этого рисунка, понятно, что во втором случае там было бы использовано 80 тыс. т естественного U (или около 12 тыс. т обогащенного U) и будет накоплено 80 т делящегося Pu и останется 140 т ²³⁵U в отработанном топливе. Кривая 2 на рис.4 показывает долю АЭС в этом случае.

Кривые 5,8,9,12 на рис.5 показывают результаты, полученные для варианта 3.1. В этом случае приблизительно 27 тыс. т естественного U (или приблизительно 3600 т обогащенного U) будет использовано и 25 т делящегося Pu будет произведено, а 44 т ²³⁵U останется в отработанном топливе. Кривая 3.1 на рис.4 показывает относительную долю АЭС в этом случае.

Кривые 4,6,7 и 11 на рис.5 показывают результаты для варианта 3.2. В этом случае, потребляя 35 тыс. т естественного U (или 4800 т обогащенного U), мы получим 30 т делящегося Pu и приблизительно 52 т ²³⁵U останется. Кривая 3.2 на рис.4 показывает относительную долю АЭС для этого случая.

Таблица 1

Некоторые типичные характеристики ВВЭР-1000

Расход природного U (1-я загрузка)	700 т
Ежегодный расход природного U	200 т
Первоначальная загрузка U	80 т
Ежегодно загрузка топлива	27 т
Обогащение	4.4 %
Обогащение выгоревшего топлива	1.2 %
Концентрация делящегося Pu	0.7%
Компания реактора	4 года
Время работы	7000 ч/год

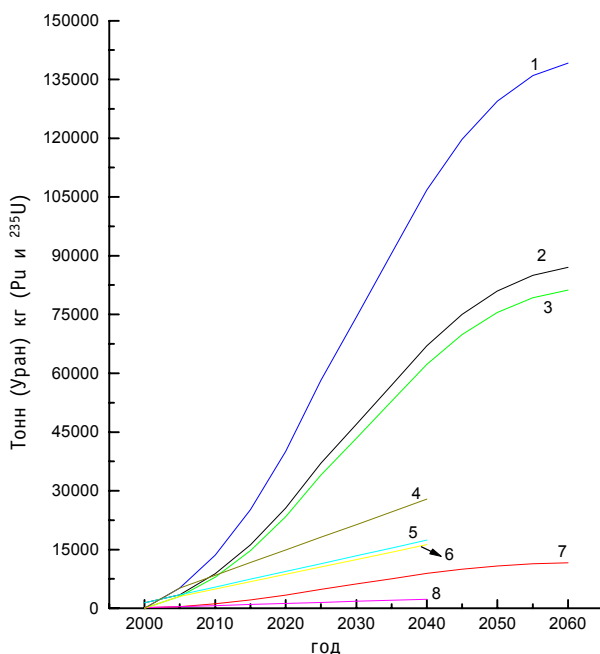


Рис.3. Суммарный расход природного и обогащенного урана, суммарное производство плутония, остающийся ²³⁵U на основе вариантов 1 и 2(природный и обогащенный уран) в единицах тонн, получаемый плутоний и остающийся ²³⁵ U в кг:
 1- 1,4 соответствует остающемуся ²³⁵U вариантов 2,1;
 2- 2,5 - для суммарных расходов природного урана вариантов 2,1; 3- 3,6- для суммарного производства Pu вариантов 2 и 1; 4- 7,8- для суммарных расходов обогащенного урана вариантов 2 и 1

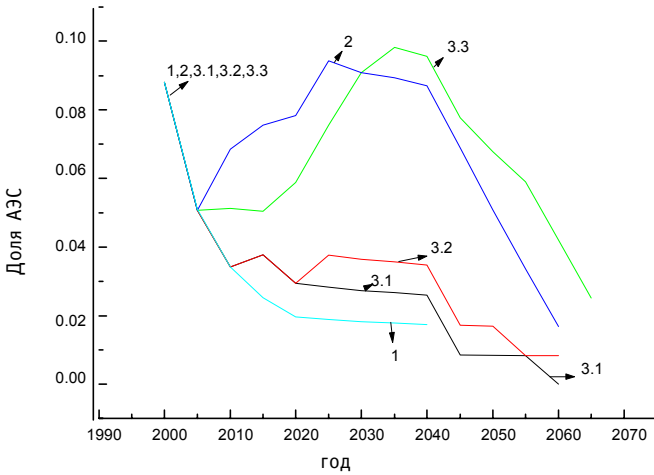


Рис.4. Относительная доля АЭС для вариантов первого этапа развития АЭС в Иране

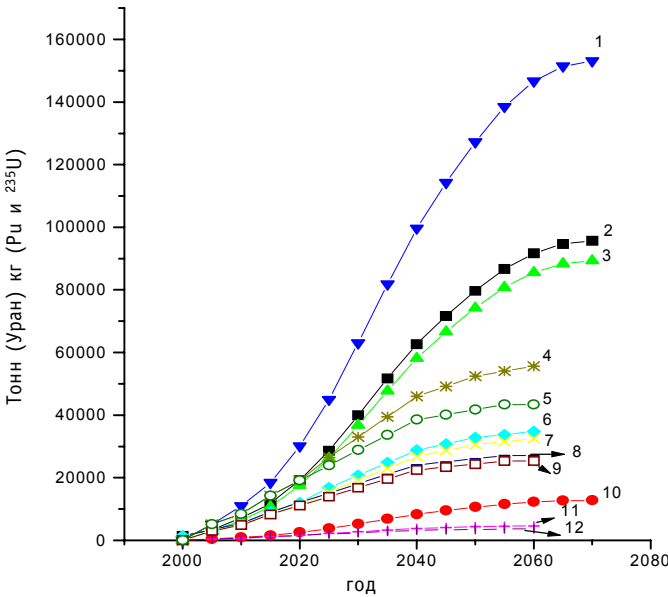


Рис.5. Суммарный расход природного и обогащенного урана, суммарное производство плутония, остающийся ^{235}U на основе вариантов н. 3.1-3.3 (природный и обогащенный уран в тоннах, получаемый плутоний и остающийся ^{235}U в кг: 1- 1,4,5 соответствуют суммарному остающемуся ^{235}U вариантов 3.3,3.2,3.1; 2- 2,6,8 - для суммарных расходов природного урана вариантов 3.3-3.1; 3- 3,7,9 - для суммарного производства Pu вариантов 3.3-3.1; 4- 10,11,12 - для суммарных расходов обогащенного урана

Западе.

Мы можем формулировать некоторые характеристики новой реакторной концепции следующим образом.

Структура безопасности БРЕСТ:

- реактор должен быть разработан таким способом, чтобы полный запас реактивности был бы меньше 1\$;
- исключение опасных эффектов реактивности типа пустотного эффекта и др.;

Кривые 1,2,3 и 10 на рис.5 показывают результаты для варианта 3.3. В этом случае 95.7 кт природного U (12.7 кт обогащенного U) будет использовано, 90 т делящегося Pu будет произведено, и около 150 т ^{235}U остается в отработанном топливе. Кривая 3.3 на рис.4 показывает относительную долю АЭС в этом случае.

Второй этап развития

Традиционная технология АЭС не отвечает долгосрочным требованиям в терминах экономики, потребления урана, безопасности, обращения с РАО и также в аспекте нераспространения ядерного оружия. Предварительные и детализированные исследования быстрых реакторов естественной безопасности с свинцовым теплоносителем и с мононитридным топливом (БРЕСТ) с коэффициентом воспроизводства $KV=KVA \approx 1$ показывают, что БРЕСТ мог бы удовлетворить таким требованиям. В табл.2 показаны некоторые важные характеристики БРЕСТ. Следует отметить, что мононитридное топливо использовалось успешно как горючее в реакторе БР-10 в России и в качестве экспериментальных топливных элементов в некоторых других реакторах на Западе.

Таблица 2

Некоторые типичные характеристики БРЕСТ

Тепловая мощность МВт	2400
Электрическая мощность МВ(эл.)	1000
Топливо	UN-PUN-MA
Теоретическая плотность топлива	14.3 гр. /см ³
Масса топлива	50 т
Масса Pu (²³⁹ Pu + ²⁴¹ Pu)	5 т
Компания А.З.	5-6 лет
Перегрузочный интервал	1-2 года
Коэффициент воспроизводства	~ 1
Теплоноситель	Свинец
Температура теплоносителя (Вход/выход)°С	420/540

- полное использование характеристик саморегулирования реактора за счет обратных связей;
- химически инертный теплоноситель, который имеет не слишком высокую точку плавления, но с высокой точкой кипения, исключая риск опасных взаимодействий теплоноситель - вода или теплоноситель - воздух;
- дополнительные свойства: естественная циркуляция теплоносителя при LOCA и в воздушной системе аварийного охлаждения.

Качество естественной безопасности дает возможность упростить и удешевить проект и снизить требования к оборудованию и персоналу АЭС (2).

Обращение с радиоактивными отходами и их захоронение. В новом поколении АЭС с быстрыми реакторами БРЕСТ понятие естественной безопасности относится и к технологии окончательного захоронения радиоактивных отходов (РАО) (3). Конечная цель естественной безопасности при захоронении РАО состоит в том, чтобы уменьшить радиоактивную токсичность РАО до уровня природного, извлекаемого из земли, урана после их выдержки во временном хранилище в течение около 200 лет. Эта цель может быть достигнута, используя следующие меры:

1 - использование изотопов U и Pu вместе с Am как топлива;

2-трансмутация наиболее долгоживущих продуктов деления (I-129 и Tc-99);

3- утилизация Sr и Cs как стабильных источников тепла и гамма-излучения. Малоактивный Np можно захоранивать с РАО, что исключит его принципиально

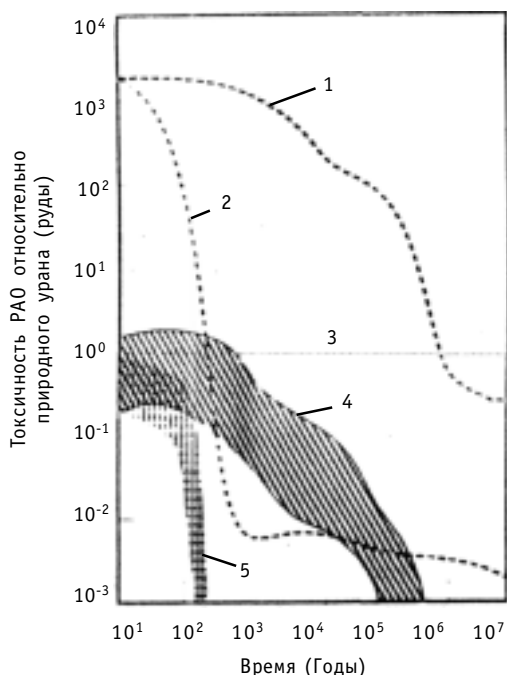


Рис.6. Уменьшение токсичности РАО на основе различных стратегий обращения и захоронения РАО: 1 - без возврата актиноидов; 2 - без возврата продуктов деления; 3 - активность природного урана (руда урана); 4 - с возвратом актиноидов (до 99.99%) и их сжиганием; 5 - с возвратом продуктов деления и трансмутацией

возможное использование в ядерном оружии. Ст лучше извлечь из топлива для выдержки в течение ~ 70-100 лет во временном хранилище для распада в Pu с возвращением его в реактор. На рис.6 показан срок, требуемый для сокращения уровня радиотоксичности PAO при различной политике обращения с PAO (4). Как видно, использование замкнутого цикла с возвращением актиноидов (до~ 99.9 %) в реактор сводит необходимое время выдержки PAO от десятков тысяч лет к приблизительно 200 годам. После этого возможно разместить PAO в местах добычи урана в физико - химически устойчивых формах, чтобы избежать миграции остаточной радиоактивности. В течение 100-200 лет PAO выдерживаются в специальном хранилище с охлаждением естественной циркуляцией воздуха.

Нераспространение ядерного оружия. В проекте БРЕСТ предусматриваются меры, чтобы уменьшить риск получения оружейных материалов. Особенности следующие:

- исключение уранового blankets: это исключает производство Pu оружейного качества;
- низкая избыточная реактивность: это предотвращает использование сырьевых урановых или Th блоков в активной зоне или blankets реактора;
- коэффициент воспроизводства активной зоны равен единице: это означает, что нет необходимости отделять U и Pu в ходе переработки топлива; эта особенность имеет и другие важные выгоды: небольшое изменение реактивности в течение кампании, вызванное выгоранием топлива, равномерность и стабильность потока нейтронов и мощности реактора, возможность квазинепрерывной перегрузки топлива без остановки реактора;
- исключение разделения U и Pu на всех стадиях топливного цикла и, кроме того, содержание младших актиноидов (MA) (Am) в топливе, неглубокая очистка топлива от продуктов деления, что упрощает переработку и увеличивает радиоактивность топлива;
- переработка топлива при АЭС и сокращение транспортировки топлива, Pu и отходов: это предотвращает кражу Pu во время перевозки отработанного топлива на завод переработки (3) или возвращения свежего топлива в реактор, опасность аварий на транспорте.

Топливо и экономия урана. Поскольку в реакторах БРЕСТ в качестве топлива рассматривается смешанное уран-плутониевое (UN-Pu N) топливо, нет необходимости в использовании природного урана на первоначальную загрузку. В этом случае первоначальное топливо будет получено от переработки топлива ВВЭР-1000. Перегрузка БРЕСТ нуждается в использовании малых количеств обедненного или природного урана, количество которого фактически неограниченно, поэтому можно утверждать, что БРЕСТ приводит к резкому снижению расхода природного урана и одновременно к возможности производства электроэнергии на основе АЭС неограниченное время.

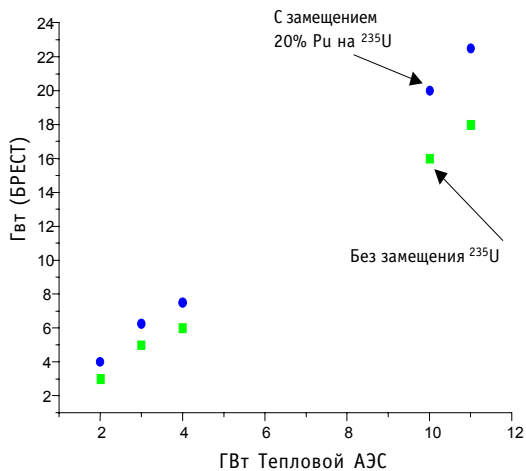


Рис.7. Количество реакторов БРЕСТ (в единицах GWt_{эл}) для каждого варианта (1,2,3.1-3.3) и с замещением 20% Pu на ²³⁵U в первой загрузке и без него

Представим некоторые результаты включения предлагаемого вида АЭС в энергетику Ирана. Они могут быть введены, используя отработанное топливо реакторов ВВЭР.

-Топливо и экономика использования природного урана: результаты рассмотрения второго раздела показывают, что во всех рассматриваемых случаях большие количества природного U были бы использованы. Но каждый случай 1-3.3 ведет к производству значительных количеств делящегося Pu, который содержится в отработанном топливе вместе с ^{238}U , ^{235}U и другими актиноидами и продуктами деления. Эти Pu, ^{235}U и МА использовались бы для загрузки БРЕСТ. На рис.7 показано количество 1000 МВт(эл.) БРЕСТ, которые можно ввести на Pu и ^{235}U от первой стадии развития АЭС ВВЭР. Конечно, первая загрузка БРЕСТ нуждается в глубокой переработке топлива ВВЭР, чтобы получить подходящую топливную композицию для БРЕСТ, но после этого глубокая переработка топлива с извлечением Pu не требуется.

Переработка отработанного топлива ВВЭР и изготовление топлива для первой загрузки БРЕСТ должны быть выполнены заводами членов Ядерного клуба (Россия и др.) или технологическими центрами, которые работали бы под международной юрисдикцией. Что касается отработанного топлива БРЕСТ, то из него необходимо лишь извлечь продукты деления. Таким образом мы получим дополнительные АЭС, которые работали бы много лет без использования естественного урана, используя только отработанное топливо ВВЭР и малые дополнительные количества ^{238}U , чтобы компенсировать выгорание.

Увеличение доли АЭС. Рис.8 показывает относительную долю АЭС в производстве электричества от 2020 до 2060 для предыдущих вариантов и одной модели второго этапа развития АЭС в Иране. В этой модели мы предполагали, что некоторые из БРЕСТ будут построены таким способом, чтобы перед выключением некоторого ВВЭР они начинали работать, чтобы удовлетворить электрические потребности или экономические цели. Сравнение кривых рис.8 с соответствующими кривыми на рис.4 показывает что БРЕСТ значительно увеличивают долю АЭС в поставке электрической энергии в Иране без зависимости от других стран по поставкам топлива. В принципе можно создать большее количество БРЕСТ, которые могут быть загружены Pu вместе с извлеченным из ВВЭР ^{235}U . На рис.7 тоже показано количество реакторов БРЕСТ, которое можно ввести в строй, используя смешанное топливо (с замещением 20%Pu на ^{235}U) только в первой загрузке (конечно, если использовать смешанное топливо во всех перегрузках, то количество реакторов БРЕСТ увеличится примерно в 2 раза.). В этом случае на первом этапе использовалась бы смесь Pu с низко обогащенным U (1-4)%. Это могло бы быть выполнено дообогащением по урану отработанного топлива ВВЭР, или добавлением урана высокого обогащения, извлеченного из сокращаемого ядерного оружия России или других стран, чтобы достигнуть желательной композиции топлива. В (5) показано, что использование этого типа смешанного топлива мало изменяет характеристики БРЕСТ.

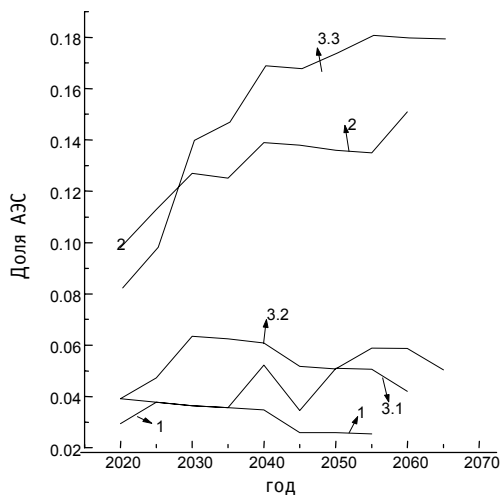


Рис.8. Относительная доля АЭС в обеспечении электроэнергией (2-й этап развития АЭС в Иране)

Список литературы

1. National energy data profile/wec/Islamic Republic of Iran/16th wec congress Tokyo,1995.
2. *Adamov E.O., Orlov V. V. et al.* «The next generation of fast reactors». Nuclear engineering and design 173. - 1997. - P.143-150.
3. *Adamov E.O., Ganev I. Kh. et al.* «The raw material and waste activity balance in the projected nuclear power of Russia». Nuclear Engineering and Design 173. -1997. - P.277-291.
4. *Yoichi FUJIII-E*, « Long term outlook of nuclear development». Bull. Res. Lab. Nucl. Reactor. - 1996. - V. 20.
5. *Наумов В. В., Орлов В.В.*, Топливный баланс ядерной энергетике с быстрыми реакторами без уранового blankets // Атомная Энергия. - 1994. - Т. 76. - Вып. 4. - С. 349-350.

Поступила в редакцию 21.06.99.

УДК 621.311.25:621.039

УПРАВЛЕНИЕ ТЕХНИЧЕСКИМИ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫМИ РИСКАМИ НА ОБЪЕКТАХ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ НА ОСНОВЕ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ РЕГИСТРАЦИИ И ДОКУМЕНТИРОВАНИЯ СИГНАЛОВ

В.В.Титов

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск



В статье раскрываются возможности применения многофункциональных автоматизированных систем регистрации сигналов (МСР) на высокорисковых промышленных объектах, в т.ч. ядерной энергетики.

ВВЕДЕНИЕ

Сегодня на большинстве объектов атомной энергетики применяется компьютерные системы, позволяющие решать практические вопросы целевого системного сбора и оценки информации о функционировании объекта. Значительно меньше внимания уделяется вопросам информационно-логического сопряжения. Между тем, существует потребность охватить в информационном плане ряд специфических сторон деятельности промышленных предприятий, прежде всего, с целью обеспечения более надежной системы безопасности и управлению рисками. Следует отметить, что в технически развитых странах в этих целях широко используется специальная аппаратура, общее сертификационное название которой - многоканальная цифровая система регистрации и документирования информации – МСР. Специфические многофункциональные возможности системы МСР детально описаны в работах д.т.н. В.В.Симакова.

В настоящее время Центр конверсионных технологий Минэкономики РФ, которым руководит профессор В.В. Симаков активно работает над проектом применения системы МСР на атомных станциях и других высокорисковых объектах. Целью базового проекта МСР Атом является внедрение на объектах ядерной энергетики системы, предназначенной для регистрации информационных кластеров, документирования, контроля и повышения эффективности оперативного управления атомными станциями и другими производственными комплексами Министерства атомной промышленности.

До середины 80-х годов в России основная доля риска приходилась на глобальный уровень – уровень государства. С появлением самостоятельности хозяйствующих субъектов ситуация изменилась. Теперь основную часть риска несут производственные организации.

© ***В.В.Титов, 1999***

Видовое разнообразие рисков очень велико – от пожаров, аварий и стихийных бедствий, до изменений в законодательстве и инфляционных колебаний. Более того, в конце XX в. появились новые виды риска, которые трудно оценить количественно. Так, всеобщая компьютеризация и автоматизация производства приводит к тому, что в результате сбоя в работе компьютерной системы возможны невосполнимые потери.

Эффективная производственная деятельность, как правило, сопряжена с освоением новой техники и технологий, поиском резервов. Но внедрение новых технологий увеличивает вероятность техногенных катастроф, причиняющих значительный ущерб природе и людям. Так называемый технический риск определяется степенью организации производства, проведением превентивных мероприятий (усиление мер безопасности, профилактика оборудования).

Мною, как одним из разработчиков данного проекта, исследованы вопросы минимизации производственных и технических рисков на объектах атомной энергетики на основе использования возможностей системы МСР-6000. Особый акцент сделан на правовое регулирование применения данной автоматизированной системы на высокорискованных производствах.

Ведущие в области мультимедийных технологий фирмы “DL-2” (Германия), “Pukon” (Великобритания), «КОМ» (Венгрия) предлагают свою продукцию российским предприятиям. Однако эти фирмы столкнулись с трудноразрешимой проблемой совместимости своих систем с нашими линиями связи, что не позволяет обеспечивать надежные условия эксплуатации их аппаратуры. Между тем, российские разработчики аналогичной аппаратуры успешно решили большинство эксплуатационных проблем и выставляют на мировой рынок образцы продукции, которые своими техническими характеристиками значительно опережают зарубежные аналоги.

КОНЦЕПЦИЯ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ РЕГИСТРАЦИИ И ДОКУМЕНТИРОВАНИЯ НА РИСКОВЫХ ОБЪЕКТАХ

Применение многофункциональной системы МСР предусматривает комплекс технических и программных средств, предназначенных для решения задач накопления, приема-передачи и анализа таких видов информации как речевая, текстовая, цветное изображение, сигналы телеметрии и т. д.

Целями функционирования подобной системы на атомных станциях, промышленных предприятиях и научно-исследовательских институтах ядерной энергетики являются:

- предоставление оперативной информации всем уровням управления объектом, начиная с диспетчера и дежурного оператора и заканчивая министром атомной промышленности;
- возможности детального документирования действий различных служб, обмен регистрируемой информацией в ходе их взаимодействия.

Каждый диспетчер, дежурный оператор на промышленном объекте получает достаточно большое число указаний по различным каналам связи. К тому же приходится реагировать на показания различных приборов, на табло, и поэтому используется автоматика - различные регистрирующие устройства. Эти комплексы помогают установить, на каком этапе произошла ошибка, кто принял неправильное решение. Они фиксируют все радио- и телефонные переговоры, а также сигналы телеуправления, т. е. «приказания», отданные диспетчером каким-либо приборам. Количество каналов может варьироваться от 4 до 32 и более; все проходящие сигналы записываются и сохраняются в течение длительного срока в памяти

ти системы или в архиве на магнитооптических дисках. В случае необходимости они могут быть воспроизведены в режиме реального времени. И тогда разбор любого происшествия будет происходить на основе документальной записи события.

В состав системы МСР входят комплекты оборудования:

- многоканальной автоматической регистрации речевой информации, поступающей по телефонным и радиоканалам;
- автоматизированного стенографирования речевой информации и создания совмещенных фонограмм - стенограмм;
- оперативной регистрации цветового изображения на месте происшествия с наложением необходимых текстовых и голосовых комментариев и дальнейшей передачей информации в центр.

В условиях чрезвычайных ситуаций особое значение имеет **документальность** поступающей в координирующий центр информации. Комплекс МСР-6000 позволяет непрерывно накапливать и анализировать информацию в виде цветных изображений с места события, карт-планов, текстовых документов и фонограмм, привязанных к времени и месту событий. Такое разнообразие и объем информации позволяет надеяться на то, что, обработав ее, специалисты-эксперты предложат оптимальный алгоритм действий по устранению ЧП. Испытания комплексов МСР продемонстрировали их высокие эксплуатационные характеристики и широкие функциональные возможности. На сегодняшний день система реализует более 100 функций.

К системам информационного взаимодействия предъявляются высокие требования к полосе пропускания телекоммуникационных каналов и используемых систем передачи данных, т.к. информационная плотность цифровых потоков при их передаче в реальном масштабе времени превосходит пропускную способность распространенных сегодня линий связи (аналоговых коммутируемых телефонных линий 9-14 Кбит/с) на 2-3 порядка. С развитием современных сетей связи с широкополосного доступа к ним, время передачи информации резко сократится, что обеспечит качественно новый уровень информационного взаимодействия.

Руководителями управляющих структур атомной промышленности предоставляется возможность получения оперативной мультимедиаинформации о чрезвычайной ситуации (ЧС) в виде цветных фотографий с разметкой, карт-планов, необходимых комментариев экспертов, которую с помощью мобильного комплекса МСР-ТВ можно передать в координирующий управленческий центр из любой точки России. Кроме того, обеспечивается необходимая обратная связь. После всестороннего анализа ситуации с помощью комплекса МСР-ТВ возможно передать также в мультимедийном представлении необходимые директивы (по принципу: схема операции + текст приказа + фонограмма) одновременно в любые из подразделений ведомства, оснащенные необходимой аппаратурой. В любой момент можно прослушать необходимую запись, не прерывая процесса регистрации. Обеспечивается хорошее качество записи, отсутствуют шумовые помехи. Система дает возможность прямо на месте события специальной цифровой камерой сделать 44 цветных снимка высокого качества на обычной бумаге. При этом на них фиксируются дата, время, линия разметки; одновременно можно сделать фонограмму.

Внедрение МСР на объектах атомной энергетики позволяет построить работу управленческих групп и диспетчерских служб на совершенно новом качественном уровне. Каждый звонок, любое сообщение по всем каналам связи не останется без внимания. Расширяется информационный обмен между операторами и руководителями объектов всех степеней, которые в любой момент могут получить

достоверную информацию о положении дел на предприятии. Комплекс МСР позволяет обеспечить поиск необходимой информации, круглосуточно поступающей по телефонам при переговорах операторов и дежурных диспетчеров со звонившими абонентами. Но функция цифрового магнитофона лишь одна из 40 интеллектуальных задач которые способен обеспечить комплекс, в том числе, быстрый поиск, извлечение и маркировка необходимых данных и т.д.

Система МРС работает в непрерывном режиме, ничем не нарушая повседневную работу диспетчерской службы, а лишь хронологически контролируя ее работу. Постоянная запись всех переговоров накапливается в специальном архиве и хранится установленное время. Система автоматически отфильтровывает случайные помехи и искажения. Немаловажным обстоятельством является и то, что установка комплекса не требует больших затрат и особой квалификации обслуживающего персонала. Достаточно небольшой объем знаний пользователя компьютерной техники позволяет ему освоить и успешно эксплуатировать систему МРС.

Компьютеризированные информационно-управляющие системы для оперативных и диспетчерских служб значительно облегчают персоналу этих служб выполнение следующих задач в режиме реального времени:

- доступ к информации, которая необходима и может быть использована в экстремальных случаях;
- оказание помощи при ЧС в рамках задач центров по управлению оперативными действиями, и координация действий всех дежурных служб при ЧП;
- оперативная передача информации о ЧС как непосредственно силам, участвующим в реагировании, так и в органы власти и управления, которые могут принимать решения в ЧС.

Для того, чтобы процесс управления оперативными действиями был эффективным, он должен быть разбит на различные, с точки зрения организации, задачи: оперативные, диспетчерские и административные, определяемые спецификой пользователей. При этом руководитель оперативными действиями освобождается от рутинной работы и может полностью сконцентрироваться на управлении оперативными действиями. Имеющаяся коммуникационная сеть великолепно администрируется и круглосуточно контролируется. Компьютерная обработка актуальной информации обеспечивает эффективную координацию оперативными действиями.

Новейшей разработкой, входящей в состав единой многофункциональной системы МСР, является комплекс МСР-ТВ. Он позволяет составить документ о чрезвычайной ситуации на объекте, о каких-либо строительно-монтажных работах, идущих на объекте, который включает цветные фотографии, карту с места события с нанесением на ней линий разметки, текст комментария и голоса участников свидетелей происшествия. Такой документ можно передать по любому виду связи, включая обычный телефон, в центр управления будь-то министерство, спецслужбы, дирекция объекта или органы власти. В итоге лица, на которых возложена задача принятия решения, будут иметь полную информацию о происшествии буквально через несколько минут после подключения комплекса к обычным телефонным линиям. Кроме того, комплекс МСР позволяет решать ряд специфических задач, возникающих в деятельности дежурных служб предприятий. Практически вышеназванная аппаратура незаменима в борьбе с "телефонным терроризмом" и утечкой информации, составляющей коммерческую тайну. Комплекс МСР обеспечивает определение номера звонившего абонента и высокое качество записи его голоса, что позволяет установить его личность с помощью специальной методики идентификации. Разоблачение ряда лиц в г. Москве, которые анонимными звон-

ками в государственные учреждения и особо важные объекты промышленности дезорганизовывали их нормальную работу, лучшее свидетельство полезности и необходимости комплекса МСР для нормального функционирования промышленности объектов особого назначения.

Реалии современной России требуют от должностных лиц и руководителей предприятий всех форм собственности обеспечить безопасность функционирования объектов, а значит и спокойную жизнь граждан. Нельзя исключить возможность обнаружения взрывного устройства на любом промышленном объекте. Нетрудно установить, какие осложнения в нормальной жизнедеятельности любого города способно вызвать данное событие, особенно, если этот объект АЭС или предприятие, имеющее атомный реактор. В условиях дефицита времени на принятие решения при оперативных действиях по разминированию особую ценность могут представлять мнения экспертов и специалистов, обеспечить срочное прибытие которых непосредственно на объект не всегда представляется возможным.

Комплекс МСР-ТВ позволяет передать в экспертный центр информационный блок, содержащий фотоизображение взрывного устройства (ВУ) с графической разметкой, текстовые и речевые комментарии. Это позволяет специалистам-экспертам классифицировать ВУ, проанализировать особенности его конструкции, провести оперативную проверку переданных фотоизображений отпечатков пальцев, фотографии подозреваемых лиц, образцы их почерка, речи и т. д. Поскольку комплекс МСР-ТВ является мобильным, то он, во-первых, позволяет зафиксировать все детали конструкции ВУ, в том числе с увеличением отдельных фрагментов. Во-вторых, обеспечить возможность съемки с негативных и позитивных рентгеновских изображений, детализирующих скрытые элементы конструкции ВУ. Любое количество цветных фотоизображений объекта в электронной форме, высокого качества (с разрешением до 1600x1200 и более) передается в экспертный центр по обычным телефонным каналам связи, радио и спутниковым каналам. За считанные минуты информация может быть передана в центр из любой точки страны.

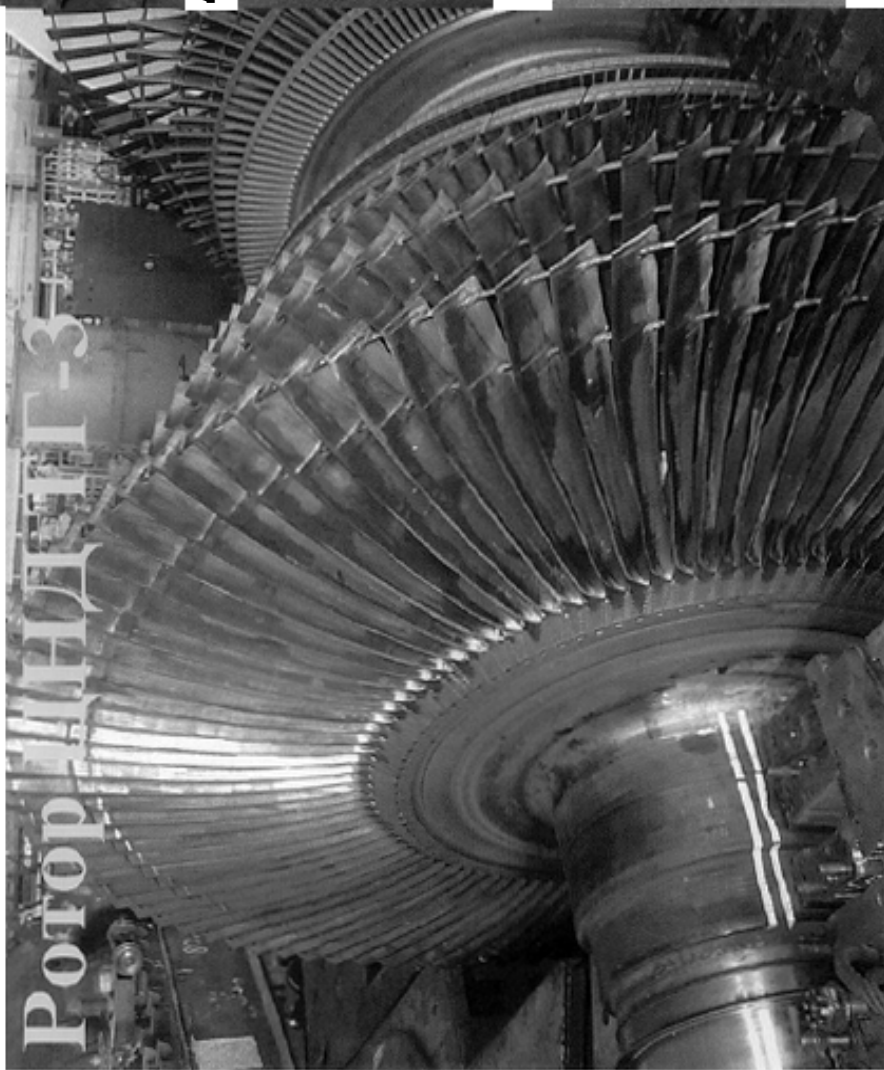
Таким образом, оперативность и достоверность информации, передаваемой с места события комплексом МСР-ТВ, позволит руководителям объектов атомной энергетики, спецслужб, администрации населенного пункта еще до прибытия на место происшествия уже иметь полное представление о его размерах, что, естественно, помогает принять правильное решение. За счет совместимости используемых видов связи решается вопрос объединения усилий по устранению причин и условий ЧП различными оперативными службами города - пожарными, милицией, скорой помощью, аварийными службами газо- и теплоснабжения и т. д. В случае возникновения изменений в экологической обстановке, комплекс позволяет отслеживать ее улучшение или ухудшение.

Все это свидетельствует о том, что необходима модернизация аппаратуры документирования на объектах атомной промышленности и энергетики.

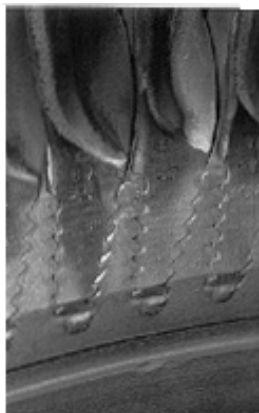
Одной из актуальных практических задач в деятельности АС остается вопрос сохранности необходимой документации страхового фонда. В настоящее время указанная документация закладывается в мультфиши, что требует определенных материальных и временных затрат. В целях экономии времени и денежных средств этот процесс можно принципиально упростить, используя вместо мультфиш возможности многофункциональной регистрируемой системы МСР-6000.

В настоящее время в действующую Инструкцию МЧС по вопросу хранения архивной документации вносятся необходимые коррективы. В качестве эксперимента в 1999 г. на Курской атомной станции предполагается установить комплекс МСР на 5 энергоблоке.

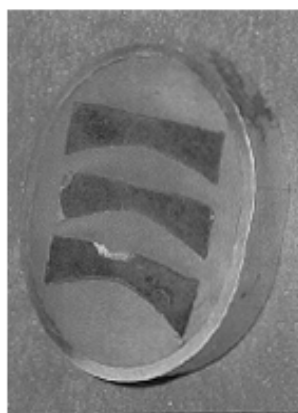
Лаборатория металлов КуАЭС. 11.01.99 г. 12 ч. 35 м.



Дефектная лопатка



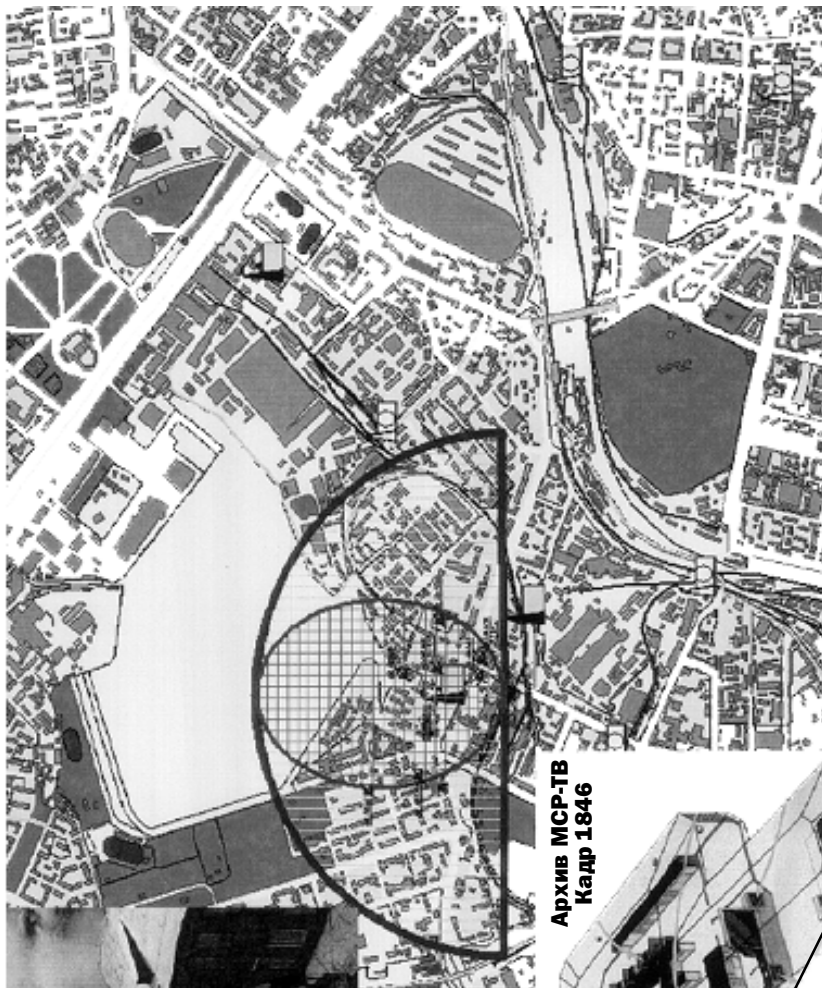
Гребенка лопатки



Скол лопатки

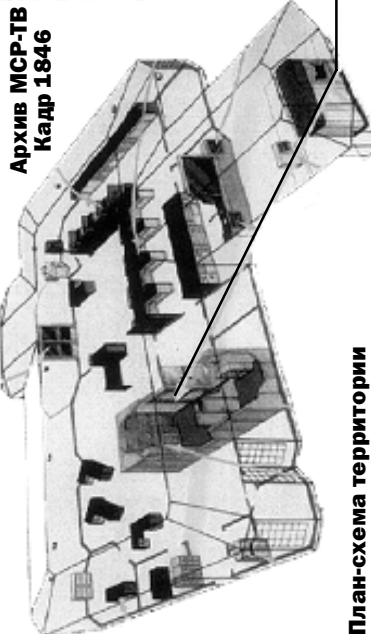
Время формирования фотоплана 30 мин. Время передачи в любую точку России и СНГ - 3-6 мин. Выполнено на комплексе МСР-ТВ/М ФПК «ЭСТРА». Тел. 369-78-98 www.tstra.ru

**Рабочая карта оперативной дежурной смены ЦУКС ЕКОДУ
Обстановка в зоне аварии на Хладокомбинате №7 на 15.40 18.05.98**



**18.05.98
15.40**

ХАРАКТЕРИСТИКА ЧС:
Авария на хладокомбинате №7
В результате разрушения емкости
произошел вылив на поверхность
аммиака в количестве 5 т



**Архив МСР-ТВ
Кадр 1846**

Резервуар с аммиаком, 5 т

План-схема территории

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

24 марта 1996 г. вступила в силу Конвенция о ядерной безопасности - первый международно-правовой документ, подписанный 65 государствами, в т. ч. и Российской Федерацией, касающийся безопасности ядерных электростанций.

Только в 1997 г. на АЭС России произошло 79 нарушений, подлежащих расследованию и учету в соответствии с национальной информационной системой. Нарушения включают в себя неплановые остановки, отключение энергоблоков от сети, разгрузки энергоблоков АС, отказы оборудования и систем, переоблучение персонала, загрязнение помещений и т. д. Нередко причиной аварий является "человеческий фактор". В. Ойгензихт в работе "Проблема риска в гражданском праве" исходит из того, что производственный риск всегда субъективен, поскольку реализуется через конкретного человека с его характером, складом ума, психологическими особенностями, уровнем знаний в области профессиональной деятельности.

Исследования в данной области позволяют надеяться на то, что внедрение мультимедиа технологий существенно улучшат организацию системы управления в атомной промышленности.

Поступила в редакцию 25.06.99.

УДК 523.683:523.64

ХАОТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА В ЗАДАЧЕ N-ТЕЛ

Н.В.Куликова, А.В.Мышев, П.И.Игнатенко

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск

Р

В работе рассматривается методика компьютерного моделирования и метод исследования эволюции объектов в задаче N-тел (формализация модели, построение решения, обработка и анализ полученных результатов). На примере решения задач (пространственная гравитационная задача 4 и 6 тел) показывается уникальность и перспективность разрабатываемых подходов и методов при исследовании эволюции объектов динамической системы N-тел, взаимодействие между которыми обусловлено полями различной природы.

ВВЕДЕНИЕ

Изучению стохастической эволюции объектов системы N-тел в настоящее время уделяется большое внимание. Прогностические оценки поведения комплексов объектов в задаче N-тел, а также отдельных объектов ближнего и дальнего космоса требуются при решении многих задач как научного характера, так и прикладного. Качественные и количественные решения задачи N-тел, эволюция которой проявляет хаотическую динамику, невозможны без применения методов компьютерного моделирования. В связи с этим разрабатываются новые способы исследования компьютерных моделей, имитирующих эволюцию системы N-тел, и методы анализа и интерпретации полученных результатов.

Поведение классических гамильтоновых динамических систем во многих случаях изучается в рамках пространственной задачи N-тел и представляет как научный, так и прикладной интерес не только для классической механики, но и для других областей естествознания. Математическая модель рассматриваемой динамической системы N-тел, в этом случае формализуется эволюционным оператором в форме системы обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными и краевыми условиями. Эволюционный оператор математической модели динамической системы N-тел представляет собой систему $6 \cdot N$ нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка, описывающих взаимодействие гравитирующих тел, а также негравитационные эффекты, входящие в уравнения в виде дополнительных нелинейных членов. Такая система дифференциальных уравнений не имеет аналитического решения для гравитационной задачи при $N > 2$. В этих случаях эволюция системы N-тел и построение численных решений дифференциальных уравнений осуществляется методами компьютерного моделирования. Для получения решения исходная математическая модель аппроксимируется линейной разностной схемой, где нелинейный оператор дифференцирования заменяется линейным разностным оператором. Разностная схема при этом может описываться методами численно-

го интегрирования как детерминированными, так и стохастическими, используя аппарат теории цифровых фильтров [11]. Адекватность непрерывной и дискретной математических моделей, описывающих поведение одной и той же динамической системы, определяется с учетом наличия следующих типов ошибок. Во-первых, линейность разностной схемы приводит к накоплению ошибок интегрирования при численном интегрировании. Во-вторых, источником накопления ошибок является дискретность самой компьютерной модели, поскольку числовая разрядная сетка компьютера ограничена. Это приводит к накоплению ошибок округления при интегрировании на больших промежутках времени [9]. Поэтому перед началом компьютерного моделирования производится процедура согласования различных типов ошибок [3, 5].

Хаотическая динамика в системах такого рода проявляется в силу неопределенности начальных и краевых условий задачи, а также параметров системы. Причины появления неопределенностей также обусловлены стохастическим способом описания переменных и параметров реальной динамической системы при формализации ее модели. Кроме того, стохастические явления в поведении системы вызваны дискретной аппроксимацией модели и линейным характером разностного оператора, аппроксимирующего оператор дифференцирования, что приводит к накоплению глобальных и локальных ошибок различного характера при проведении вычислительных экспериментов. Динамические системы, математические модели которых в своей формализации имеют стохастическое описание гравитационных и негравитационных взаимодействий, также будут вносить дополнительную составляющую в хаотические колебания.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая модель динамической системы N-тел задается эволюционным оператором и начальными условиями, определяющими состояние системы в момент времени t_0 . Задача состоит в том, чтобы получить наиболее полную информацию о состоянии системы в момент времени $t > t_0$ и об условиях, определяющих переход ее в это состояние.

Математические модели задачи N-тел могут быть формализованы следующим образом [2]:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{y}, t), \\ \mathbf{x}_1|_{t=t_0} &= \mathbf{x}_0, \\ \mathbf{x}_2 &: \mathbf{P}_1(t_0, \mathbf{x}_{2|t=t_0}), \\ \mathbf{y} &: \mathbf{P}_2(t, \mathbf{y}), \end{aligned} \tag{1}$$

где \mathbf{x} - вектор решений задачи (1); \mathbf{F} - вектор сил, описывающий гравитационное и негравитационное взаимодействие между телами системы; \mathbf{x}_1 - вектор детерминированных переменных; \mathbf{x}_2 - вектор стохастических переменных, координаты которых есть случайные скалярные величины; \mathbf{y} - вектор стохастических параметров, которые включают в себе неопределенность некоторых параметров во времени, задаются функциями плотностей распределений вероятностей; \mathbf{P}_1 - вектор функций плотностей распределений вероятностей для значений координат \mathbf{x}_1 в момент времени t_0 ; \mathbf{P}_2 - вектор функций плотности распределения вероятностей для значений координат векто-

ра параметров \mathcal{U}_1 в любой момент времени $t \geq t_0$. Суммарная размерность векторов \mathcal{X}_1 и \mathcal{X}_2 должна удовлетворять следующему соотношению [2]:

$$\dim \mathcal{X} = \dim \mathcal{X}_1 + \dim \mathcal{X}_2. \quad (2)$$

Траектории в фазовом пространстве позволяют дать только качественную картину состояния системы. Данный подход не позволяет проследить эволюцию системы наиболее подробно на всем заданном интервале времени. Состояние системы лучше характеризовать вероятностью ее нахождения в некоторой области метрического пространства переменных, параметров и времени, в котором строится решение системы (1) [3,5].

Поведение системы N-тел, формализуемой задачей (1), можно описать с помощью системы булевых вероятностных пространств (B_j^i, F_j^i, P_j^i) , где B_j^i - пространство исходов, координат тел системы; F_j^i - алгебра событий на B_j^i ; P_j^i - вероятностная мера, заданная на классе событий F_j^i ($i = \overline{1, N}; j = \overline{1, 6}$).

Во многих случаях, достаточно сложно и иногда невозможно построить вероятностные меры в пространствах (B_j^i, F_j^i, P_j^i) . Однако в задачах классической физики можно построить отображение исходного вероятностного пространства (B_j^i, F_j^i, P_j^i) в вероятностное пространство элементов кеплеровского движения (Y_j^i, G_j^i, R_j^i) . Переход от пространства переменных \mathcal{U} и \mathcal{X} в пространство элементов кеплеровского движения a, e, i, ω, Ω представляет собой удобный вариант такого отображения и позволяет анализировать качественные и количественные изменения в эволюции системы N-тел. Y_j^i - точечное множество, определенное на кеплеровском пространстве элементов для i -ой координаты j -го тела системы; G_j^i - алгебра событий на Y_j^i ; R_j^i - вероятностная мера, заданная на G_j^i . Стохастический образ эволюции системы N-тел задачи (1) в этом случае будет описываться системой булевых вероятностных пространств (Y_j^i, G_j^i, R_j^i) .

При компьютерном моделировании поведения динамической системы, описываемой задачей (1), исходная математическая модель исследуется в рамках компьютерной динамической системы. Состояние компьютерной динамической системы в дискретные моменты времени t_k во время вычислительного эксперимента определяется системой дискретных булевых вероятностных пространств $(\hat{B}_j^i, \hat{F}_j^i, \hat{P}_j^i)$. \hat{B}_j^i - область изменения координат тел динамической системы. Стохастический образ эволюции тел системы на всем интервале интегрирования T , описывается другой системой дискретных булевых вероятностных пространств $(\hat{Y}_j^i, \hat{G}_j^i, \hat{R}_j^i)$. \hat{Y}_j^i - дискретное пространство изменения элементов кеплеровского движения. Отображение \hat{B}_j^i на \hat{Y}_j^i выполняется по известным формулам классической механики [7]. Построение решений задачи (1) в $(\hat{Y}_j^i, \hat{G}_j^i, \hat{R}_j^i)$ осуществляется по схеме Бернули [1] на основе методов Монте-Карло. Стохастическое поведение динамической системы N-тел исследуется методом вероятностных карт, который разработан А.В. Мышевым для исследования эволюции динамических систем и описан в [2]. Кратко опишем суть метода вероятностных карт.

Основная идея метода состоит в том, что плоскость изменения координаты пространства во времени $(e_j, 0, t)$ разбивается на “клеточные” множества. На рис.1 показано символическое изображение стохастического образа эволюции e_j координаты выборочного пространства на интервале времени $t \in [t_0, t_{end}]$. Этот рисунок также объясняет процедуру разбиения на «клеточные» подмножества области изменения e_j на интервале $t \in [t_0, t_{end}]$. Диапазон изменения j -элемента кеплеровского движения ограничен значениями e_{min} и e_{max} , это предельные значения, которые может принимать j -элемент на $[t_0, t_{end}]$. Величины e_{min} и e_{max} вычисляются или оцениваются до начала моделирования. Шаги дискретизации δe и δt выбираются на основе условий согласования $\delta e \leq G(\Delta t)$, где $G(\Delta t)$ – глобальная ошибка интегрирования на интервале $[t_0, t_{end}]$ при шаге интегрирования Δt , $\Delta t < \delta t$. Для дискретной модели область изменения вероятностной меры $P(e_j, t)$ разбивается на уровни квантования, т.е. на отрезки, с шагом квантования δP . Размер этого шага определяется длиной доверительного интервала оценки вероятностной меры $P(e_j, t)$ по частоте [8]. Все уровни квантования нумеруются от нуля и выше, т.е. каждый уровень имеет свой целочисленный номер. Тогда значения оценок $P(e_j, t)$ в любые моменты времени определяются целым числом согласно номеру уровня квантования, в который попадает ее относительная частота, который получаем символический целочисленный образ $P(e_j, t)$ в плоскости $(e_j, 0, t)$. Такой образ очень удобен и эффективен при компьютерном анализе состояний и эволюции динамической системы N-тел.

МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Описанный подход формализации и исследования поведения системы (1) был применен для решения некоторых вариантов гравитационной задачи N-тел.

Компьютерное моделирование проводилось для N=4 и N=6, с различными динамическими характеристиками и параметрами тел. В этом случае уравнения системы (1) в системе координат, связанной с M_0 , имеют следующий вид [7]:

$$\frac{d^2 \rho_{i0}}{dt^2} = \gamma \left(-m_0 \frac{\rho_{i0}}{r_{i0}^3} + \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i, 0}}^{N-1} m_j \frac{\rho_{ij}}{r_{ij}^3} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 0}}^{N-1} m_j \frac{\rho_{j0}}{r_{j0}^3} \right), \tag{3}$$

$i=0, 1, \dots, N-1; i \neq 0,$

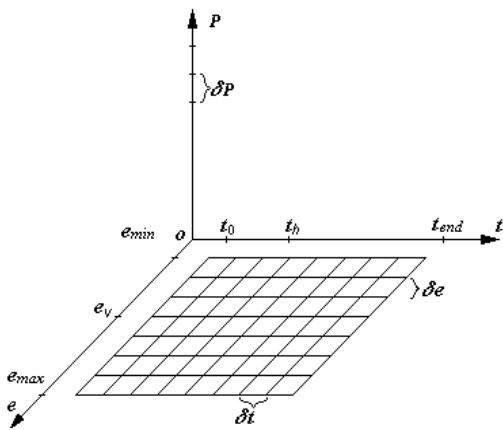


Рис. 1. Символическое изображение стохастического образа эволюции e_j координаты выборочного пространства на интервале времени $t \in [t_0, t_{end}]$

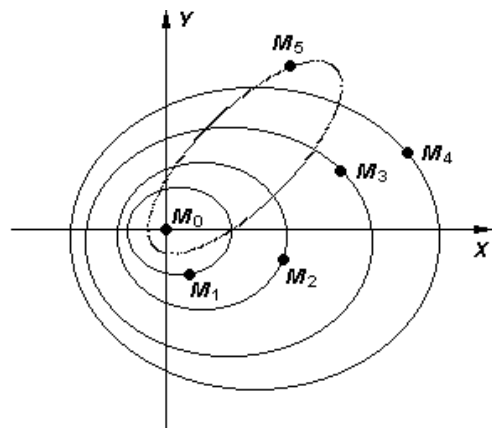


Рис. 2. Геометрия задачи

где m_j – массы тел, r_{ij} – взаимные расстояния, γ – гравитационная постоянная.

Геометрия задачи показана на рис.2. В рамках пространственной задачи 4-тел рассматривались следующие тела системы: M_0, M_3, M_4, M_5 (рис.2). M_0 является центральным телом в системе, т.е. движение относительно него описывается оскулирующими элементами кеплеровского движения. За единицу измерения масс была выбрана масса тела M_0 , за единицу измерения времени – сутки, за единицу измерения расстояний – среднее расстояние между M_0 и M_1 . В выбранной системе единиц измерения массы тел m_j ($j=0..5$) принимают следующие значения: $m_0=1$, $m_1=3.04 \cdot 10^{-6}$, $m_2=3.72 \cdot 10^{-7}$, $m_3=9.55 \cdot 10^{-4}$, $m_4=2.86 \cdot 10^{-4}$, $m_5 \ll m_j$, ($j=0..4$). Элементы кеплеровских орбит для M_1, M_2, M_3, M_4 на момент t_0 соответственно имеют следующие значения: $a_1 = 1.0$, $e_1 = 0.017$, $i_1 = 0.045^\circ$, $w_1 = 107.1^\circ$, $Q_1 = 355.5^\circ$; $a_2 = 1.52$, $e_2 = 0.093$, $i_2 = 1.88^\circ$, $w_2 = 283.93^\circ$, $Q_2 = 50.5^\circ$; $a_3 = 5.20$, $e_3 = 0.048$, $i_3 = 1.310^\circ$, $w_3 = 272.82^\circ$, $Q_3 = 99.79^\circ$; $a_4 = 9.56$, $e_4 = 0.056$, $i_4 = 2.481$, $w_4 = 341.0$, $Q_4 = 114.5$.

Интегрирование уравнений движения проводилось разновидностью одношаговой схемы Рунге-Кутты по алгоритму Эверхарда. Данный метод с адаптивным шагом интегрирования показал удовлетворительные результаты по точности и скорости счета. Для уменьшения влияния глобальной ошибки интегрирования весь интервал интегрирования (400 лет) разбивался на участки по 10 суток, и последовательно на каждом участке выполнялось интегрирование. Для проводившихся расчетов стохастической переменной была выбрана истинная аномалия v . Первичная область изменения стохастической переменной выбиралась произвольно, в данных расчетах эта область составляла $10^\circ v_0 \pm 5^\circ$, где v_0 точное значение на момент времени t_0 . Распределение вероятностей в области этой области принималось равномерным. Решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными стохастическими условиями $v_0 \pm 5^\circ$ строится методом Монте-Карло. В процессе интегрирования системы (1) заполняются статистические образы вероятностных карт для гелиоцентрических элементов a (большая полуось), e (эксцентриситет) и i (угол наклона орбиты). Шаги дискретизации для вероятностных карт этих элементов выбраны следующими: $\delta a = 0.1$ а.е., $\delta e = 0.01$, $\delta i = 1^\circ$, $\delta t = 100$ суток.

Кратко опишем схему расчета и заполнения статистических образов карт, которые представляют собой целочисленные матрицы размерности $p \times m$ по числу “клеточных” множеств (рис.1). При интегрировании уравнений движения (1) в дискретные моменты времени $t_k = t_{k-1} + \Delta t$ ($\Delta t = 10$ суток) имеем элементы кеплеровского движения изучаемого объекта e_{jk} . После этого увеличиваем значения соответствующих ячеек матриц, координаты ячеек v ($v \in 0..n-1$) и h ($h \in 0..m-1$) вычисляются на основе следующих неравенств: $e_{jv} \leq e_{jk} < e_{jv} + \delta e_j$, $t_h \leq t_k < t_h + \delta t$, где e_{jv} и t_h граничные значения “клеточных” множеств (рис.1). После заполнения матриц производится операция квантования частотной вероятности P .

Первый цикл расчетов проводился для исследования эволюции тела M_5 , когда данный объект в процессе своей эволюции имеет уникально-тесные сближения с M_3 . Расчеты проводились в рамках задачи 4-тел с учетом возмущений от M_3 и M_4 на протяжении 400 лет. Значения исходных элементов кеплеровского движения тела M_5 в эпоху 1660 взяты из [6], начальные координаты M_3 и M_4 также брались в эту эпоху. Варьирование начальными условиями тела M_5 в области $v \in 297.6^\circ \pm 5^\circ$ позволило выявить области регулярной (окрестность точки 300.0°) и хаотической динамики (окрестность точки 296.80°) и область выброса кометы на близко-параболические орбиты в окрестности точки 296.86° .

Для тела M_5 была определена топология начальных условий, для которой характерны следующие типы движений: регулярное движение $v \in 300.0^\circ \pm 0.001^\circ$, хаотическое движение $v \in 296.80^\circ \pm 0.001^\circ$ и выброс на близко-параболические ор-

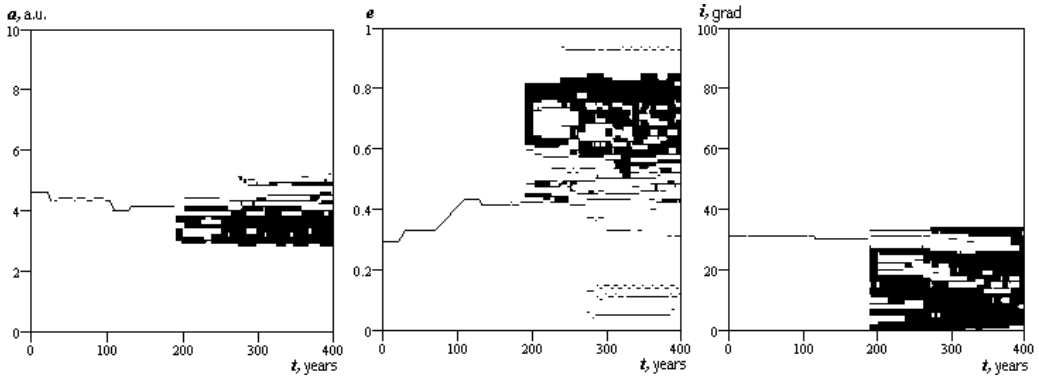


Рис. 3. Статистические образы эволюции хаотической области

биты $v \in 296.86 \pm 0.001^\circ$. Величина $\pm 0.001^\circ$ соответствует точности наблюдаемых данных. Статистические образы эволюции хаотической области представлены на рис.3, на этом и других рисунках черным цветом отмечены области ненулевого уровня квантования, а белым, соответственно, нулевого.

На данном рисунке видны области регулярного и хаотического движения (заштрихованные области), тенденции в изменении элементов, характерные моменты времени, определяющие резкие изменения элементов. В области хаотического движения наблюдаются запретные зоны (пустые зоны в хаотической области), что указывает на явную фрактальную структуру данного множества [2, 4]. На рис.4 представлен статистический образ эволюции кометы для топологии начальных условий, при которой происходит выброс на близко-параболические орбиты. Видны резкие увеличения a (большая полуось) и резкие изменения в e (эксцентриситет).

Также были проведены расчеты для объекта M_5 с другими начальными условиями, при которых данное тело имеет длительные (несколько лет) временные захваты его телом M_3 . Расчеты проводились в рамках задачи 4-х тел с учетом возмущений от M_3 и M_4 на протяжении 400 лет. Значения исходных элементов кеплеровского движения объекта M_5 в эпоху 1660 взяты из [6]. Варьирование начальными условиями M_5 в пределах $v \in 75^\circ \pm 5^\circ$ позволило выявить топологию начальных условий для регулярного и хаотического движения. Область хаотического движения имеет топологию начальных условий $v \in 75.0^\circ \pm 0.001^\circ$, а регулярного $v \in 79.67^\circ \pm 0.001^\circ$. На рис.5 и 6 представлены статистические образы эволюции элементов a, e, i для соответствующих топологий.

Также исследовалась эволюция тела M_5 для случая, когда в задаче (1) случайным параметром была масса M_3 . Вектор переменных \vec{x} детерминированный, т.е.

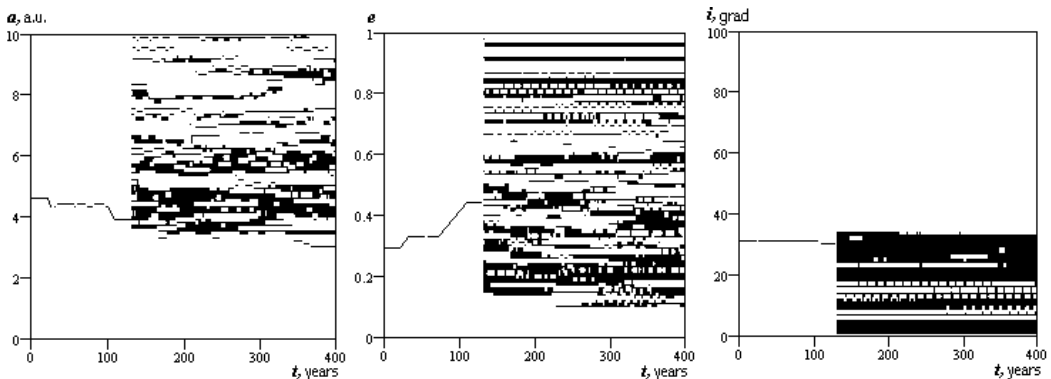


Рис.4. Статистический образ эволюции кометы для топологии начальных условий, при которой происходит выброс на близко-параболические орбиты

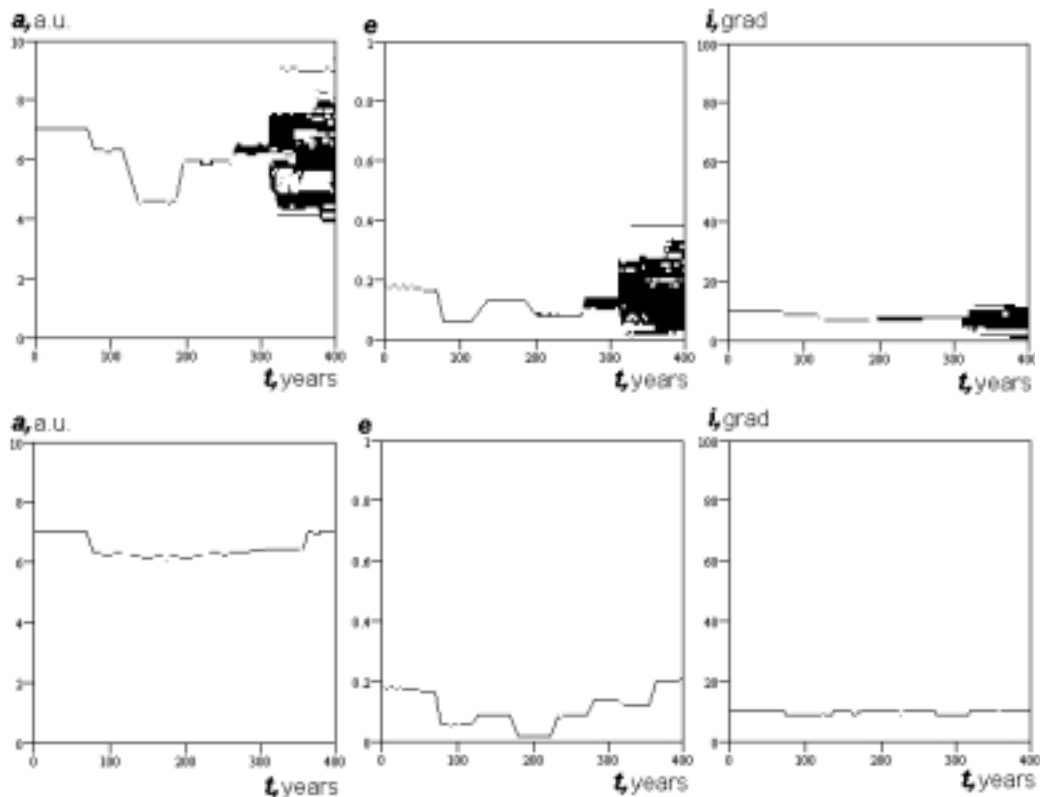


Рис.5, 6. Статистические образы эволюции элементов a, e, i для соответствующих топологий

все элементы кеплеровского движения орбиты заданы детерминировано на момент времени t_0 , $\dim \mathcal{K}_2=0$, стохастический параметр \mathcal{Y}_1 - масса M_3 , $\dim \mathcal{Y}_1=1$. Предполагалось, что масса является случайной величиной M_3 и задается равномерной плотностью

распределения на промежутке $M_3^{ист} \pm \frac{1}{100} M_3^{ист}$. Построение решения системы (1) выполнялось методом Монте-Карло при стохастическом задании параметра. Статистические образы эволюции элементов a, e, i тела M_5 представлены на рис.7. Видно, что система при таких начальных условиях и параметрах задачи также проявляет сложную динамику, для которой характерны зоны регулярного и хаотического движения.

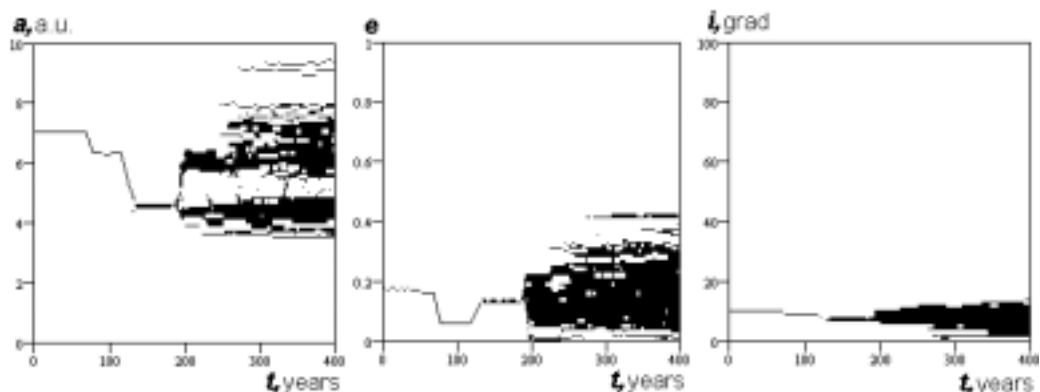


Рис.7. Статистические образы эволюции элементов a, e, i тела M_5

Последняя группа расчетов проводилась для исследования эволюции тела M_5 в рамках задачи 6-тел с учетом возмущений от M_1, M_2, M_3 и M_4 . Значения исходных элементов кеплеровского движения тела M_5 в эпоху 1882 взяты из [10]. При выбранных начальных условиях данный объект не имеет сближений с телами M_1, M_2, M_3 и M_4 на рассматриваемом промежутке времени 250 лет. Статистический образ эволюции элементов a, e, i для $\nu \in 165^\circ \pm 5^\circ$ представлен на рис.8. При заданных масштабах разбиения плоскости $(e_j, 0, t)$ $\delta a = 0.1$ а.е., $\delta e = 0.01$, $\delta i = 1^\circ$ эволюция элементов a, e, i не проявляет хаотической динамики на всем рассматриваемом интервале.

При уменьшении шагов дискретизации в 10 раз $\delta a = 0.01$ а.е., $\delta e = 0.001$, $\delta i = 0.1^\circ$ статистические образы более детально, точно описывают эволюцию элементов a, e, i (рис.9). Здесь видны локальные зоны хаотического и регулярного движения. На основе рассмотренных результатов можно сделать вывод, что именно тесные сближения с планетами могут приводить к хаотической динамике (см. рис. 3-7, 8), при уменьшении шагов дискретизации статистические образы вероятностных карт показывают более детально эволюцию системы (см. рис. 9).

Полученные результаты показывают сложное хаотическое поведение малых объектов в условиях сильных гравитационных возмущений при строго определенной топологии начальных условий и параметров системы. Приведенная здесь методика формализации модели и проведения вычислительного эксперимента позволяет по-новому описывать семейства траекторий движения в условиях стохастического хаоса. Представляется, что эта методика перспективна для различных классов задач теории динамических систем как экспериментальной физики, так и теоретической.

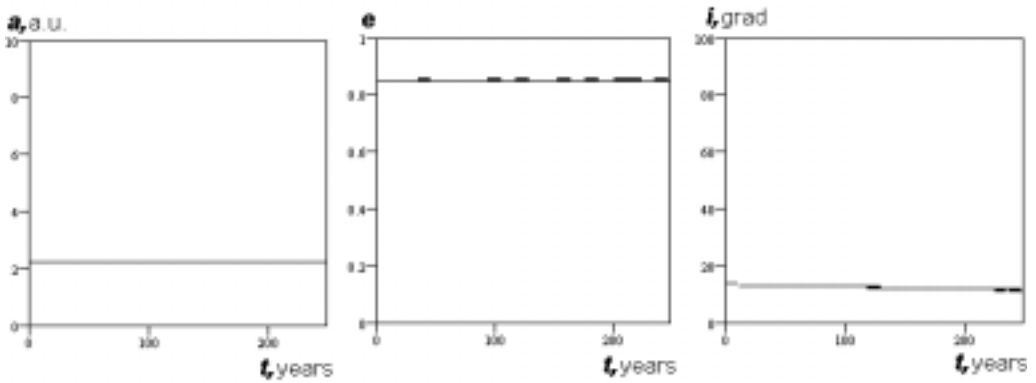


Рис.8. Статистический образ эволюции элементов a, e, i для $\nu \in 165^\circ \pm 5^\circ$

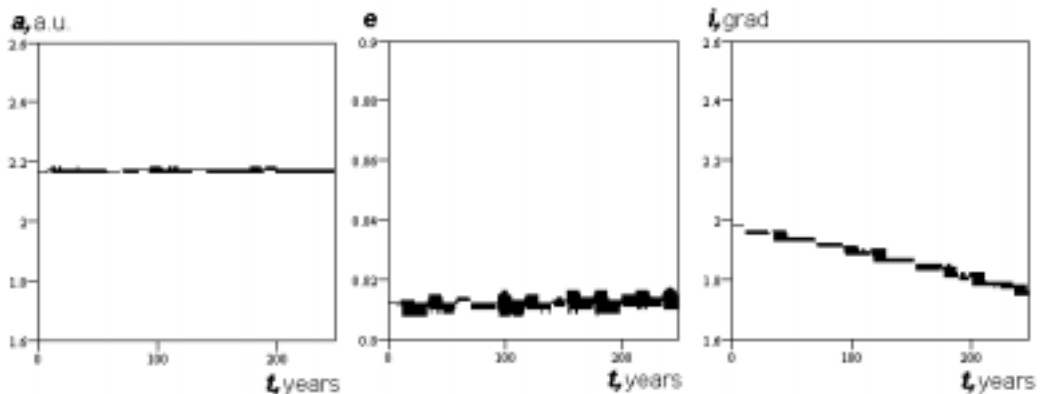


Рис.9. Эволюция элементов a, e, i при уменьшении шагов дискретизации в 10 раз

Несомненным преимуществом подобных дискретных методов анализа компьютерных моделей является простота представления решений систем дифференциальных уравнений в виде дискретных вероятностных карт. Поскольку данные структуры не сложно программировать, что важно на этапе отладки компьютерной модели, не малым преимуществом также является удобство хранения и возможность дальнейшего использования вероятностных карт, отражающих эволюцию системы (1), в виде целочисленных структур данных средствами современных вычислительных систем. Данные целочисленные дискретные стохастические образы легко сравнивать для проведения анализа взаимно изменяющихся параметров одной системы, так и разных систем. Анализ поведения динамической системы (1) в рамках компьютерной дискретной динамической системы позволяет выявить характерные этапы эволюции, а также условия и моменты времени определяющие эти этапы. В последующем можно динамическую систему формализовать несколькими математическими моделями, описывающими отдельные составляющие исходной динамической системы, и исследовать их по отдельности более подробно.

В дальнейшем представляется перспективным исследование дискретных динамических систем методом вероятностных карт на основе теории фрактальных размерностей, что позволит определять условия перехода от стационарного движения к хаотическому, ширину полосы и степень хаоса, тип хаоса - детерминированный или стохастический, условия выхода из хаоса, определять топологии начальных условий, приводящих к хаотическим колебаниям системы. Фрактальные образы вероятностных карт позволяют определить тенденции в поведении системы в условиях стохастического хаоса.

Работа поддержана грандом РФФИ №990217259.

Список литературы

1. Куликова Н.В., Мышев А.В., Чепурова В.М. Стохастическая динамика малых тел солнечной системы // Известия РАН. Серия физическая. – 1998. - Т.62. - Вып. 9. - С. 1902-1906.
2. Мышев А.В. Порядок, хаос и фракталы в небесномеханических системах // Известия РАН. Серия физическая. – 1998. - Т.62. - Вып. 9. - С. 1907-1913.
3. Мышев А.В. Вероятностно-статистическое моделирование процессов образования новых классов малых тел в космическом пространстве (вычислительные эксперименты). Дисс. на соиск. учен. степ. канд. ф.-м. наук, Москва, МГУ, 1995, 169 с.
4. Мышев А.В. // Тез. докл. научной конфер. «Новые теоретические и практические задачи небесной механики», ГАИШ МГУ, 1997. с.56.
5. Куликова Н.В., Мышев А.В., Пивненко Е.А. Космогония малых тел. -М.: Космосинформ, 1993. - 175 с.
6. Казимирчак-Полонская Е.И. Эволюция орбит короткопериодических комет на интервале 1660-2060 гг. и роль внешних планет в этой эволюции //Астрономический журнал. – 1967. - Т. 44. - № 2. - С.439-460.
7. Справочное руководство по небесной механике и астродинамике / Под ред. Дубошина Г.Н. - М.:Наука, 1976. - 800 с.
8. Вентцель Е.С. Теория вероятностей. - М.: Наука, 1964. - 375 с.
9. Thomas Quinn and Scott Tremaine Roundoff error in long-term planetary orbit integrations // Astronomical Journal. – 1999. – V.99. - №3. - P.1016-1023.
10. Belyaev N.A., Kresak L., Pittich E.M., Pushkarev A.N. Catalogue of short-period comets., Bratislava, 1996.
11. Пугачев В.С., Синицын И.Н. Стохастические дифференциальные системы. - М.: Наука, 1985. - 560 с.

Поступила в редакцию 20.05.99.

УДК 504.3.054:681.7.069.24

ВОЗМОЖНОСТИ ЗОНДИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ В РЕАЛЬНОЙ АТМОСФЕРЕ С ПОМОЩЬЮ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЛАЗЕРОВ

М.М.Троянов, Ю.Д.Ильичев

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск



Исследуются возможности реального приборного определения поглощающих примесей в атмосфере методом дифференциального поглощения при использовании CO₂-лазеров на изотопах.

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших проблем, связанных с бурным развитием энергетики, является экологическая проблема загрязнения атмосферного воздуха различными газами и аэрозолями. В частности, в некоторых высокоразвитых странах (например, Германия, Франция) в связи с выбросом тепловыми электростанциями в атмосферу больших количеств сернистого ангидрида в последнее время заметен крен в государственной политике и в общественном сознании в пользу развития атомной энергетики. Поэтому весьма актуальным является исследование возможностей различных методов контроля и мониторинга загрязняющих примесей в атмосфере, в особенности дистанционными методами. Одним из таких методов является метод дифференциального поглощения и рассеяния лазерного излучения (ДПР) [1]. При осуществлении такого метода чрезвычайно важной является проблема учета параметров атмосферы.

РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Для реальной атмосферы характерно присутствие целого комплекса примесей, каждая из которых имеет свой индивидуальный спектр поглощения, в результате чего поглощение на данной длине волны представляет собой линейную комбинацию поглощений всех газовых компонент. При этом линии излучения используемых лазеров далеко не всегда совпадают с резонансными линиями поглощения детектируемого газа, а относительно малые концентрации загрязняющей примеси могут сделать невозможным выделить полезный сигнал на фоне «шума» за счет поглощения основными атмосферными компонентами даже вблизи резонансных линий. Поэтому достаточно актуальной темой является разработка методов определения параметров лазерных излучателей (длин волн, мощности зондирующего сигнала и т. п.), с помощью которых можно обнаружить искомую примесь на фоне реальной атмосферы.

© М.М.Троянов, Ю.Д.Ильичев, 1999

В качестве исходного материала для расчета фонового поглощения атмосферой лазерного излучения на определенной длине волны могут быть использованы данные, имеющиеся в атласах линий поглощения различных газов. В настоящее время накоплены значительные банки данных по спектрам поглощения различных газов и разработаны методы расчета на ЭВМ функций поглощения излучения для многокомпонентной примеси в атмосфере. Видимо, наиболее полным и информативным является банк данных «Хитран-91» [2], который включает данные о 650 тыс. линий поглощения для тридцати газов в инфракрасном диапазоне, в спектральной области от 0 до 21390 см⁻¹. Авторами данной работы созданы программные средства для этого банка, позволяющие рассчитывать спектры поглощения газов и их смесей как по горизонтальным, так и по наклонным трассам. Таким образом, содержащаяся в банке данных «Хитран-91» информация о линиях поглощения атмосферных газов и малых газовых составляющих используется для расчета спектров 30 различных газов и их смесей в инфракрасном диапазоне, что может быть применено для оценок поглощения лазерного излучения реальной атмосферой.

Все имеющиеся в компиляции данные приведены для нормального атмосферного давления (в приземном слое атмосферы) и температуры 23⁰С. Поэтому в связи с тем, что интенсивность линий зависит от температуры, а полуширины линий - от температуры и давления, при расчетах спектрального пропускания на наклонных трассах следует учитывать зависимость этих параметров от высоты. В компиляции нет достаточно полных данных о зависимости интенсивности линий и их полуширины от температуры и давления, поэтому учет этих зависимостей осуществляется на основе дополнительных соображений и предположений.

Уместно заметить, что диагностика газовых сред оптическими методами сводится, как правило, к многократно решаемой задаче расчета интегрального поглощения излучения в изолированной спектральной линии. В поисках эффективных методов решения этой задачи был разработан физико-математический подход к описанию поглощения излучения в изолированной линии оптически неоднородными газовыми средами, когда параметры задачи меняются на пути распространения излучения. Под эффективностью в данном случае понимается не только возможность реализации предложенного подхода на ЭВМ с приемлемой сложностью и быстродействием алгоритмов, но и возможность качественного анализа получаемых результатов. Ниже приведены лишь окончательные уравнения для расчета функции поглощения для таких сред (более подробно см. в [3]).

В предположении, что каждая изолированная спектральная линия имеет фойгтовский профиль, можно рассчитать функцию поглощения, которая помимо оптической толщины в центре линии зависит от эффективности лоренцевской и доплеровской ширины, интенсивности и профиля линии.

Показатель спектрального поглощения $\sigma(\nu)$, рассчитанный на одну молекулу и обусловленный влиянием всех линий, расположенных в выделенной спектральной области, определяется по формуле

$$\sigma_n = \sqrt{(\ln 2)/\pi} \sum_i^N \frac{S_i(z)}{\gamma_i^D(z)} H \left[\frac{v_z - v_i^0}{\gamma_i^D(z)} \sqrt{\ln 2}, \frac{\gamma_i^L(z)}{\gamma_i^D(z)} \sqrt{\ln 2} \right], \quad (1)$$

где $\gamma_i^D(z)$ и $\gamma_i^L(z)$ - доплеровская и лоренцевская полуширины линий соответствен-

но; $H(x,a) = (a/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2) dt}{a^2 + (x-t)^2}$ - функция Фойгта; суммирование ведется по числу учитываемых линий.

Расчет значений S и $\gamma_i^D(z)$ и $\gamma_i^L(z)$ как функций высоты, производится по формулам:

$$S(z) \equiv S(T(z)) = S(T_0) \left[\frac{T_0}{T(z)} \right]^n \exp \left[- \frac{hc_E}{k_B} \frac{T_0 - T(z)}{T_0 T(z)} \right], \quad (2)$$

где $T_0 = 296$ К - стандартная температура; $n \approx 1.5$ - коэффициент температурной зависимости интенсивности; $h = 6,626196$ эрг·с - постоянная Планка; $c = 2,997925 \cdot 10^{10}$ см/с - скорость света; $k_B = 1,380662 \cdot 10^{-16}$ эрг/К - постоянная Больцмана;

$$\gamma^L(z) = \gamma_0^L p(z) [T_0 / T(z)]^m, \quad (3)$$

где $p(z)$ - давление в атмосферах на высоте z ; m - коэффициент температурной зависимости полуширины;

$$\gamma^D(z) = (v_0/c) \sqrt{2(\ln 2)} k_B T(z) N_A / M, \quad (4)$$

где $N_A = 6,0220454 \cdot 10^{23}$ молекул/моль - число Авогадро; M - г/моль - молекулярная масса вещества.

Показатель общего спектрального поглощения рассчитывается по формуле

$$\alpha_n = \sum_j \sigma_j(v_j) N_j, \quad (5)$$

где N_j - концентрация молекул j -го газа в см^{-3} .

Таким образом, спектральную прозрачность T_v на трассе длиной L и зенитным углом φ можно рассчитать по формуле

$$T_v = \exp \left\{ (1/\cos \varphi) \sum_{z_h}^{z_b} [\alpha_n + \alpha_e(z)] dz \right\}, \quad (6)$$

где z_h и z_b - высота в начале и в конце трассы; $\alpha_e(z)$ - коэффициент экстинкции атмосферного аэрозоля.

При задании высотных профилей температуры, давления, коэффициентов аэрозольного ослабления, а также концентраций поглощающих газов возникает целый ряд проблем, которые при расчетах функции поглощения на горизонтальных трассах в ряде случаев можно было оставить без внимания. Одна из этих проблем - слабая изученность метеорологических полей в средней атмосфере, начиная примерно с уровня 30 км и выше. Поэтому степень сложности и неопределенности при задании профилей в существенной мере зависит от выбора положения трассы. Если трасса целиком расположена в тропосфере, то профиль таких метеопараметров как давление, температура, влажность, могут рассчитываться в соответствии с хорошо известными и проверенными формулами. Так, например, вертикальный ход атмосферного давления в нижней атмосфере может быть рассчитан по барометрической формуле

$$p = p_0 \exp[-Mgz/(RT)], \quad (7)$$

где $g = 980,665$ $\text{см} \cdot \text{с}^{-2}$ - ускорение свободного падения; $R = 8,31432 \cdot 10^7$ эрг/К·моль - газовая постоянная.

При использовании этой формулы для задания профиля в высоких слоях ат-

мосферы могут возникнуть существенные ошибки, поэтому для таких трасс профили давления надежней задавать по данным инструментальных наблюдений.

Профили температуры имеют по сравнению с давлением большую пространственно-временную изменчивость. С другой стороны, этот параметр хорошо изучен и постоянно измеряется. Например, известно, что в тропосфере (по крайней мере - выше пограничного слоя) вертикальный профиль температуры достаточно хорошо определяется двумя параметрами - приземной температурой и вертикальным градиентом, причем эти параметры измеряются на всех метеостанциях. Выше тропопаузы - вертикальный ход температуры качественно отличается от тропосферного. В частности, температура растет с высотой в стратосфере, убывает в мезосфере и т.д. Поскольку в этих областях для расчета температурных профилей требуется знание целого ряда труднодоступных для измерения параметров, здесь, на наш взгляд, целесообразно использовать соответствующие сезону и географическому положению модели распределения температуры.

Таким образом, изменения температуры с высотой могут рассчитываться по вводимому вертикальному градиенту γ :

$$T(z) = T_0(z) - \gamma z, \quad (8)$$

или задаваться прямым образом.

Наиболее серьезные трудности появляются при задании вертикального распределения концентрации молекул поглощающих газов. Для ситуаций, когда наклонная трасса расположена вдали от источников и стоков зондируемых газов, а сами газы химически неактивны (т.е. являются пассивной примесью), можно считать, что вертикальный профиль их концентрации за ходом плотности воздуха, и для расчета вертикального хода концентрации в нижней атмосфере можно пользоваться барометрической формулой (7). При этом следует иметь в виду, что вследствие интенсивного турбулентного перемешивания атмосферы дальтоновское разделение газов в нижней и средней атмосфере не происходит и относительная концентрация малых газовых составляющих остается приблизительно постоянной (как показывают многочисленные исследования) до высот примерно 80-100 км. Поэтому при использовании формулы (7) в показателе экспоненты следует оставлять молекулярный вес для воздуха, а концентрацию примеси получать путем умножения на соответствующий коэффициент.

В случае, когда поглощающие газы являются химически активными в атмосфере, высотный профиль концентрации зависит от конкретной географической, экологической и метеорологической ситуации и может существенно варьироваться. Поэтому для задания этих профилей требуется применять статистические модели, основанные на данных инструментальных измерений. Вопрос этот практически не изучен, в литературе имеются лишь отдельные несистематизированные данные по содержанию поглощающих газов. В особенности это относится к высоким слоям атмосферы. Тем не менее, по доступным литературным данным нами подготовлен пакет файлов, содержащих вертикальные профили малых газовых составляющих и загрязняющих газов для различных регионов земного шара. Кроме того, имеются среднестатистические вертикальные профили [4] некоторых поглощающих газов для полярной, умеренной и тропической зон.

Большое влияние на точность расчетов может оказывать вертикальный профиль аэрозольного ослабления [5]. В отличие от метеопараметров, коэффициенты экстинкции атмосферного аэрозоля имеют в тропосфере **большую** пространственно - временную изменчивость, чем в верхних слоях атмосферы. В качестве высотных профилей аэрозоля в тропосфере можно использовать модели высотного хода аэрозольной экстинкции, имеющиеся, например, в [6], для фонового, среднецик-

лического (между крупными вулканическими извержениями), морского, городского, вулканического аэрозоля. Для стратосферы более целесообразно использовать непосредственные данные зондирования аэрозоля (полученные и накопленные, например, Институтом экспериментальной метеорологии в г. Обнинске, за несколько последних лет).

Вертикальный профиль влажности существенно зависит от температуры и других метеорологических факторов и должен, вообще говоря, задаваться индивидуально для каждой ситуации. В условиях тропосферы в качестве оценочной может быть применена одна из эмпирических формул для вертикального хода влажности, например, формула Хргиана [7]

$$q = q_0 \cdot 10^{-bz - cz^2}, \tag{9}$$

где z - высота в километрах; q_0 - удельная влажность у земли, которая может быть рассчитана, например, при помощи формулы

$$q = 10^{7,6326(T-273)/(T-31,1)} \cdot 1,05/T, \tag{10}$$

а значения постоянных b и c для умеренных широт приведены в табл.1.

Таблица 1

Сезонные изменения параметров b и c формулы (9)

Время года	b	c
Зима	0,0483	0,0158
Весна	0,0941	0,0163
Лето	0,0947	0,0138
Осень	0,0905	0,0124

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РЕАЛЬНОЙ АТМОСФЕРЕ

Сформулированные выше алгоритмы расчета спектров поглощения атмосферы на наклонных трассах совместно с компиляцией «Хитран-91» и описанными выше параметризациями реализованы в виде базы данных на ПЭВМ IBM PC. В базе данных имеется возможность расчета коэффициентов поглощения $\sigma(\nu)$ и спектральной прозрачности $T(\nu)$ для любого спектрального интервала. Крылья спектральных линий, находящиеся за пределами этого интервала, учитываются путем задания поискового интервала спектральных линий выбранных газов. Это означает, что крылья всех спектральных линий, находящиеся за пределами выбранного диапазона длин волн, но в пределах интервала, заданного процедурой поиска линий, будут учтены при расчете.

Работоспособность базы данных может быть проиллюстрирована на

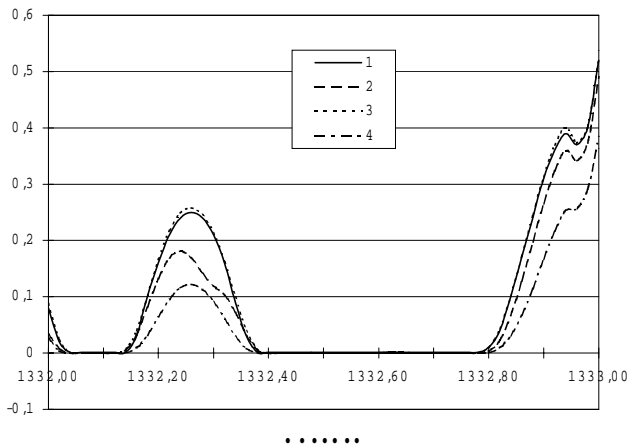


Рис.1. Результаты расчетов прозрачности для заданного профиля метана на трассе с начальной высотой 5 км, конечной высотой 30 км и зенитным углом 30°

примере простых демонстрационных расчетов спектров некоторых поглощающих газов. В качестве примера рассчитаем спектр поглощения метана в диапазоне $1332 - 1333 \text{ см}^{-1}$. Допустим, что высотный профиль концентрации метана соответствует данным наблюдений [8], приведенным в табл.2. Поскольку данный профиль содержит концентрации для слоя выше 5 км, будем рассчитывать спектры для наклонных трасс, лежащих между 5 и 30 км. На рис.1 приведены результаты расчетов прозрачности для указанного профиля метана на трассе с начальной высотой 5 км, конечной высотой 30 км и зенитным углом 30° . Первая линия относится к газовому составу, содержащему из поглощающих газов только метан. Вторая линия соответствует ситуации, когда в атмосфере присутствует водяной пар в концентрациях, равных среднеклиматическим для соответствующих значений температуры воздуха. Как и следует ожидать, наличие водяного пара на трассе уменьшает прозрачность, в особенности в тех участках, где не слишком велико поглощение метаном.

Третья кривая на рис.1 построена для тех же условий, что и первая, за исключением того, что в данном случае отсутствует ослабление атмосферным аэрозолем (коэффициенты экстинкции приравнены к нулю). Нетрудно видеть, что эти кривые практически сливаются, что вполне понятно, т.к. в данной области спектра поглощение метаном весьма значительно и превалирует над аэрозольным ослаблением.

Таблица 2

Высотный профиль концентрации метана

Высота, км	Концентрация
35.3	0.48E-6
34.05	0.55E-6
32.65	0.63E-6
31.25	0.68E-6
30.0	0.77E-6
28.0	0.73E-6
25.25	0.91E-6
23.3	0.98E-6
12.31	1.53E-6
12.30	1.57E-6
11.85	1.57E-6
11.23	1.67E-6
9.87	1.63E-6
9.02	1.65E-6
5.17	1.63E-6

Четвертая кривая на этом рисунке иллюстрирует температурную зависимость спектральной прозрачности. Параметры в данном эксперименте отличаются от исходных (первая кривая) заданием вертикального профиля температуры и соответствующей корректировкой профилей давления и плотности воздуха. В данном случае приземная температура принята 253K (что соответствует зимним условиям) при сохранении вертикального градиента температуры до примерного уровня зимнего положения тропопаузы, т.е. около 10 км. Из сопоставления кри-

вых следует прийти к достаточно нетривиальному выводу об уменьшении прозрачности загрязненной атмосферы при уменьшении температуры. Связано это с температурной зависимостью как самого фойгтовского контура, так и с увеличением плотности воздуха при падении температуры (заметим, что в наших расчетах абсолютные концентрации метана непосредственно следуют за плотностью воздуха).

Установив работоспособность алгоритмов расчета пропускания атмосферы, выясним возможности определения концентраций

загрязняющих примесей в реальной атмосфере реальными лазерами на примере таких газов, как SO_2 и NH_3 . Наиболее простыми, доступными и надежными являются CO_2 -лазеры, поэтому попытаемся определить пригодность таких лазеров для исследуемых задач. Немаловажным является то, что CO_2 -лазеры могут настраиваться на большое количество достаточно близких по частоте волн излучения в ИК-диапазоне (в районе 9 - 11 мкм), которое может быть еще увеличено при использовании в рабочей среде лазера различных изотопов углерода или кислорода.

По данным атласа «Хитран-91» сернистый ангидрид имеет полосу поглощения в области волн излучения CO_2 -лазера. В связи с тем, что в реальной атмосфере содержится достаточно значительное количество углекислого газа, последний существенно ослабляет зондирующее излучение, и полезный сигнал на фоне атмосферного шума будет выделить трудно. Расчеты показывают, что даже при концентрациях сернистого газа 1000 млн^{-1} на стандартных частотах излучения CO_2 -лазера поглощение «фоновой» атмосферы на несколько порядков превышает поглощение SO_2 . Поэтому для определения концентрации SO_2 в атмосфере выберем зондирующие волны изотопного CO_2 -лазера $^{18}\text{C}^{12}\text{O}^{18}$, в частности, линии R(20)- $1097,15 \text{ см}^{-1}$ и линии R(22) – $1098,32 \text{ см}^{-1}$, частоты которых попадают на крылья линий атмосферного углекислого газа. На рис.2 приведены результаты расчета спектров поглощения фоновой атмосферы со стандартными концентрациями основных газовых составляющих, соответствующими 20°C и давлению 1013 мбар, и SO_2 в относительной концентрации 10^{-7} . При расчете принимались следующие концентрации атмосферных газов: водяной пар - 0,0045; углекислый газ - 0,00035; озон - 10^{-8} ; кислород - 0,21; азот - 0,78.

Заметим, что для анализа применимости конкретной пары длин волн для зондирования примеси ДПР на фоне реальной атмосферы вполне достаточно рассчитать коэффициенты поглощения газов для нормальных атмосферных условий. Естественно, для вычисления ослабления на трассе следует применять полный расчет по формулам (1)-(6).

Как видно на рис. 2, коэффициенты поглощения для фоновой и загрязненной атмосферы отличаются примерно вдвое на частоте $1097,15 \text{ см}^{-1}$ и более чем в 4 раза на частоте $1098,32 \text{ см}^{-1}$. Из этого следует, что для обнаружения сернистого

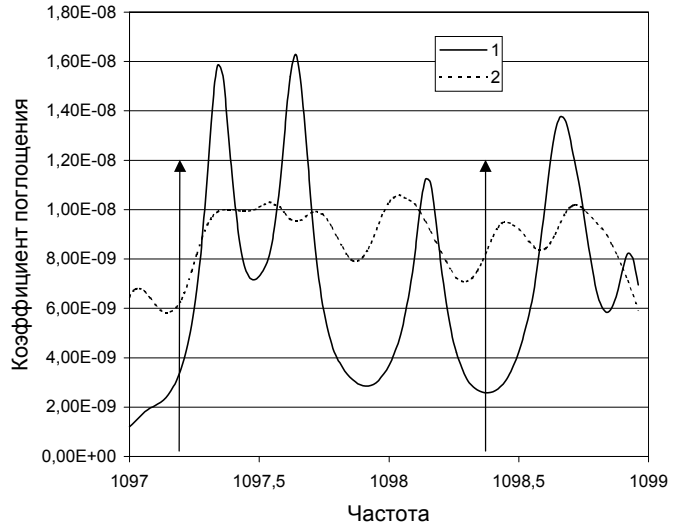


Рис. 2. Спектральный ход коэффициентов поглощения фоновой атмосферы и сернистого газа в области излучения волн и $^{18}\text{C}^{12}\text{O}^{18}$ -лазера (вертикальные стрелки - линии излучения зондирующего лазера)

газа в атмосфере такой подбор длин волн зондирующего излучения можно признать удачным, т.к. на одной из длин волн полезный сигнал может быть успешно выделен на фоне «шума» чистой атмосферы. Естественно, при изменении концентраций стандартных атмосферных газов спектры поглощения будут иметь количественные отличия, но для достаточно значительных концентраций различия на второй длине волны будут хорошо заметны.

На рис. 3 показаны результаты расчета спектрального хода коэффициента поглощения аммиака с концентрацией 10 млрд^{-1} в области его наиболее сильной (в районе 10 мкм) полосы поглощения. Как и в случае для сернистого газа, на волнах излучения обычного CO_2 -лазера сигнал аммиака плохо выделяется на фоне поглощения атмосферных газов. В случае же применения $^{18}\text{C}^{12}\text{O}^{18}$ -лазера на волнах $P(42) - 932,06 \text{ см}^{-1}$ и $P(40) - 933,98 \text{ см}^{-1}$ принципиальная возможность детектирования аммиака очевидна. Следует заметить, что подбор данной пары волн является тем более удачным, что первая длина волны попадает на одну из резонансных линий аммиака, а другая - на крыло, причем коэффициенты поглощения отличаются на порядок.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Возможности лазерного зондирования поглощающих газов в реальной атмосфере методом ДПР в среднем ИК-диапазоне могут быть существенно расширены при использовании CO_2 -лазеров на изотопах. Связано это с тем, что излучение «обычного» CO_2 -лазера заметно ослабляется содержащимся в атмосфере углекислым газом и другими примесями, в результате чего поглощение на зондируемой примеси не может быть выделено на фоне «шума» реальной атмосферы. Применение лазеров на изотопах позволяет сместить зондирующие волны на крылья резонансных линий стандартных атмосферных газов.

Главный же вывод заключается в том, что предложенный в данной работе подход позволяет промоделировать возможности реального приборного определения поглощающих примесей в атмосфере методом дифференциального поглощения.

Список литературы

1. Троянов М.М. Исследование возможностей лазерного зондирования загрязняющих примесей в реальной атмосфере: Сб. трудов ИЭМ. - 1995. - Вып. 25(160).
2. Rothman L.S. et al. The HITRAN Atmospheric Molecular Spectroscopic Database. - 1992.
3. Ишов А.Г., Клинова О.В. Функция поглощения для изолированной спектральной линии с фойгтовским контуром в оптически неоднородной газовой среде: Сб. трудов ИЭМ. - 1991. - Вып. 24(150).
4. Зуев В.Е., Комаров В.С. Статистические модели температуры и газовых компонент атмосферы. - Л.: Гидрометеиздат, 1986.

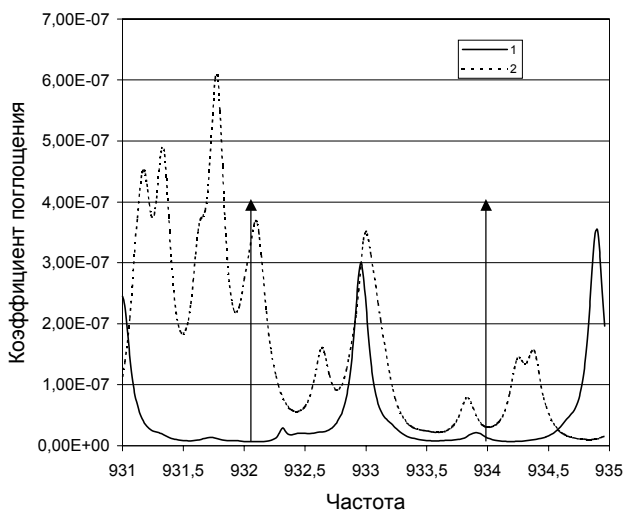


Рис. 3. Спектральный ход коэффициентов поглощения фоновой атмосферы(1) и аммиака(2) в области излучения волн $P(42)$ и $P(40)$ (стрелки) $^{18}\text{C}^{12}\text{O}^{18}$ -лазера (вертикальные стрелки - линии излучения зондирующего лазера)

5. Троянов М.М., Хмелевцов А.С., Хмелевцов С.С. Влияние стратосферного аэрозоля на ошибки лидарного измерения атмосферного озона/V совещание по атмосферной оптике. - Томск, 1991.
6. Зуев В.Е., Креков Г.М. Оптические модели атмосферы. - Л.: Гидрометеоздат, 1986.
7. Хргиан А.Х. Физика атмосферы. - Л.: Гидрометеоздат, 1969.
8. The vertical distribution of stable gases at mid-latitudes/P. Fabian, R. Borchers, G. Flentje, W.A. Matthews. - J. Geophys. Res. - 1986. - N С6.
9. Витteman В. CO₂ - лазер. - М.: Мир, 1990.

Поступила в редакцию 8.06.99.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ТЕРРИТОРИИ В РАЙОНЕ АТОМНЫХ ЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ

К.М. Ефимов, Е.А. Ясько

Институт эколого-технологических проблем, г. Москва



Создание математических моделей распространения загрязнений под действием естественных процессов в почве затрудняется из-за сложности представления почвы как среды миграции вследствие существующей неоднородности ее физико-химических свойств и недостаточной изученностью механизмов. В работе построена сравнительно несложная математическая модель описания как процессов образования дождевого стока на водосборе, так и процесса переноса загрязняющих веществ сформированным стоком. Построенная модель удобна для практического применения. Проведены численные расчеты для бассейна р. Коваши (район Ленинградской АЭС).

Выбросы АЭС могут содержать радионуклиды глобального распространения: ^3H , ^{14}C , ^{89}Kr , ^{90}Sr , ^{129}I , ^{134}Cs , ^{238}Pu , ^{238}Am и др. Радионуклиды с периодами полураспада в несколько месяцев или десятков дней относятся к группе преимущественно регионального распространения. Эта группа нуклидов включает большинство радионуклидов ксенона и криптона: $^{132-136}\text{I}$, ^{89}Sr , $^{95}\text{Zr}+^{95}\text{Nb}$, ^{106}Ru , ^{110}Ag , ^{239}Np , а также группу активированных продуктов коррозии: ^{51}Cr , ^{54}Fe , ^{58}Co , ^{60}Co . К группе преимущественно местного рассеивания относится в основном ^{131}I .

В соответствии с действующими нормами нормируются выбросы четырех групп радионуклидов: радиоактивные благородные газы (РБГ), смеси долгоживущих нуклидов (ДЖН) с периодами полураспада, превышающими одни сутки (ДЖН, ^{131}I) и смеси ^{89}Sr и ^{90}Sr .

При возможных аварийных ситуациях чаще всего неизвестен количественный состав выброса и физико-химические свойства газоаэрозоля.

Осаждаясь на земную поверхность, радионуклиды начинают распространяться под действием естественных процессов, протекающих в природе. Процессы, влияющие на распределение радионуклидов в почве, разнообразны по своей природе и степени воздействия. К ним относятся: фильтрация атмосферных осадков и талых вод, капиллярный подток почвенной влаги к поверхности под действием градиента температур, движение воды по поверхности почвы, диффузия растворенных и адсорбированных ионов радионуклидов, перенос на мигрирующих коллоидных частицах по корневым системам и др. [1,2]. Основными процессами распространения радионуклидов являются конвективный перенос с фильтрующейся водой и диффузия в движущихся по почвенным порам струям.

Существующее в настоящее время множество экспериментальных данных о загрязнении почв предприятиями ядерного цикла (ЯЦ) трудно использовать для оценки радиационной ситуации и прогноза ее возможных изменений из-за несогласованности научных программ и неполноты сведений в пределах натуральных и экспериментальных исследований. Учитывая сложность радиоэкологических исследований, все большее внимание начинают уделять развитию математических методов прогнозирования влияния предприятий ЯЦ на внешнюю среду. Одним из наиболее перспективных методов является метод математического моделирования физических процессов, происходящих в биосфере. Создание математических моделей перемещения загрязнений под действием естественных процессов в почве затрудняется сложностью представления почвы как среды миграции вследствие существующей неоднородности ее физико-химических свойств и недостаточной изученностью механизмов миграции.

При составлении математической модели предполагается, что основными процессами, влияющими на перемещение радионуклидов в почвах, являются:

- перенос внутрпочвенным стоком;
- конвективная диффузия;
- равновесная сорбция с линейной изотермой.

Почва рассматривается как кусочно-однородная, изотермическая, недеформируемая среда, в которой отсутствуют тупиковые поры. Предполагается, что атмосферные осадки частично стекают по поверхности водосбора, частично просачиваются в глубь почвы и стекают по временным водоупорам. Будем рассматривать такую слоистую структуру почвы, при которой профиль временных водоупоров повторяет профиль поверхности водосбора. Выпадение осадков будем считать равномерным по всей территории, изменяющимся по времени. Предположим также, что при образовании внутрпочвенного стока мгновенно устанавливается равновесный массообмен между фильтрующейся водой и почвой. Тогда для описания процессов миграции радионуклидов в поверхностном слое почвы можно использовать уравнения:

- Навье-Стокса (для описания поверхностного стока);
- уравнение Дарси (для внутрпочвенного стока);
- уравнение конвективной диффузии (для массообмена).

Будем считать эти три процесса независимыми.

Принимая, что интенсивность испарения невелика по сравнению с интенсивностью инфильтрации и интенсивностью осадков, запишем уравнение Навье-Стокса в виде двумерной кинематической волны [3]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = R - 1,$$

$$q_x = Sh^{3/2} \frac{i_x}{\sqrt{i_x^2 + i_y^2}},$$

$$q_y = Sh^{3/2} \frac{i_y}{\sqrt{i_x^2 + i_y^2}},$$

где h - свободная поверхность воды, стекающей по водосбору; q_x , q_y - расходы поверхностного стока вдоль осей x , y соответственно; R - интенсивность осадков; I - интенсивность инфильтрации; S - коэффициент Шези; i_x , i_y - уклоны дневной поверхности водосбора вдоль осей x , y ; t - время.

Будем считать, что отфильтрованная вода движется в зоне по временному водоупору $z_0 = h_0(x, y)$, причем скорости течения не зависят от вертикальной координаты z , и инфильтрация через временной водоупор не существенна. Тогда уравнение Дарси запишется в следующем виде [4]:

$$\mu \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{\Theta}(h-h_0) \frac{\partial h}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{\Theta}(h-h_0) \frac{\partial h}{\partial y} \right] = I,$$

где μ - удельная водоотдача почвы; h - свободная поверхность внутрипочвенного потока; K_{Θ} - коэффициент гидравлической проводимости; h_0 - уравнение поверхности временного водоупора; I - интенсивность инфильтрации; t - время.

Гидравлическая проводимость определяется эмпирическим соотношением (формула Аверьянова-Будаковского):

$$K_{\Theta} = K_H \left(\frac{\Theta - \Theta_{\min}}{\Theta_{\max} - \Theta_{\min}} \right)^{3.5},$$

где Θ - влажность почвы; Θ_{\min} - влажность увядания; Θ_{\max} - влажность насыщенной почвы; K_H - коэффициент фильтрации; $n = 3.5$.

Связь между скоростями и напором определяется уравнениями фильтрации Дарси:

$$U = K_F \frac{\partial h}{\partial x},$$

$$V = -K_F \frac{\partial h}{\partial y},$$

где U, V - скорости внутрипочвенного стока вдоль осей x, y ; K_F - коэффициент фильтрации.

В данном случае предполагается, что параметры математической модели кусочно-постоянны, т.е. являются постоянными для каждого типа почв. Основой для математической модели распространения загрязнений служит уравнение массопереноса:

$$m(1+G) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_M + \lambda U) \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_M + \lambda V) \frac{\partial C}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial x} (CU) - \frac{\partial}{\partial y} (CV),$$

где m - коэффициент пористости; G - коэффициент Генри, обуславливающий сорбционные характеристики процесса; D_M - молекулярная диффузия мигрирующего иона; λ - параметр дисперсии, определяющий характер сложения почвы; U, V - скорости течения фильтрующейся жидкости в направлении осей x, y соответственно; C - концентрация загрязняющего вещества; t - время.

Система уравнений является комплексной математической моделью, описывающей как процесс образования дождевого стока на водосборе, так и процесс переноса сформированным стоком загрязняющих веществ.

Для решения этой системы уравнений необходимо задать начальные и граничные условия:

$$\text{при } t = 0 \quad h = 0, \quad C = C_H$$

$$h|_r = 0; \quad C|_r = C_{\Phi},$$

где C_H, C_{Φ} - начальная и фоновая концентрации загрязнений; r - граница водосбора.

Для численного решения уравнения конвективной диффузии использовался конечно-разностный метод. После решения дифференциального уравнения массообмена получим:

$$\begin{aligned}
 C_{i,j}^{n+1} = & C_{i,j}^n \left\{ 1 + \frac{\Delta t}{m(1+G)} \left[\frac{1}{\Delta x^2} (2U_{i,j}^n \Delta x - U_{i,j+1}^n \Delta x - D_K - D_{K+1} - \lambda_K U_{i,j+1}^n - \lambda_{K+1} U_{i,j}^n) + \right. \right. \\
 & + \frac{1}{\Delta y^2} (2V_{i,j}^n \Delta y - V_{i+1,j}^n \Delta y - D_K - D_{K+1} - \lambda_K V_{i+1,j}^n - \lambda_{K+1} V_{i,j}^n) \left. \right\} + \frac{\Delta t}{m(1+G)} \left[C_{i,j-1}^n \frac{D_K + \lambda_K U_{i,j}^n}{\Delta x^2} + \right. \\
 & + C_{i-1,j}^n \frac{D_K + \lambda_K V_{i,j}^n}{\Delta y^2} + C_{i,j+1}^n \frac{1}{\Delta x^2} (D_{K+1} + \lambda_K (U_{i,j+1}^n - U_{i,j}^n) + \lambda_{K+1} U_{i,j}^n - U_{i,j}^n \Delta x) + \\
 & \left. + C_{i+1,j}^n \frac{1}{\Delta y^2} (D_{K+1} + \lambda_K (V_{i+1,j}^n - V_{i,j}^n) + \lambda_{K+1} V_{i,j}^n - V_{i,j}^n \Delta y) \right].
 \end{aligned}$$

Эти алгоритмы были реализованы в программе, написанной на языке Турбо-Паскаль для персональной машины. Результаты расчета выдаются на экран в графическом виде (показаны на рис. 1).



Рис.1. Решение уравнения конвективной диффузии примеси от ЛАЭС

Список литературы

1. Нечаев А.Ф., Седов В.М. Ядерная энергетика: опыт прошлых лет и современная тенденция развития. / В кн.: Исследование по химии, технологии и применению радиоактивных веществ. - Л.: ЛТИ, 1983, с.3-21.
2. Павлоцкая Ф.И. Специфика поведения и форм нахождения искусственных радионуклидов в почвах. / В кн.: XI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. Неорганическая химия и технология неорганических веществ. Радиохимия и ядерная технология. - М.: Наука, 1975. - С.337-339.
3. Демидов В.Н., Кучмент Л.С. Применение двумерной модели формирования стока к задачам водохозяйственного проектирования. / В кн.: III Международный симпозиум по специфическим аспектам гидрологических расчетов для водохозяйственного проектирования. - М.: Гидрометеоиздат, 1979. - С.18-22.
4. Кучмент Л.С., Демидов В.Н., Мотовилов Ю.Г. Формирование речного стока. - М.: Наука, 1983. - 216с.

Поступила в редакцию 8.01.99.

УДК 551.510.42

ВЫМЫВАНИЕ АЭРОЗОЛЬНОЙ ФРАКЦИИ ИЗ ТРОПОСФЕРЫ АТМОСФЕРНЫМИ ОСАДКАМИ

М.М.Троянов

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск



Рассмотрен вопрос об удалении аэрозоля из атмосферы облаками. Выделены два различных механизма вымывания аэрозоля – за счет внутриоблачного обводнения аэрозоля и подоблачного взаимодействия с атмосферными осадками. Даны количественные оценки соотношения этих факторов в реальной атмосфере.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема загрязнения атмосферы аэрозолями промышленного и естественного происхождения носит во всем развитом мире чрезвычайно актуальный характер. Продукты промышленных выбросов поддаются в принципе контролю, а в некоторых случаях и регулированию. Тем не менее, важно рассмотреть роль естественных механизмов в очищении атмосферы от аэрозоля. Такими механизмами, в первую очередь, являются седиментация и вымывание аэрозоля атмосферными осадками. В то время как седиментация в тропосфере достаточно хорошо описывается стоковским оседанием аэрозольных частиц и вполне хорошо изучена, взаимодействие аэрозоля с атмосферной влагой протекает значительно сложнее. С другой стороны, следует напомнить, что возникновение пятен радионуклидных загрязнений после чернобыльской аварии на территории Брянской и Калужской областей связано с вымыванием прошедшими в то время дождями радиоактивных продуктов выброса. Таким образом, актуальность данного вопроса не вызывает сомнений.

МЕХАНИЗМЫ ВЫМЫВАНИЯ АЭРОЗОЛЯ ИЗ ТРОПОСФЕРЫ

По характеру взаимодействия частиц аэрозоля в тропосфере с атмосферной влагой аэрозоль может быть условно разделен на две фракции [1]. Аэрозольные частицы радиусом $r_a < 0,1 \mu\text{м}$ вымываются осадками из всей толщи подоблачной тропосферы, в основном, механизмами коагуляции. Теория такого процесса разработана в [1]. Для частиц с размерами $r_a > 0,1 \mu\text{м}$ более характерен другой процесс: водяной пар осаждается на этих частицах как на ядрах конденсации, причем конденсация происходит достаточно интенсивно. Часть таких обводненных частиц затем выпадает из атмосферы с осадками. Как показано в [2], именно на эти частицы приходится основная масса (около 90%) содержащегося в тропосфере аэрозоля, поэтому при рассмотрении процессов вымывания аэрозоля из тропосферы основное значение имеет последний механизм.

При описании процесса вымывания аэрозоля примем в качестве модельного предположения, что обводнение аэрозоля идет в два этапа. Сначала на каждой частице

с $r_a > 0,1 \mu\text{м}$ конденсируется одна облачная капля, затем эти капли могут коагулировать или укрупняться за счет конденсационного роста.

Для описания спектра размеров капель в развитых облаках воспользуемся аппроксимационной формулой [3]:

$$\varphi(r) = ar^{-6} \exp(-b/r), \quad (1)$$

где r – радиус облачной капли.

При нормировании спектра капель на единицу (т.е. $\int_0^{\infty} \varphi(r) dr = 1$) $a = b^5/\Gamma(5)$, где

Γ – гамма-функция, $\Gamma(5) = 24$; $b = 6r_m$, где r_m – модальный радиус, находящийся в пределах 3 – 10 мкм [3]. Следует заметить, что в асимптотике (1) переходит в распределение $\varphi(r) \sim r^{-6}$ для крупных капель, которое согласуется со статистической моделью [4].

При выяснении крупномасштабных (синоптических и климатических) эффектов вымывания аэрозоля из тропосферы необходимо описать связь процессов малого пространственно-временного масштаба (вымывание осадками из отдельного облака) со средней по широтному кругу климатической интенсивностью осадков, которая может быть получена с сезонным разрешением при помощи климатической модели [5,6]. В качестве первого приближения для оценки эффектов вымывания предположим пропорциональную зависимость осадков от совокупности отдельных облаков с климатической интенсивностью осадков I на данной широте и в данный сезон.

Учитывая, что облачная атмосфера достаточно сильно перемешивается, можно принять, что после удаления с осадками обводненных частиц нормированный на массу спектр аэрозольных частиц в интервале размеров 0,1 – 1 мкм не изменяется, а падает лишь концентрация частиц аэрозоля. Иначе говоря, в объеме облачной атмосферы, очистившейся от аэрозольных частиц после выпадения осадков, вследствие турбулентного перемешивания поступают аэрозольные частицы из окружающего воздуха с тем же спектром. В этом случае изменение концентрации аэрозоля вследствие выпадения ядер конденсации с осадками будет описываться следующим уравнением:

$$\frac{dN}{dt} = - \frac{kIh}{4/3\pi\rho \int_0^{\infty} r^3 \varphi(r) dr}, \quad (2)$$

где N – количество крупных аэрозольных частиц с $r_a > 0,1 \mu\text{м}$ в вертикальном столбе облачной атмосферы с единичным основанием; h – высота этого столба; ρ – плотность воды; k – постоянная величина, которая устанавливается эмпирически.

С учетом (1), формула (2) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{dN}{dt} = - \frac{kI\Gamma(5)h}{4/3\pi\rho b^3} \approx \frac{kIh}{37.7\rho_m^3}. \quad (3)$$

Из (3) следует, что скорость вымывания крупных аэрозольных частиц из тропосферы пропорциональна интенсивности осадков и не связана непосредственно с концентрацией примесей. Это не противоречит данным [2], что скорость удаления примеси из атмосферы пропорциональна концентрации примеси, вследствие того, что в [2] исследуется процесс чисто динамического вымывания аэрозоля из подоблачного слоя атмосферы, в то время как здесь рассматривается дополнительный механизм удаления аэрозоля из тропосферы осадками, сформированными из облачных капель с включенными в них аэрозольными частицами.

Чтобы оценить эффект вымывания подоблачного аэрозоля каплями осадков, примем во внимание, что функция распределения капель осадков по размерам подчиняется за-

кону Маршалла – Пальмера, т.е.

$$F(R) = N_0 e^{-\lambda R}, \quad (4)$$

где R – радиус капель осадков; $N_0 = 0,08 \text{ см}^{-4}$; $\lambda = 82 \cdot I^{-0,21} \text{ см}^{-1}$ (здесь I измеряется в мм/ч).

Скорость удаления подоблачного слоя из-за соударений определяется выражением [7]:

$$\frac{df(r_a)}{dt} = -f(r_a) \int_0^{\infty} \pi R^2 V_s(R) E(R, r_a) F(R) dR, \quad (5)$$

где $f(r_a)$ – функция распределения по радиусам подоблачного аэрозоля, нормированная на концентрацию частиц аэрозоля, V_s – скорость падения капель радиуса R , E – коэффициент захвата [1].

Как показано в [8], зависимость скорости падения капель от радиуса может быть вполне удовлетворительно описана простым аналитическим выражением

$$V_s(R) = V_{\infty} [1 - \exp(-aR)], \quad (6)$$

где $V_{\infty} = 995 \text{ см/с}$; $a = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ мкм}^{-1}$.

Вопрос о зависимости коэффициента захвата от радиусов водяных капель и вымываемого аэрозоля чрезвычайно сложен и в настоящее время не решен. В качестве приближения для достаточно грубой оценки скорости вымывания аэрозоля из подоблачного слоя можно положить коэффициент захвата E в (5) постоянной величиной \bar{E} . Воспользовавшись результатами [9], где установлены значения коэффициентов захвата дождевыми каплями аэрозольных частиц для широкого диапазона размеров, находим $\bar{E} \sim 10^{-3}$.

С учетом (6), решение уравнения (5) можно представить в виде:

$$f = f_0 \exp \left\{ -2\pi \bar{E} V_{\infty} N_0 \left[\frac{1}{\lambda^3} - \frac{1}{(\lambda + a)^3} \right] \right\} t \equiv f_0 e^{\sigma t}, \quad (7)$$

где коэффициент σ зависит от коэффициента захвата и через величину λ в (4) от интенсивности осадков I .

Подставив в (7) характерные значения этих величин, можно оценить величину коэффициента вымывания σ ($\sigma \sim 10^{-5} - 10^{-4} \text{ с}^{-1}$), причем его значение увеличивается с возрастанием интенсивности осадков I . Такая оценка σ находится в хорошем согласии с экспериментальными данными, представленными в [2].

При помощи соотношений (3) и (7) представляется возможным сопоставить скорости уменьшения концентрации аэрозоля за счет вымывания в облаках и подоблачного вымывания осадками. Соотношения (3) и (7) позволяют формально представить скорость уменьшения концентрации аэрозоля вследствие двух различных механизмов в одинаковой форме: $dN/dt = -\sigma N$ для подоблачного вымывания и $dN/dt = -\sigma_1 N$, где

$$\sigma_1 \equiv \frac{kIh}{37,7 \rho_r^3 N}, \text{ для внутриоблачного удаления аэрозоля.}$$

ВЫВОДЫ

Оценки характерных значений σ и σ_1 для различных величин интенсивности осадков, а также в достаточно широком диапазоне изменений коэффициента захвата \bar{E} приводят к весьма нетривиальному и даже неожиданному результату. Оказалось, что при

реальных значениях концентраций атмосферного аэрозоля скорость уменьшения концентрации аэрозоля путем внутриоблачного очищения на несколько порядков превышает скорость подоблачного вымывания аэрозоля осадками, что позволяет в рамках данного подхода пренебречь последним эффектом. Разумеется, сделанные оценки основаны в данной работе на пространственно-временных осреднениях довольно крупного масштаба, и поэтому не вполне корректны для случаев очищения атмосферы от аэрозоля в локальном районе непосредственно после ливневого грозового дождя. В целом же полученные результаты могут быть полезны при решении различных исследовательских и прикладных задач в области физической экологии, метеорологии и климатологии.

Список литературы

1. *Волощук В.М., Седунов Ю.С.* Процессы коагуляции в аэродисперсных системах. – Л.: Гидрометеоздат, 1975.
2. *Петренчук О.П.* Экспериментальные исследования атмосферного аэрозоля. – Л.: Гидрометеоздат, 1979.
3. *Смирнов В.И.* Микроструктура облаков и осадков // Итоги науки и техники. Сер. Метеорология и климатология. – 1987. - Т. 15.
4. *Боровиков А.М., Мазин И.П.* Микроструктура капельных облаков. – Л.: Гидрометеоздат, 1970.
5. *Кабанов А.С., Троянов М.М.* Климатическая модель влияния изменений термического режима на интенсивность осадков. // Метеорология и гидрология. – 1987. - №5.
6. *Кабанов А.С., Троянов М.М.* О роли облачности в формировании широтно- сезонного хода дисперсии приземной температуры / Труды ИЭМ. - 1987. - Вып. 43(128).
7. *Ивлев Л.С.* Химический состав и структура атмосферных аэрозолей. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1982.
8. *Матвеев Л.Т.* Динамика облаков. – Л.: Гидрометеоздат, 1981.
9. *Slinn W.G.H.* Some approximation for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere // Water, Air and Soil Pollution. – 1977. - V.7. - №4.

Поступила в редакцию 9.06.99.

УДК 541.64:541.183

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОДУКТОВ ЩЕЛОЧНОГО ГИДРОЛИЗА ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА

Т.Е. Ларичева, А.А. Мачула, В.К. Милинчук

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск

Р

Изучено влияние этиленгликоля (ЭГ) и терефталат-ионов (ТФИ), образующихся при щелочном гидролизе пленок полиэтилентерефталата (ПЭТФ), на процесс формирования трековых мембран. Установлено, что ТФИ не влияют на скорость химического травления полимера и латентных треков (ЛТ). В то же время кинетика химического травления полимера и ЛТ существенно зависит от концентрации ЭГ в травильном растворе. При накоплении ЭГ в травильном растворе селективность процесса уменьшается, меняются технические характеристики трековых мембран.

Полимерные трековые мембраны применяются для тонкой очистки и разделения веществ. Метод получения трековых мембран основан на химическом травлении облученных ускоренными тяжелыми ионами или осколками деления урана тонких полимерных пленок [1]. Образование сквозного отверстия при щелочном травлении облученных пленок связывают с повышенной скоростью травления материала латентного трека по сравнению со скоростью травления исходного полимера. Более высокую скорость химического травления латентного трека объясняют образованием при облучении полимера новых веществ с повышенной реакционной способностью и микрогетерогенным характером структуры латентного трека [2-6]. Вместе с этим, далеко не полностью исследованы не только химические процессы в латентных треках, но и процесс химического травления исходной полимерной матрицы.

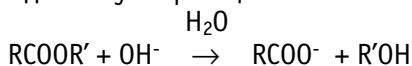
Целью настоящей работы является изучение влияния продуктов, образующихся в процессе щелочного гидролиза ПЭТФ, на кинетику процесса формирования трековых мембран.

Для исследований кинетики химического травления нами был выбран ПЭТФ, пленки которого нашли наиболее широкое применение в качестве исходного материала для производства трековых мембран.

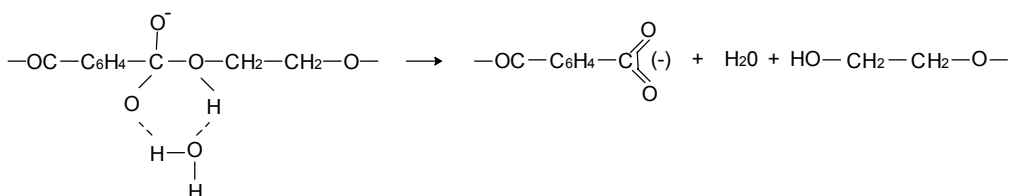
Двуосноориентированная пленка ПЭТФ толщиной 10 мкм, плотностью $1,4 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ (ГОСТ 24234 - 80), среднечисленная молекулярная масса полимера равна 20 000 облучалась в вакууме при 300 К на циклотроне У-300 лаборатории ядерных реакций ОИЯИ (г. Дубна) ионами ксенона с энергией 1 МэВ / нуклон, флюенс ионов $2\cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$. Методика химического травления приведена в статье [6]. Коэффициент экстинкции терефталат-

ионов (ТФИ) в водно-гликолевых травильных растворах принимали равным коэффициенту экстинкции ТФИ в водных растворах, поскольку было доказано, что они отличаются незначительно. Результаты, полученные спектрофотометрическим методом, совпадают с результатами, полученными гравиметрическим методом.

Известно, что гидролиз сложных эфиров является процессом, катализируемым кислотами и щелочами. В последнем случае реакция описывается общим уравнением:



В водных щелочных растворах скорость химического травления прямо пропорциональна произведению активностей гидроксогрупп и воды, поскольку механизм гидролиза эфирной связи включает быстрое обратимое присоединение иона гидроксила по карбонильной группе с последующей медленной атакой аддукта молекулой воды [7]. В случае ПЭТФ гидролиз в водных щелочных растворах протекает по следующей схеме:



Реакция протекает на поверхности раздела фаз практически в мономолекулярном слое. Конечными продуктами щелочного водного гидролиза являются соль терефталевой кислоты ТФК и этиленгликоль ЭГ [7].

На рис.1 приведена типичная кинетическая кривая А накопления ТФИ в травильном растворе для исходных пленок ПЭТФ. Время, необходимое для установления стационарной скорости накопления ТФИ (линейный участок кинетической кривой), уменьшается с увеличением температуры и концентрации щелочи, и, как правило, не превышает 20-30 мин для выбранного диапазона изменения параметров. Скорость травления (W , моль ТФИ $\text{г}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$) рассчитывали по методу наименьших квадратов (МНК), используя данные линейных участков кинетических кривых. Обработка этих данных по МНК показала, что зависимость скорости реакции от активностей OH^- групп (a_{OH^-}) и воды (a_w), действительно, описывается уравнением $W=k \cdot (a_{\text{OH}^-} \cdot a_w)^n$, где k - эффективная константа скорости реакции, n -порядок реакции. Порядок реакции щелочного гидролиза ПЭТФ по щелочи составил $1,0 \pm 0,1$; энергия активации процесса составила 78 ± 2 кДж·моль $^{-1}$, что хорошо совпадает с литературными данными [7].

Для того, чтобы понять, как влияют на кинетику химического травления ТФИ, нами был проведен ряд экспериментов. На рис.2 приведена процентная потеря массы облученных пленок ПЭТФ в зависимости от концентрации гидроксогрупп в травильном растворе. Концентрацию гидроксогрупп рассчитывали как разницу между исходной концентрацией щелочного раствора и удвоенным произведением концентрации ТФИ, образующихся в реакции нейтрализации терефталевой кислоты (ТФК) щелочью, в соответствии со стехиометрией реакции. Буквой А обозначена процентная потеря массы образцов при уменьшении концентрации ТФИ с 1 до 0 моль·л $^{-1}$, вводимых в травильный раствор. Буквой Б обозначена процентная потеря массы образцов пленки в растворе, не содержащем искусственно вводимых ТФИ, но содержащем гидроксид-ионы в концентрации от 1 до 3 моль·л $^{-1}$. Оценку потери массы проводили гравиметрическим методом. Из рисунка видно, что точки А и точки В ложатся на одну линию. Это свидетельствует о том, что ТФИ, образующиеся в процессе щелочного травления пленки ПЭТФ, не оказывают заметного влияния на процесс щелочного травления.

Если в качестве растворителя использовать не водные, а спиртовые растворы щелочей, то при травлении будет протекать не реакция омыления сложных эфиров, а их алкоголиз. Так, например, известно, что этиленгликоль (ЭГ) используется при алкоголизе ПЭТФ. В результате реакции, протекающей при температуре кипения ЭГ, образуется дигликолевый эфир терефталевой кислоты или низкомолекулярный полиэфир с концевыми гликолевыми группами [8]:

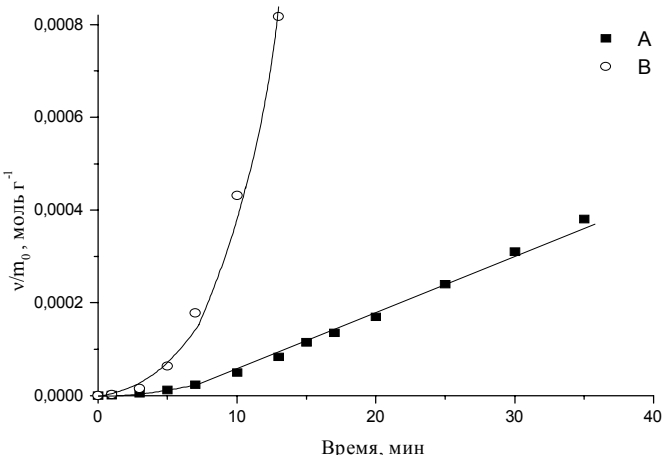
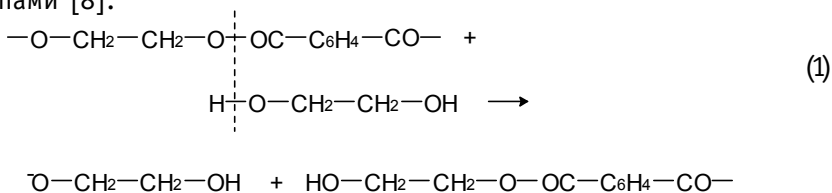
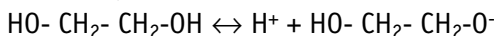


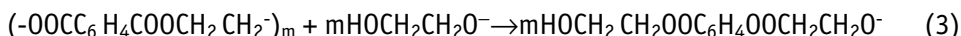
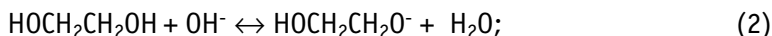
Рис.1. Кинетика накопления терефталат - ионов в 4 М растворе КОН при T=333 К: А- необлученная пленка ПЭТФ; В - облученная пленка ПЭТФ



Активными промежуточными частицами процесса алкоголиза являются алколят-ионы, образующиеся при диссоциации ЭГ:



или в результате взаимодействия ЭГ с гидроксид-ионами:



Поскольку ЭГ сам образуется и накапливается в растворе в ходе реакции щелочного гидролиза ПЭТФ, то представляет интерес изучить кинетику процесса щелочного травления как облученных, так и необлученных пленок ПЭТФ в водно-гликолевых растворах щелочей.

Для доказательства участия ЭГ в процессе травления нами была исследована зависимость скорости деструкции ПЭТФ от концентрации ЭГ в травильном растворе. Концентрация ЭГ варьировалась в пределах от 0 до 8,1 моль·л⁻¹. Реакция проводилась в турбулентном режиме.

На рис.3 приведена кривая А, характеризующая зависимость скорости, рассчитанной на единицу площади поверхности (нормализованной скорости W_s , (моль ТФИЧ см⁻²·мин⁻¹)) травления исходных образцов пленки ПЭТФ от объемной доли ЭГ в травильном растворе. Видно, что скорость существенным образом зависит от концентрации ЭГ, пропорциональной его объемной доле в растворе. При малых концентрациях скорость реакции линейно растет с ростом концентрации ЭГ, затем рост скорости замедляется. При концентрации ЭГ выше 7 моль·л⁻¹ скорость травления практически не меняется и составляет $2 \cdot 10^4$ моль·см⁻²·мин⁻¹. Энергия активации процесса в этой области составляет 91 ± 2 кДж·моль⁻¹. Природу предела роста скорости травления при увеличении концентрации ЭГ можно понять, если учесть, что расщепление макромолекул ПЭТФ происходит не под непосредственным действием ЭГ, а в результате действия гликолят-

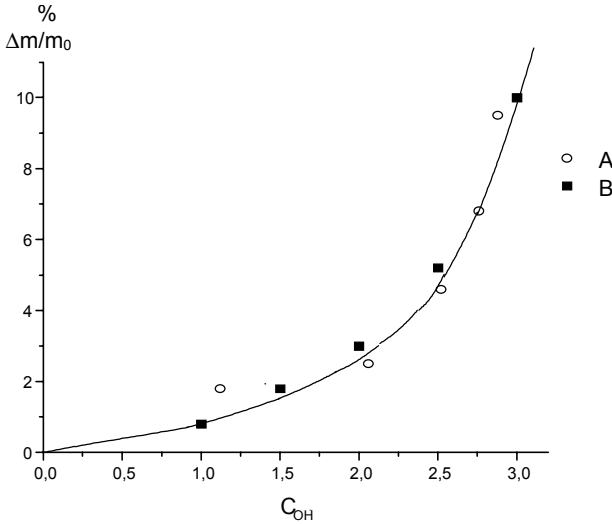


Рис.2. Процентная потеря массы пленки ПЭТФ, облученной тяжелыми ионами ксенона в зависимости от концентрации гидроксигрупп в травильном растворе: А - процентная потеря массы образцов при уменьшении концентрации ТФИ с 1 до 0 М; В - процентная потеря массы образцов в растворе, содержащем гидроксид-ионы в концентрациях от 1 до 3 М, $t_{тр} = 10$ мин., $T_{тр} = 333$ К

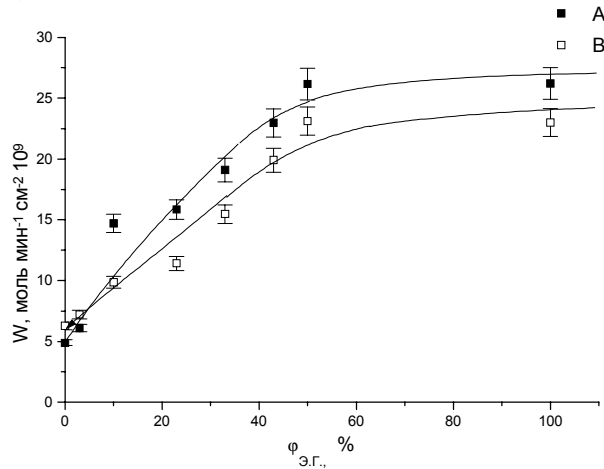


Рис.3. Зависимость нормализованной скорости травления необлученной (А) и облученной (В) пленок ПЭТФ от объемной доли ЭГ в растворе 3 М КОН, $t_{тр} = 5$ мин., $T_{тр} = 333$ К

ионов, о чем говорилось выше. При увеличении концентрации ЭГ равновесие (2) сдвигается вправо, однако предел роста равновесной концентрации гликолят-ионов будет определяться концентрацией OH^- - групп. Очевидно, что при исходной концентрации щелочи 3 моль·л⁻¹ и $T=313$ К практически все OH^- -группы расходуется (равновесная концентрация OH^- -групп близка к нулю) в реакции (2) при концентрации ЭГ больше 7 моль·л⁻¹. Дальнейшее увеличение концентрации ЭГ не будет приводить к росту концентрации гликолят-ионов и, следовательно, росту скорости травления. Далее, мы исследовали влияние ЭГ на кинетику щелочного травления облученных тяжелыми ионами ксенона пленок ПЭТФ. В случае облученных пленок, в ходе реакции площадь реагирующей поверхности изменяется постоянно, и прямолинейного характера кинетических кривых не наблюдается (рис. 1В). Поэтому сравнивать скорости реакций щелочного травления облученной и необлученной пленок можно в том случае, если проводить расчет скорости не на единицу массы, а на единицу площади поверхности образца.

Превращение латентного трека (ЛТ) в пустотелый канал происходит при условии $V_T > V_M$, где V_T - скорость образования

сквозного канала на месте ЛТ, м·с⁻¹, V_M - скорость травления полимерной матрицы, м·с⁻¹. При наличии сквозного ЛТ травление осуществляется с двух сторон пленки. В результате на первой стадии травления образуется пора в форме двух совмещенных конусов. Это реализуется при условии изотропности полимерной пленки, постоянства V_T и при угле входа ионов, равном 90°. После того, как вершины обоих конусов встречаются, происходит прорыв перешейка между конусами и начинается период быстрого увеличения диаметра трека до образования пустотелого цилиндра [5, 9]. Если пренебречь изменением формы ЛТ в процессе травления и принять, что сразу после начала травления канал, образующийся на месте ЛТ, имеет цилиндрическую форму, то кинетические кривые можно линеаризовать в координатах

натах $n/m_0 \cdot t^2$, где n/m_0 - количество ТФИ, перешедших в раствор с единицы массы образца пленки; t - время травления [10]. По тангенсу (a) угла наклона этих прямых рассчитывается нормализованная скорость травления W_s :

$$v/m_0 = a \cdot t^2;$$

$$W_s = (a \cdot \rho^2 / M \cdot \pi \cdot \Phi_0)^{0.5} = 4,03 \cdot 10^{-6} a^{0.5},$$

где ρ - плотность ПЭТФ; M - молярная масса одного звена, равная $192 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$; Φ_0 - флюенс ионов ксенона.

На рис. 3В дана зависимости W_s облученной пленки от объемной доли ЭГ в растворе что так же, как и в случае необлученной пленки, добавление ЭГ в травильную ванну оказывает существенное влияние на кинетику травления облученной пленки, повышая скорость ее травления. Однако, если без добавок ЭГ нормализованная скорость щелочного травления внутри ЛТ выше, чем на поверхности матрицы, то при концентрации ЭГ более $1,2 \text{ М}$ нормализованная скорость травления облученной пленки становится меньше нормализованной скорости травления необлученных образцов. Таким образом, увеличение концентрации ЭГ в травильной ванне приводит к увеличению W_s как для необлученных, так и для облученных образцов пленки ПЭТФ, но в разной степени. Так, скорость травления облученной пленки увеличивается максимально в 3-4 раза, а необлученной - в 6 раз. Такое уменьшение селективности травления ЛТ может быть обусловлено внутренними диффузионными затруднениями в поступлении ЭГ.

ВЫВОДЫ

- Исследовано влияние ЭГ на процесс травления исходных и облученных тяжелыми ионами ксенона пленок ПЭТФ.
- Скорость щелочного травления ПЭТФ в водно-гликолевых растворах выше скорости травления в водных растворах за счет протекания реакции алкоголиза полиэфира.
- При повышении концентрации ЭГ селективность травления ЛТ уменьшается за счет перехода реакции во внутридиффузионный режим по ЭГ. При концентрации ЭГ более $1,2 \text{ М}$ поверхностная скорость травления в ЛТ меньше поверхностной скорости травления полимерной матрицы.
- Накопление ЭГ в травильной ванне в процессе производства трековых мембран может приводить к изменению их технических параметров.

Список литературы

1. Флеров Г. // Вест. АН СССР. - 1984. - №4. - С.35.
2. Fleischer R.L., Price P.B. and Walker R.M. Nuclear Tracks in Solids: Principles and Applications. University of California Press. Berkeley. - 1975. - P.22.
3. Маренный А.Н. Диэлектрические трековые детекторы в радиационно-физическом и радиационно-биологическом эксперименте. - М.: Энергоатомиздат, 1987. - 184 с.
4. Enge W. // Radiat. Meas. - 1995. - V. 25. - №1-4. - P. 11.
5. Apel P. // Nucl. Tracks Radiat. Meas. - 1986. - V. 11. - №1/2. - P. 45.
6. Соколова Ю.Д., Мачула А.А., Милинчук В.К., Жданов Г.С. // Коллоид. журн. - 1997. - Т.59. - №3. - С.395.
7. Рудакова Т.Е., Мусеев Г.В., Чалых А.Е., Заиков Г.Б. // Высокомолек. соед. - 1972. - Т. А14. - №2. - С.449.
8. Стрелихеев А.А., Деревницкая В.А. Основы химии высокомолекулярных соединений. - М.: ГНТИ химической литературы, 1961. - 267 с.
9. Apel P, Didyk A, Kravets L, Kurnetsov V. // Nucl. Tracks Radiat. Meas. - 1990. - V. 17. - №3. - P. 191-193.
10. Рудакова Т.Е., Кулева С.С., Самойлова Л.И. // Высокомолек. соед. - 1980. - Т. 22А. - №2. - С.443-448.

Поступила в редакцию 12.03.99.

УДК 539.172.8

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НАЧАЛЬНЫХ И КОНЕЧНЫХ СОСТОЯНИЙ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ В МЕТОДЕ КЛАССИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ МОНТЕ-КАРЛО*

А.Э. Яновский

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск



В работе представлены результаты расчета фазовых распределений продуктов реакций, моделируемых в рамках трех- и четырехчастичных моделей метода классических траекторий.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в связи с разработкой современных лазеров с ядерной накачкой возобновился интерес к изучению ядерно-возбуждаемой плазмы - особого состояния среды, которое образуется при прохождении многозарядных ионов через вещество. Для практических приложений детальное описание подобных процессов связано с задачей определения сечений ионизации и перезарядки осколками деления атомов инертных газов (Ne, Ar), используемых в качестве активных сред. Расчет данных сечений представляет собой достаточно сложную задачу. Одним из подходов, позволяющим получать достаточно точную оценку интегральных и дифференциальных сечений является метод классических траекторий Монте-Карло (МКТ) [1,2].

Несмотря на успешное применение данного метода и хорошее согласие между расчетными и экспериментальными данными, остается открытым вопрос о последовательном теоретическом описании заданного связанного квантового состояния в рамках классической механики. Как известно, традиционно используемая модель микроканонического ансамбля [1] неадекватно описывает плотность электронного облака моделируемого атома (иона) и имеет усеченный вид. Это обстоятельство имеет особое значение при модельном описании многоэлектронных атомов водородоподобными системами. Одновременно интерпретация конечных состояний системы, в частности, случаев перезарядки, непосредственно связана с используемой моделью описания (траекторки) связанного состояния.

В настоящей работе был произведен расчет фазовых распределений конечных состояний для 3- 4- частичных моделей МКТ, используемых для моделирования ион-атомных и атом-атомных столкновений. Полученные результаты сопоставлялись с квантово-механическими распределениями для аналогичных систем и известны-

© А.Э. Яновский, 1999

* Доклад с Международного конгресса "Энергетика-3000"
(Обнинск, 12-16 октября 1998 г.)

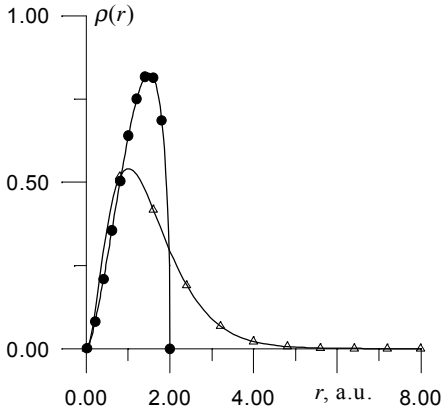


Рис.1. Радиальное распределение электрона в атоме: • - модель микроканонического ансамбля; Δ - квантово-механическая плотность для 1s-состояния

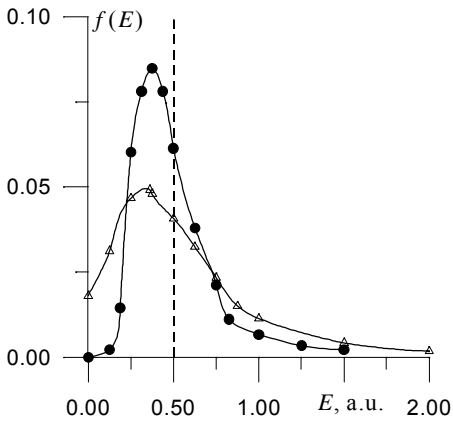


Рис.2. Энергетическое распределение электрона: • - метод классических фазовых распределений; Δ - метод Вигнера, - - - модель микроканонического ансамбля

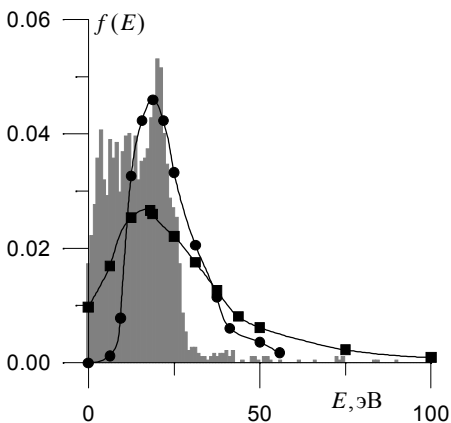


Рис. 3. Энергетическое распределение электрона в образовавшемся атоме, • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

ми модельными распределениями для задания начального связанного состояния в рамках классической механики [3,4].

ТЕОРИЯ

Метод классических траекторий основан на имеющей место аналогии между квантовыми и классическими системами многих частиц с кулоновским взаимодействием. Основное его предположение состоит в том, что динамика квантовомеханической системы описывается классическими уравнениями движения. Стандартным условием применимости такого представления является малость де-Бройлевской длины волны частиц по сравнению с характерными размерами системы:

$$\lambda_i = \frac{\hbar}{p_i} \ll a_0,$$

где p_i - импульс i -ой частицы, a_0 - характерный размер системы.

Описание процесса столкновения в МКТ можно разделить на три этапа: задание начального состояния, временная эволюция и конечное состояние. Для задания начального состояния моделируемой связанной системы традиционно используется модель микроканонического ансамбля, которая заключается в задании всех возможных классических конфигураций системы с заданной энергией связи U . Плотность распределения по координатам и импульсам в этой модели определяется соотношением:

$$\rho(r, p, t = 0) = k\delta(E - H), \quad (1)$$

где E и H - энергия и Гамильтониан системы соответственно, k - нормировочная константа. Как уже было отмечено, основным недостатком данной модели является плохое воспроизведение пространственных характеристик моделируемой квантовой системы (рис. 1). Предлагаемые иные модели задания начального связанного состояния [3-4] основаны на идее построения такой функции распределения электрона по энергии, чтобы вычисляемые с ее помощью плотности распределения по координатам и импульсам были близки к квантовомеханическим для моделируемого состояния:

$$\int f(E)p^2 dp \cong \rho_n(r),$$

$$\int f(E)r^2 dr \cong \rho_n(p). \quad (2)$$

Наиболее известные модели - это модель классических фазовых распределений [3] и модель, основанная на использовании функции Вигнера [4]. Функции распределения $f(E)$ для указанных моделей представлены на рис. 2. Следует отметить, что в рассматриваемых моделях система уравнений (2) не удовлетворяется точно.

Сохраняя общий формализм метода классических фазовых распределений и основываясь на так называемом классическом представлении для уравнения Шредингера [5], можно построить еще одну модель задания начального состояния атомной мишени в классическом представлении. Преимуществом данного подхода является возможность использования его результатов для интерпретации конечных состояний системы, образующихся при расчетах методом классических траекторий.

Поясним суть упомянутого классического представления для уравнения Шредингера на примере одночастичной одномерной задачи, обобщая результаты, где это возможно, на трехмерный случай движения электрона в поле ядра.

Задача состоит в том, чтобы представить некоторое квантовое состояние $|\psi_n\rangle$ как суперпозицию классических состояний в потенциале $V(x)$ распределенных по энергии E с некоторой плотностью вероятности $f_n(E)$. Вероятность обнаружить классическую частицу с энергией E в интервале dx пропорциональна времени, которое она в нем находится, откуда плотность вероятности:

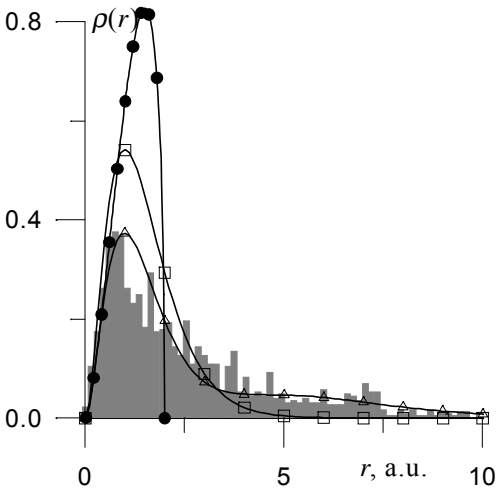


Рис. 5. Радиальное распределение электрона в образовавшемся атоме: • - микроканоническое распределение; □ - квантово-механическое распределение для 1s-состояния; Δ - суперпозиция квантово-механических распределений для 1s и 2s состояния (см. текст)

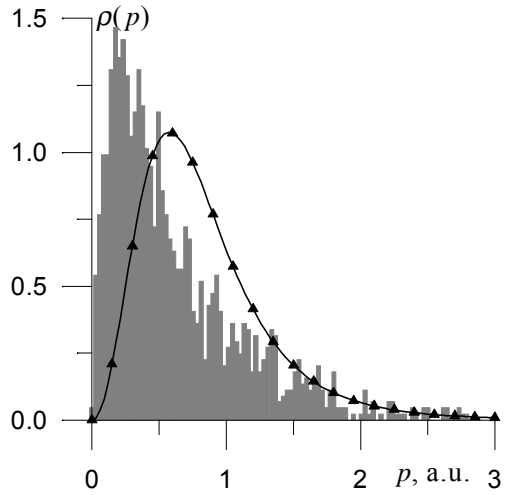


Рис. 4. Импульсное распределение электрона в образовавшемся атоме: Δ - квантово-механическое распределение

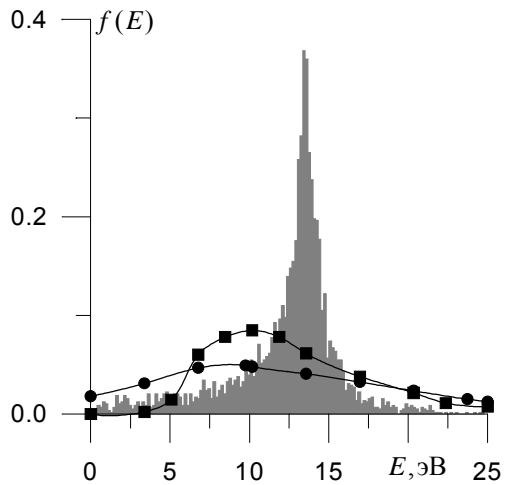


Рис. 6. Энергетическое распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: • - метод классических фазовых распределений; Δ - метод Вигнера.

$$W(E, x) = \frac{2}{T(E)} \frac{dt}{dx} = \frac{2}{T(E)} \left[\frac{2}{m} (E - V(x)) \right]^{-1/2},$$

где

$$T(E) = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{2}{m} (E - V(x))}$$

- период колебаний, а x_1 и x_2 - классические точки поворота. Плотность вероятности в точке x для всего ансамбля получается усреднением $W(E, x)$ по распределению $f_n(E)$ в классически разрешенной области энергий $E \geq V(x)$:

$$\rho(x) = \int dE W(E, x) f_n(E) = \int dE \frac{\phi_n(E)}{\sqrt{E - V(x)}}, \tag{3}$$

где

$$\phi_n(E) = \sqrt{2m} \frac{f_n(E)}{T(E)},$$

а $\rho_n(x)$ определяется как квадрат волновой функции соответствующего квантового состояния. Аналогично для плоской кеплеровой задачи запишем:

$$W(E, r) = \frac{2}{T(E)} \frac{dt}{dr} = \frac{2}{T(E)} \left[\frac{2}{m} \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{-1/2}$$

$$\rho_n(r) = \int dE \frac{\phi_n(E)}{\sqrt{E - V_l(r)}}.$$

Здесь $V_l(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{L^2}{2mr^2}$ - обозначен «эффективный потенциал», где L - орбитальный момент.

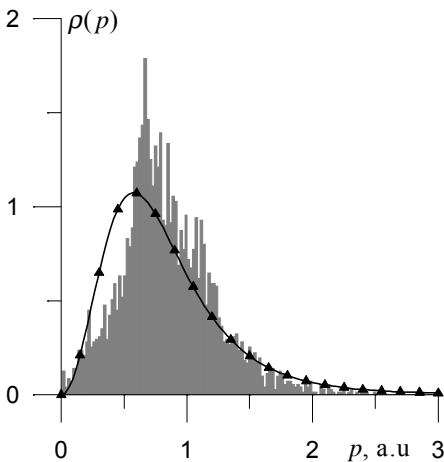


Рис. 7. Радиальное распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: Δ - квантово-механическое распределение

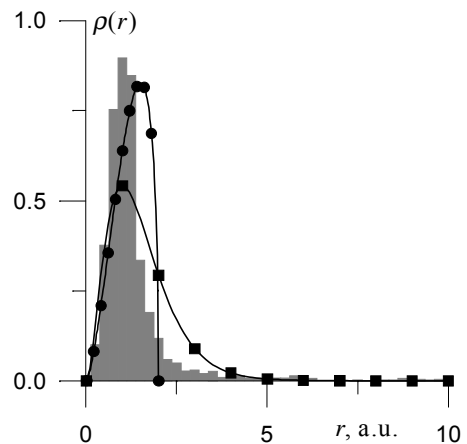


Рис. 8. Радиальное распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: \bullet - микроканоническое распределение; \blacksquare - квантово-механическое распределение

Далее, если рассматривать вместо x в качестве независимой переменной потенциал V , который однозначно связан с x на полуоси $x > 0$, можно, используя преобразование Абеля для интегрального уравнения (3), получить:

$$\phi_n(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dE} \left(\int dV \frac{\rho(x(V))}{\sqrt{V-E}} \right) \quad (4.a)$$

или [5]:

$$\phi_n(E) = \frac{1}{\pi} \int \frac{dV}{\sqrt{V-E}} \frac{d\rho_n}{dV}. \quad (4.6)$$

Во всех вышеприведенных интегралах пределы интегрирования определяются областью классически разрешенного движения $E > V(x)$.

К сожалению, столь же простые аналитические выражения для случая кеплеровской задачи получить нельзя. Тем не менее, из выражений (4.a) и (4.6) ясно видна связь между квантовомеханическим состоянием с плотностью

$\rho_n(r) = |\Psi_n(r)|^2$ и функцией распределения $f_n(E)$ для ансамбля классических орбит,

которым моделируется состояние Ψ_n . Кроме того, как было указано выше, появляется возможность интерпретации распределений конечного состояния, получаемого в расчетах, как суперпозиции отдельных квантовых состояний, моделируемых ансамблем классических орбит.

Рассматривая конечное распределение по энергии электрона в связанной системе $F_e^C(E)$, получаемое в результате численного эксперимента, как суперпозицию классических ансамблей, каждый из которых соответствует определенному квантовому состоянию, задаваемому соотношением (4):

$$F_e^C(E) = \sum_i C_i \phi_i(E), \quad (5)$$

можно определить «вероятности» с которыми в конечном состоянии образуются те или иные квантовомеханические состояния связанной системы. Используя свойство ортогональности распределения (4) [5], вычислим весовые коэффициенты C_i :

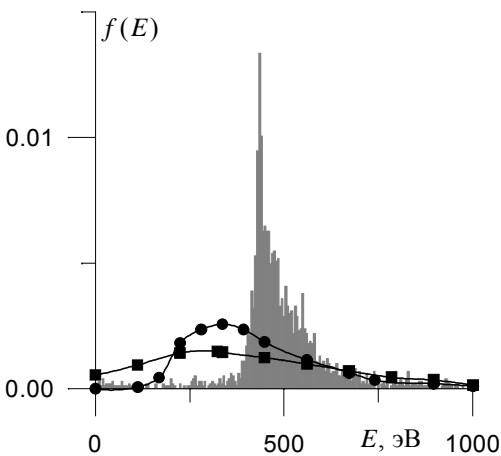


Рис. 9. Энергетическое распределение электрона налетающего иона в реакции захвата электрона мишени: • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

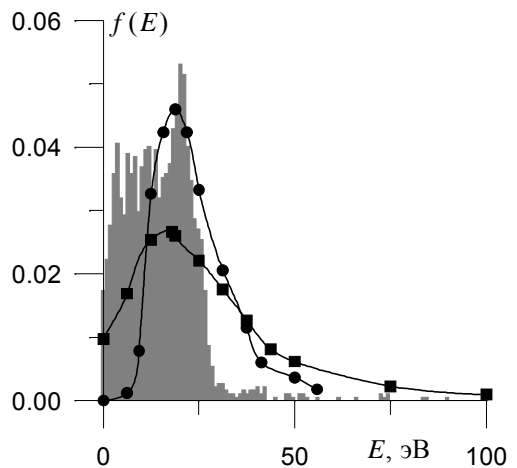


Рис. 10. Энергетическое распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

$$C_i = \int F_e^C(E) \phi_i^*(E) dE, \quad (6)$$

где $\phi_i^*(E)$ - образ $\phi_i(E)$ в сопряженном функциональном пространстве.

Описанный подход позволяет как задавать начальное состояние моделируемой квантовой системы, так и на его основе последовательно интерпретировать состояние в конечной конфигурации, выделяя при необходимости вклад отдельных классических ансамблей $\phi_n(E)$, соответствующих различным возбужденным квантовым состояниям.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты компьютерного моделирования распределений конечных состояний в трехчастичной модели для случая перезарядки представлены на рис 3-5. Для данного типа реакции моделировалось рассеяние протона на атоме водорода, находящегося в основном состоянии. Начальное состояние мишени задавалось в рамках модели микроканонического ансамбля. Для случаев, когда в результате взаимодействия в выходном канале реакции образовывался атом водорода, состоящий из налетающего протона и электрона атома мишени, тестировались параметры образовавшейся связанной системы. На рис. 3 представлено распределение электрона по энергии. Здесь же приведены энергетические распределения модели классических фазовых распределений $f_r(e)$ и модели Вигнера $f_w(E)$, оба рассчитаны для 1s-состояния атома H. Из сравнения видно, что распределение, получаемое в результате численного эксперимента не совпадает ни с одним из указанных распределений. Среднее значение энергии в образовавшейся паре $\bar{U} = 8.5$ эВ. С учетом вышеизложенного подхода к интерпретации конечных состояний можно говорить, что данное распределение соответствует суперпозиции классических ансамблей, каждый из которых описывает одно из возбужденных состояний атома водорода.

Распределение по импульсу электрона в атоме для рассматриваемого случая приведено на рис. 4. Так как импульсное распределение в модели микрокано-

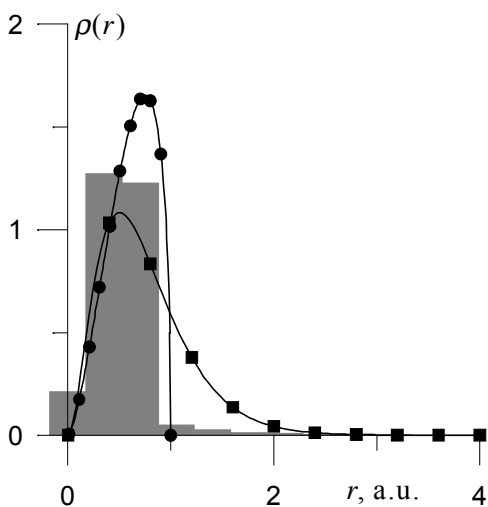


Рис. 11. Радиальное распределение электрона налетающего иона: • - распределение в модели микроканонического ансамбля; ■ - квантово-механическое распределение

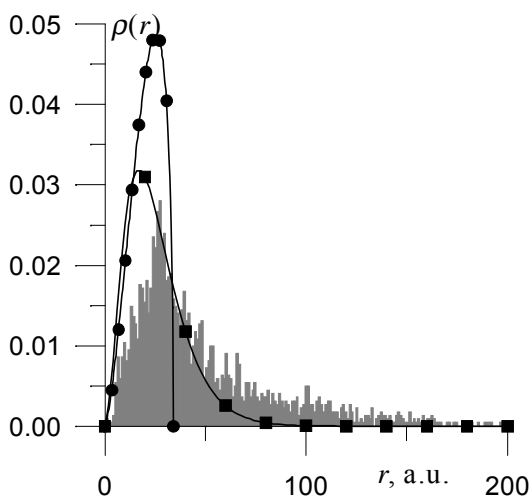


Рис. 12. Радиальное распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: • - распределение в модели микроканонического ансамбля; ■ - квантово-механическое распределение

ческого ансамбля совпадает с квантовомеханическим, можно ожидать хорошее совпадение для моделируемого распределения и его квантового аналога. Этот факт подтверждается рис. 4. Отличие в положении максимума распределения связано с тем, что квантовомеханическое распределение приведено для 1s-состояния, в то время как моделируемое состояние таковым не является.

На рис. 5 представлено радиальное распределение электрона в образовавшемся атоме. Сравнение данного распределения с микроканоническим и квантовомеханическим для 1s-состояния атома H свидетельствует о качественном совпадении формы моделируемого распределения с квантовомеханическим. В то же время моделируемое распределение медленнее квантовомеханического убывает на промежутке 4-8 а.у., что согласуется с большой вероятностью образования слабо-связанных (0-3 эВ) состояний, которым в классическом случае соответствуют эллиптические орбиты с большими пространственными размерами (большая полу-

ось эллипса - $a = e^2 / |E|$, эксцентриситет - $\varepsilon = \sqrt{1 - 2|E|L^2 / me^2}$). Здесь же приведено

распределение, построенное как суперпозиция квантовомеханических распределений для 1s и 2s-состояний атома водорода (энергия связи 2s-состояния $U_{2s} = 3.39$ эВ). Рассчитанные весовые коэффициенты данного распределения соответственно равны: $C_{1s} = 0.67$ и $C_{2s} = 0.23$. Следует отметить, что в данном случае трактовать рассчитанные коэффициенты как вероятности образования основного и возбужденного состояний атома водорода, моделируемых в рамках классической механики, не совсем верно, т.к. начальное состояние системы задавалось в модели микроканонического ансамбля, в то время как предлагаемая интерпретация (5)-(6) соответствует модели, использующей классическое представление для уравнения Шредингера.

Представляет интерес исследование временной эволюции фазовых распределений электрона мишени в случае нереактивного взаимодействия. В данном случае рассматриваются фазовые распределения электрона в атоме мишени после взаимодействия с налетающей частицей. Вычислительный эксперимент позволяет определить вид обсуждаемых распределений для классических моделей квантовых систем. Результаты расчета для столкновения $p + H$ представлены на рис. 6-8.

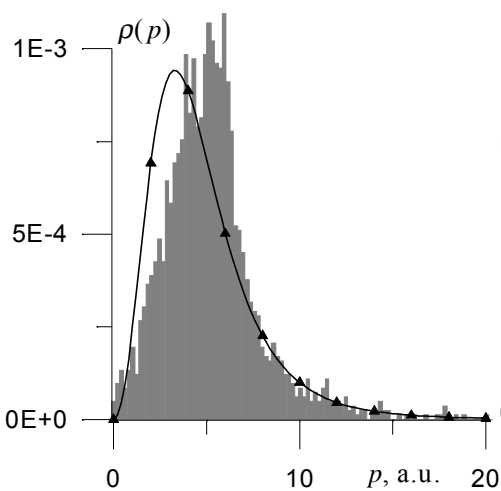


Рис. 13. Импульсное распределение электрона налетающего иона: Δ - квантово-механическое распределение

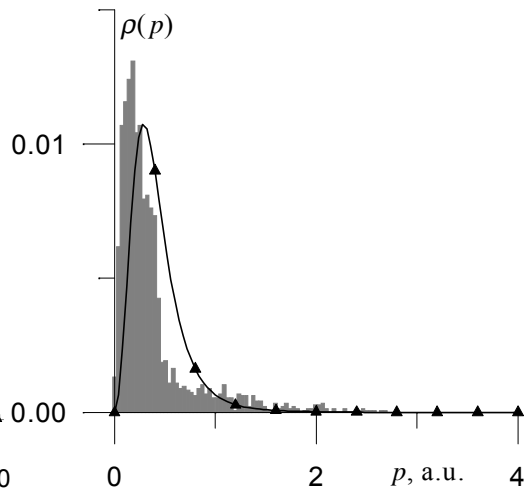


Рис. 14. Импульсное распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: Δ - квантово-механическое распределение

Распределение по энергии в начальном состоянии задавалось в рамках модели микроканонического ансамбля, т.е. энергия была жестко фиксирована. В результате взаимодействия атом мишени переходит в состояние с другой энергией связи, что в квантовомеханическом случае интерпретируется как переход в возбужденное состояние. На рис. 6 представлено энергетическое распределение электрона. Оно имеет острый пик в области энергии, равной начальной энергии связи атома. Сравнение полученного распределения с модельными распределениями [3,4], соответствующими $1s$ -состоянию атома водорода, свидетельствует о том, что формируемое в результате временной эволюции и под воздействием налетающего иона энергетическое распределение электрона не описывается указанными модельными распределениями.

Распределение импульса электрона (рис. 7) демонстрирует хорошее согласие с начальным распределением, которое, как известно, совпадает с квантовомеханическим.

Радиальное распределение электрона в атоме, представленное на рис. 8, также имеет форму, близкую к начальной - микроканоническому распределению. Одновременно, в связи с образованием состояний с энергией связи меньше начальной, наблюдается формирование орбит с большими пространственными размерами. В связи с этим, распределение отлично от нуля при значениях $r > 2$ а.е., т.е. его поведение становится близким к квантовомеханическому.

В рамках четырехчастичной модели МКТ моделировалось рассеяние многозарядного иона Z^{+21} на атоме гелия. Мишень - атом гелия - моделировался водородоподобной двухчастичной системой с эффективным зарядом ядра $Z_{\text{eff}}=1.7$, учитывающим влияние второго электрона. Для налетающего иона также использовалась двухчастичная модель, учитывающая экранировку ядра внутренними электронными оболочками. Моделируемое состояние электрона внешней электронной оболочки иона задавалось в предположении, что ион находится в основном состоянии. Наиболее интересным для изучения конечным состоянием в данной системе является конфигурация, соответствующая перезарядке атома мишени и образованию связанной трехчастичной системы - ядра налетающего иона и двух электронов. Фазовые распределения, рассчитанные для обсуждаемой конфигурации представлены на рис. 9-14.

На рис. 9 и 10 показаны распределения по энергии для электрона иона (рис. 9) и электрона, который был захвачен из атома мишени (рис. 10). Как и в случае возбуждения атома в результате взаимодействия с налетающей частицей (рис. 6), распределение электрона иона имеет острый пик вблизи начальной энергии $U=448.5$ эВ. В то же время "размывание" распределения происходит преимущественно в область больших (по модулю) энергий. Это соответствует в классической модели "прижиманию" электрона к ядру под воздействием захваченного на внешнюю орбиту электрона атома мишени. Состояние, в котором находится захваченный электрон описывается энергетическим распределением, представленным на рис. 10. Видно, что оно имеет ступенчатую форму, с небольшим максимумом в области 23 эВ. В трактовке классической механики такая форма может быть объяснена тем, что захваченный электрон не может иметь орбиту, пространственные размеры которой близки к размерам орбиты электрона иона - она должна быть больше, в силу взаимного отталкивания электронов.

Такая структура образующейся трехчастичной связанной системы в классической модели подтверждается распределениями электронов по радиусу, характеризующими пространственные размеры рассматриваемой системы. Соответствующие распределения приведены на рис. 11-12. Радиальное распределение для электро-

на иона мало отличается от начального - микроканонического (рис. 11), в то время как пространственное распределение захваченного электрона (рис. 12) по форме близко к квантовомеханическому, которое соответствовало бы основному состоянию водородоподобной системы с данным зарядом ядра и энергией связи $U=20.5$ эВ.

Распределения электронов по импульсу (рис. 13-14) демонстрируют как и в случае трехчастичной модели, хорошее совпадение с квантовомеханическими распределениями, построенными для основного состояния двухчастичной водородоподобной системы с параметрами, определенными зарядом ядра и моделируемой средней энергией в паре "ядро-электрон".

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный в работе анализ конечных фазовых распределений продуктов ион-атомных столкновений, моделируемых в рамках трех- и четырехчастичных моделей метода классических траекторий показал, что получаемые в результате вычислительного эксперимента распределения неадекватно описываются известными модельными распределениями, применяемыми для задания начального состояния связанных систем. Следует отметить, что рассчитанные распределения по радиусу и импульсу электрона качественно близки к квантовомеханическим распределениям моделируемых систем. Предложен подход, основанный на классическом представлении для уравнения Шредингера, который позволяет последовательно описывать начальное и конечное состояния связанных квантовых систем, а также вычислять вероятности перехода в возбужденные состояния моделируемых атомов (ионов).

Список литературы

1. *Abrines R. and Percival I.C.* Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons // *Proceeding of Physical Society.* - 1966. - 88. - P.861.
2. *Abrines R. and Percival I.C.* A generalized correspondence principle and proton-hydrogen collisions // *Proceeding of Physical Society.* - 1966. - 88. - P.873.
3. *Cohen J.S.* Classical phase-space distributions for atomic hydrogen collisions // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* - 1985. - 18. - P.1759
4. *Eichenauer D. et. al.,* Classical trajectory calculations for H+-H collisions with the Wigner function as initial phase space distribution // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* - 1981. - 14. - P. 3929
5. *Соловьев Е.А.* Классическое представление для одномерного уравнения Шредингера // *ЖЭТФ.* - 1993. - 103. - Вып. 6. - С.1891.

Поступила в редакцию 10.03.99.

УДК 621.039.525; 621.039.534.6

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РАСЧЕТА БЛАНКЕТОВ ЭЛЕКТРОЯДЕРНЫХ УСТАНОВОК

В.В.Коробейников

ГНЦ РФ-ФЭИ им. А.И.Лейпунского, г.Обнинск



Разработан универсальный алгоритм для физического расчета подкритических систем с внешним источником нейтронов методом Монте-Карло. Данный алгоритм позволяет эффективно рассчитывать электроядерные системы в широком диапазоне подкритичности. В работе содержится описание, теоретическое обоснование, способ реализации и результаты тестирования алгоритма на примере тестовых подкритических систем с внешним источником.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время возрос интерес к рассмотрению установок, сочетающих интенсивный внешний источник нейтронов с подкритическим реактором в составе гибридных систем. Источник нейтронов предполагается получать путем облучения специальных мишеней, расположенных внутри подкритического реактора, пучками высокоэнергетических протонов или дейтронов от ускорителя (см., например, [1]-[3]). Подкритичность реактора рассматривается в настоящее время в качестве главного достоинства такого рода гибридных систем, поскольку считается, что она обеспечивает повышенную (по некоторым сообщениям и, вообще, абсолютную детерминированную) по сравнению с обычными критическими реакторами безопасность, что является приоритетным требованием.

Таким образом, возникает потребность в разработке эффективных алгоритмов метода Монте-Карло для подкритических систем с внешними источниками и произвольной величиной подкритичности.

В работе [4] приведено описание реализации эффективного подхода к расчету подкритических систем применительно к детерминистическим методам решения уравнения переноса. Метод Монте-Карло обладает рядом специфических особенностей по сравнению с обычными сеточными методами и, к сожалению, большинство приемов ускорения сходимости, развитых для детерминистических методов решения уравнения переноса, оказываются бесполезными при попытках применения их в методе Монте-Карло. Подходы, развитые в [4], оказались удобными при разработке новых эффективных алгоритмов Монте-Карло. Рассмотрим теоретические аспекты подхода к решению задачи о подкритической системе с внешним источником.

ТЕОРИЯ

При расчете подкритических систем с внешним источником обычно рассматривается уравнение вида:

© *В.В.Коробейников, 1999*

$$\hat{L}\Phi(x) = \hat{B}\Phi(x) + Q(x), \tag{1}$$

где
$$\hat{L}\Phi = \hat{\Omega}\nabla\Phi(r, E, \hat{\Omega}) + \Sigma\Phi(r, E, \hat{\Omega}) - \int dE' \int d\hat{\Omega}' \Sigma_s(E' \hat{\Omega}' \rightarrow E \hat{\Omega}, r) \Phi(r, E', \hat{\Omega}'),$$

$$\hat{B}\Phi = \int dE' \int d\hat{\Omega}' v \Sigma_f(r, E') \chi(r, E) \Phi(r, E', \hat{\Omega}')$$

- с нулевыми граничными условиями на внешней границе.

Для описания размножающих свойств таких систем многие авторы вводят величину k_s , определяемую из соотношения:

$$k_s = \frac{\langle \hat{B}\Phi \rangle}{\langle \hat{L}\Phi \rangle}. \tag{2}$$

Используя (1), можно переписать (2) в виде:

$$k_s = \frac{\langle \hat{B}\Phi \rangle}{\langle \hat{B}\Phi \rangle + \langle Q \rangle}, \tag{3}$$

где $\langle K \rangle$ - обозначает интегрирование по всем переменным в пределах объема рассчитываемой системы. Физический смысл соотношений (2) и (3) достаточно прозрачен: в числителе приведена полная скорость генерации нейтронов в результате деления, в знаменателе - скорость исчезновения нейтронов в результате поглощения и утечки, равная полной скорости появления нейтронов в результате деления и от внешнего источника. Величину k_s можно связать с традиционно используемой величиной умножения

$$Y = \frac{\langle B\Phi \rangle + \langle Q \rangle}{\langle Q \rangle}. \tag{4}$$

Используя (4) и (3), свяжем k_s и Y :

$$Y = \frac{1}{1 - k_s}. \tag{5}$$

Отметим, что величина k_s может существенно отличаться от k_{ef} . Действительно, умножение, а значит и k_s зависят от местоположения источника и его спектра. Запишем уравнение, сопряженное (1) и имеющее смысл ценности нейтронов по отношению к функционалу

$$I_{v\Sigma_f} = \langle \Phi v \Sigma_f \rangle, \tag{6}$$

$$\hat{L}^*\Phi^* = \hat{B}^*\Phi^*(x) + v\Sigma_f(x), \tag{7}$$

где

$$\hat{L}^*\Phi^* = -\hat{\Omega}\nabla\Phi^* + \Sigma_t\Phi^* - \int dE' \int d\hat{\Omega}' \Sigma_s(E \hat{\Omega} \rightarrow E' \hat{\Omega}', r) \Phi^*(r, E', \hat{\Omega}'),$$

$$\hat{B}^*\Phi^* = \int dE' \int d\hat{\Omega}' \chi(r, E') v \Sigma_f(r, E) \Phi^*(r, E', \hat{\Omega}').$$

Умножим уравнение (1) на F^* , а уравнение (7) на F и результат умножения проинтегрируем по всем переменным. Вычитая (7) из (1), получим:

$$\frac{\langle \Phi^* Q \rangle}{\langle Q \rangle} = \frac{\langle \hat{B}Q \rangle}{\langle Q \rangle} = \frac{k_s}{1 - k_s}. \tag{8}$$

Из (8) следует важный вывод: усредненная с весом внешнего источника ценность равна полному числу нейтронов деления, полученных от одного нейтрона внешнего источника. Соотношение (8) также показывает зависимость k_s от местонахождения и энергетической структуры внешнего источника.

Запишем теперь уравнение для ценности по отношению к асимптотической мощности реактора

$$\hat{L}^* \Phi_y^* = \frac{1}{k_{ef}} \hat{B}^* \Phi_y^* \quad (9)$$

Проведя действия, подобные описанным выше при выводе соотношения (8), получим:

$$\frac{\langle \Phi_y^* \hat{B} \Phi \rangle}{\langle \Phi_y^* Q \rangle} = \frac{k_{ef}}{1 - k_{ef}} \quad (10)$$

Из сравнения (8) и (10) следует, что k_{ef} может использоваться при описании умножения в подкритических системах в том случае, если $\Phi_y^* = \text{const}$. Расчеты методом Монте-Карло подкритических систем с внешним источником существенно усложняются, если k_s близко к единице. Традиционным подходом к решению уравнения (1) методом Монте-Карло является метод последовательных поколений [5]. В этом подходе

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \Phi_{n'} \quad (11)$$

где Φ_n являются решениями уравнений вида:

$$\hat{L} \Phi_n = \hat{B} \Phi_{n-1} \quad (12)$$

$$\hat{L} \Phi_0 = Q \quad (13)$$

Реализация такого подхода в программах, основанных на методе Монте-Карло (см., например, ММКФК [5]) состоит в отказе от процедуры пополнения пакета нейтронов (как это делается при решении условно-критической задачи) и введении регистрации с весом w_n в оценках по столкновениям и длинам пробега:

$$w_n = w_{n-1} \frac{v \Sigma_f}{\Sigma_a} (x_{n-1}); w_0 = 1, \quad (14)$$

где $x_{n-1} = (r_{n-1}^p, E_{n-1})$ - точка, в которой произошло поглощение нейтрона. Таким образом, в простейшей реализации нейтронная траектория в точках поглощения (в зоне с делением) не прерывается, а продолжается с весом до поглощения в зоне, не содержащей делящийся материал, или вылета из системы.

Такая схема, как отмечено в [5], приводит к неприемлемо большой дисперсии уже при подкритичности менее 10%. Более эффективной оказалась "безвесовая" схема одиночного прослеживания нейтронных траекторий с использованием приемов расщепления и рулетки, но и эта схема теряет свою эффективность при приближении k_s к единице.

Рассмотрим другой подход к решению задачи о подкритической системе с внешним источником. Перепишем уравнение (1) с использованием соотношения (8) в следующем виде [4]:

$$\hat{L} \Phi = \hat{B} \Phi + \frac{\langle \hat{B} \Phi \rangle}{\langle Q \rangle} \frac{1 - k_s}{k_s} Q, \quad (15)$$

которое полностью переходит в (1), если φ заменить на Φ и использовать (8). Однако (15) в отличие от (1) является однородным и удовлетворяет всем функциям вида:

$$\varphi(x) = \Phi(x) \cdot C, \quad (16)$$

где $\Phi(x)$ - решение уравнения (1), а C - произвольная константа.

Преобразуем (15) к виду:

$$\hat{\Lambda}\varphi = \frac{\langle \hat{B}\varphi \rangle}{k_s} \left[k_s \frac{\hat{B}\varphi}{\langle B\varphi \rangle} + (1-k_s) \frac{Q}{\langle Q \rangle} \right]. \quad (17)$$

Проинтегрируем обе части (17) и с учетом равенства единице интеграла от выражения в квадратных скобках, получим:

$$\langle \hat{\Lambda}\varphi \rangle = \frac{\langle \hat{B}\varphi \rangle}{k_s}. \quad (18)$$

Поскольку уравнения (15) и (17) однородны, то можно выбрать нормировку $\varphi(x)$ и сделать ее, например, такой, чтобы $\langle \hat{\Lambda}\varphi \rangle = 1$. Тогда с учетом (18) можно (17) переписать в виде:

$$\hat{\Lambda}\varphi = k_s \frac{\hat{B}\varphi}{\langle B\varphi \rangle} + (1-k_s) \frac{Q}{\langle Q \rangle}. \quad (19)$$

В уравнении (19) источник нейтронов представлен в виде суперпозиции двух нормированных на единицу распределений. Первый член - источник нейтронов деления, второй - внешний источник. Последнее соотношение открывает путь к решению задачи о подкритической системе, подобный тому, который используется при решении условно-критической проблемы.

Для более полной аналогии выпишем уравнение для плотности потока в условно-критической задаче:

$$\hat{\Lambda}\Phi_y = \frac{1}{k_{ef}} \hat{B}\Phi_y. \quad (20)$$

Подобно (18) можно записать:

$$\langle \hat{\Lambda}\Phi_y \rangle = \frac{1}{k_{ef}} \langle \hat{B}\Phi_y \rangle. \quad (21)$$

Используя те же принципы, что и при получении (19), запишем

$$\hat{\Lambda}\Phi_y = k_{ef} \frac{\hat{B}\Phi_y}{\langle \hat{B}\Phi_y \rangle} + (1-k_{ef}) \frac{\hat{B}\Phi_y}{\langle \hat{B}\Phi_y \rangle}. \quad (22)$$

Источник, стоящий в правой части, представлен суммой двух членов и нормирован на единицу. Трактовку соотношения (22) легко провести, если предположить, что полное число испускаемых нейтронов равно N . Тогда первый член в правой части будет представлять число нейтронов деления, образовавшихся в текущем поколении, если в предыдущем было испущено N нейтронов, и будет равен $k_{ef} \cdot N$. Второй член равен $(1-k_{ef}) \cdot N$ и соответствует числу нейтронов, которые нужно добавить, чтобы их количество было равно выпущенному в предыдущем поколении, т.е. N . Эта добавка делается из распределения нейтронов деления, т.е. того же распределения, что и в первом члене. Такая повторяющаяся для всего набора рассчитываемых поколений процедура обыч-

но используется в программах, основанных на методе Монте-Карло. Заметим, что при $k_{ef} > 1$ расчетная процедура видоизменяется: второй член в (22) становится отрицательным и вместо добавления до исходного числа N требуется, наоборот, убавить $(k_{ef} - 1)N$ нейтронов.

Подобный приведенному выше при $k_{ef} < 1$ подход предлагается использовать и при решении задачи о подкритической системе с внешним источником. Сравнивая (22) и (19), можно построить итерационную процедуру:

$$\hat{L}\varphi_n = k_{s_{n-1}} \frac{\hat{B}\varphi_{n-1}}{\langle \hat{B}\varphi_{n-1} \rangle} + (1 - k_{s_{n-1}}) \frac{S}{\langle S \rangle}, \quad (23)$$

где

$$k_{s_{n-1}} = \langle \hat{B}\varphi_{n-1} \rangle, \quad (24)$$

в которой в каждом поколении поддерживается постоянное число нейтронов. Действительно, из формул (19), (23), (24) следует, что при стационарно работающей системе из N рождающихся нейтронов $k_s \cdot N$ будут нейтронами деления, а $(1 - k_s) \cdot N$ - нейтронами внешнего источника. Таким образом, если в текущем поколении будет испущено N нейтронов, то $k_s \cdot N$ нейтронов получившихся в следующем поколении нужно дополнить $(1 - k_s) \cdot N$ нейтронами до исходного числа N . Эта процедура должна повторяться в процессе расчета поколений нейтронов.

При расчете величины k_s используются те же оценки, что и в стандартном расчете k_{ef} .

Рассмотренный выше подход реализован в программном комплексе ММКФК и содержит следующие основные этапы:

- моделирование некоторого количества предварительных поколений с целью установления начального распределения источников деления; вклады в рассчитываемые функционалы при моделировании нейтронных траекторий на данном этапе не делаются.
- моделирование основных поколений с вычислением вкладов в рассчитываемые функционалы.

В каждом поколении (как предварительном, так и основном) из полного числа N нейтронов деления выбирается $k_s \cdot N$ нейтронов деления. Из полного числа N нейтронов внешнего источника выбирается $(1 - k_s) \cdot N$ нейтронов.

Универсальность алгоритма состоит в его "автоматическом переходе" в условно-критическую опцию при $k_{ef} > 1$.

Заметим, что в результате решения методом Монте-Карло уравнения (19) мы получим плотность потока нейтронов и функционалы плотности потока, нормированные на один нейтрон, являющийся с вероятностью k_s нейтроном деления, и с вероятностью $(1 - k_s)$ - нейтроном внешнего источника. Для того, чтобы привести наш результат к исходной постановке, нужно воспользоваться следующим очевидным соотношением:

$$\Phi(x) = \frac{\langle Q \rangle}{1 - k_s} \varphi(x). \quad (25)$$

Такая же связь будет и для линейных функционалов плотности потока.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для иллюстрации работоспособности разработанного метода было проведено две серии расчетов. Первая тестовая задача предназначалась для тестирования метода в условиях, когда k_s должно совпадать с k_{ef} . Для этой цели использовалась система бесконечных размеров с внешним источником, распределенным по спектру деления. Тестовая система рассчитывалась по двум опциям программы ММКФК. В первом случае ре-

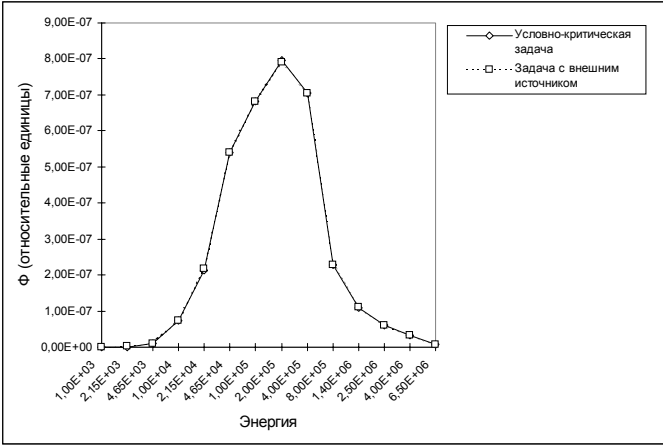


Рис.1. Сравнение результатов решения тестовой задачи: $k_{ef} = -0.9855 \pm 0.0013$; $k_s = -0.9854 \pm 0.0013$

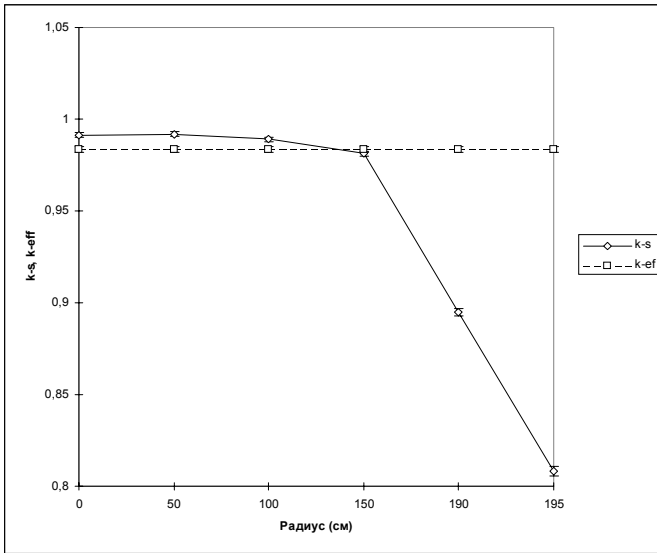


Рис.2. Зависимость k_s от местоположения внешнего источника

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в данной работе универсальный подход к расчету подкритических систем с внешним источником внедрен в практику серийных исследований физических характеристик бланкетов электроядерных установок.

Результаты большого числа расчетов показали его работоспособность и эффективность.

Применение разработанного подхода может быть эффективным при анализе экспериментов, проводимых на критических сборках и реакторах в подкритических условиях.

Автор выражает глубокую благодарность К.Ф.Раскачу и Г.Я.Румянцеву за многочисленные плодотворные обсуждения данной проблемы.

Список литературы

1. Адо Ю.М., Крючков В.П., Лебедев В.Н. Энергетический подкритический ядерный реактор сподсветкой пучком ускоренных протонов // Атомная энергия. – 1994. – Т.77. – Вып.4. – С.300-308.

шалась стандартная условно-критическая задача, а во втором использовалась описанная выше процедура расчета систем с внешним источником. На оба расчета было затрачено примерно одинаковое время ЭВМ. На рис.1 приведены результаты расчетов нейтронных спектров, а также величины k_s и k_{ef} . Видно полное совпадение результатов в пределах статистических ошибок метода Монте-Карло.

Во второй серии рассчитывалась подкритическая система, состоящая из смеси ^{235}U , ^{238}U и графита в цилиндрической геометрии. Исследовалась зависимость k_s от местоположения внешнего источника. Результаты расчетов приведены на рис.2. Из результатов расчетов, как и следовало ожидать, наблюдается уменьшение k_s при перемещении внешнего источника из центра системы к ее внешней границе. На этом же рисунке для наглядности приведено k_{ef} .

2. *Slesarev I.S.* Accelerator Driven System (ADS): a Principal Neutronics and Transmutation Potential. In Status of the Accelerator-Driven System (ADS). Working Material 622-13CT2065, CT2283 and CT2429, IAEA, Vienna Austria. - 1996. - P.74-82.
3. *Rubbia C., Buono S., Gonzalez E., Kadi Y.* A Realistic Plutonium Elimination Scheme with Fast Energy Amplifiers and Thorium-Plutonium Fuel. CERN/AT/95-53(ET).
4. *Раскач К.Ф., Коробейников В.В.* Эффективный метод решения задачи о подкритическом реакторе с внешним источником//Атомная энергия. – 1998. - Т.85. - Вып.6.
5. *Полевой В.Б.* МОНИСТО - редакция программы ММК-22 для расчета глубоко подкритических систем с источником//ВАНТ. Сер.: Физика и техника ядерных реакторов. – 1981. - Вып.8(21).

Поступила в редакцию 7.06.99.

О МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА ПРИ МЕДЛЕННОМ ВОЗМУЩЕНИИ РЕАКТИВНОСТИ

Н.А. Виногоров, Д.Н. Жуковский

Научно-исследовательский технологический институт им. А.П.Александрова, г. Сосновый Бор



Представлен метод определения характеристик ядерного реактора при медленных возмущениях реактивности по измерениям параметра, обеспечивающего обратную связь.

Применение метода поясняется примерами определения эффекта отравления ксеноном-135 и барометрического коэффициента реактивности для ВВР.

В процессе эксплуатации энергетического ядерного реактора происходит постоянное изменение его параметров, обусловленное либо регламентными технологическими операциями, либо изменением состава топлива. Цель настоящей статьи - обратить внимание на информативность и возможность использования таких процессов для целей определения эффектов реактивности.

Рассмотрим качественно, как изменяется реактивность $\rho(t)$ реактора, работающего на энергетическом уровне мощности при возмущении реактивности $\rho_{in}(t)$ (источник возмущения значения не имеет). Будем рассматривать медленные процессы при малых значениях реактивности. Полагая, что обратная связь реализуется по эффективной температуре реактора, и считая, в частности, что выполняются условия

$$|d\rho/dt|/\lambda \ll \rho \ll \beta, \quad (1)$$

где β , λ - эффективная доля и постоянная распада (в одnogрупповом приближении) запаздывающих нейтронов соответственно, т.ч. состояние парогенератора можно принять квазистационарным, уравнения динамики системы запишем в упрощенном виде [1]:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= \rho_{in} + \rho_f \\ dn/dt &= \rho n / l \\ dp_f / dt &= \alpha_T dT / dt \\ dT / dt &= K(n - n_0) - \gamma T \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

где ρ_f - реактивность обратной связи; T - отклонение температуры реактора от установившегося при начальной мощности n_0 значения; α_T - температурный коэффициент реактивности; λ , K , γ - размерные положительные постоянные.

Линеаризировав второе уравнение в (2) и применив операционный метод, при нулевых начальных условиях получим

$$F_p(s) = s(s + \gamma)D_s^{-1}F_{\rho_{in}}(s), F_{\rho_f}(s) = -AD_s^{-1}F_{\rho_{in}}(s), \quad (3)$$

где $F_p(s), F_{\rho_f}(s), F_{\rho_{in}}(s)$ - изображения Лапласа для ρ, ρ_f, ρ_{in} соответственно, s - комплексная переменная, $D_s = s^2 + s\gamma + A$, $A = -\alpha_T Kn_0 / L$.

Корни уравнения $D_s=0$ при характерных для реактора значениях параметров A и γ действительные и отрицательные, продолжительность переходных процессов составляет несколько минут, т.ч. в рассматриваемом случае реактор как объект управления представляет собой следящую систему [2]. При линейном во времени возмущении в системе установится процесс, в котором $\rho = \text{const} \neq 0$ и

$$dp_{in}/dt \cong -dp_f/dt. \quad (4)$$

Уравнение (4) выражает метод определения скорости линейного возмущения реактивности, в соответствии с которым определяется скорость изменения параметра, обеспечивающего обратную связь. Предполагается, что коэффициент реактивности последнего (обычно температурный коэффициент) известен.

Особенность метода состоит, в частности, в том, что, будучи, по сути, методом динамическим, он не требует изменений реактивности реактора, характерных для динамических методов (соответственно, упрощается аппаратное обеспечение измерений и обработка данных).

Поскольку уравнение (4) представляет установившийся в системе баланс реактивности, рассматриваемый метод можно считать динамическим методом баланса.

В случае малых и медленных изменений параметров линейность процессов во времени позволяет обеспечить приемлемую точность измерений. Причинами линейного возмущения реактивности на интервалах в несколько десятков минут могут являться эффекты отравления, выгорания, изменения технологических параметров реактора. В частном случае, когда возмущение вносится изменением параметра X_i , так что $dp_{in}/dt = \alpha_i dX_i/dt$, одновременное определение скоростей изменения X_i и ρ_f позволяет определить коэффициент реактивности α_i .

Применение метода поясним (опуская детали методики) примерами, используя данные, полученные на водо-водяном реакторе транспортного назначения.

Пример 1. Определение отравления ксеноном-135. Пусть в исходном состоянии при мощности реактора N_1 достигнуто стационарное отравление ρ_{Xe}^0 . Перевод реактора на другой стационарный уровень мощности N_2 инициирует переходный по ксенону процесс. Математическую модель процесса в приближении точечной кинетики для скорости отравления $d\rho_{Xe}^0/dt$ можно записать в виде:

$$d\rho_{Xe}^0/dt = A_1 \exp(-A_2 t) + A_3 \exp(-\lambda_{I1} t), \quad (5)$$

при этом для параметров модели A_1, A_2, A_3 справедливо:

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= \rho_{Xe}^0 \left[\lambda_1^* \frac{N_2}{N_1} - \frac{\lambda_1^*}{\lambda_{I1} - \lambda_2^*} \frac{\gamma_I}{\gamma_I + \gamma_{Xe}} \left(1 - \frac{N_2}{N_1} \right) \lambda_2^* - \lambda_2^* \right] \\ A_2 &= \rho_{Xe}^0 \frac{\lambda_1^*}{\lambda_{I1} - \lambda_2^*} \frac{\gamma_I}{\gamma_I + \gamma_{Xe}} \left(1 - \frac{N_2}{N_1} \right) \lambda_{I1} \\ A_3 &= \lambda_2^* \end{aligned} \right\}, \quad (6)$$

где γ_I, γ_{Xe} - соответственно выходы йода-135 и ксенона-135 при делении топлива; λ_I - постоянная распада I-135; λ_1^*, λ_2^* - «эффективные» постоянные распада ксенона-135 при уровнях мощности N_1 и N_2 .

Равенства (5) и (6) следуют из уравнений накопления йода и ксенона (см., например, [3]) в предположении пропорциональности между эффективной плотностью потока тепловых нейтронов и уровнем мощности.

Изменение некоторых параметров реактора на участке нестационарного по ксенону режима после увеличения мощности представлено на рис.1. Компенсация реактивности ведется системой реагирования релейного типа с механическими регуляторами. В динамике режима проявляются два основных процесса. Один процесс инициируется периодическим перемещением стержней регулирования. Внесенное стержнями возмущение реактивности относительно быстро компенсируется изменением температуры (скачки температуры на рис.1). Характерная длительность этого процесса 5-10 мин. [3]. Второй процесс - изменение отравления реактора ксеноном - идет непрерывно. Вносимое отравлением изменение реактивности также компенсируется изменением температуры. При больших периодах полураспада ксенона-135 и йода-135 на интервалах времени до десятков минут скорость изменения отравления можно принять постоянной. В течение 40-50 ч после изменения мощности реактора влияние на реактивность таких процессов как изменение отравления самарием-149 или выгорание топлива пренебрежимо мало по сравнению с влиянием отравления ксеноном.

Определяя dT/dt на участках линейного изменения температуры, в соответствии с (4) получим на этих участках скорости изменения отравления ксеноном $dp_{Xe}/dt = -\alpha_T dT/dt$.

Экспериментальные данные, полученные таким образом, представлены на рис.2. Аппроксимация данных моделью (5) позволяет идентифицировать параметры модели, что, в свою очередь, позволяет из (6) определить величину стационарного отравления и рассчитать кинетику нестационарных ксеноновых процессов.

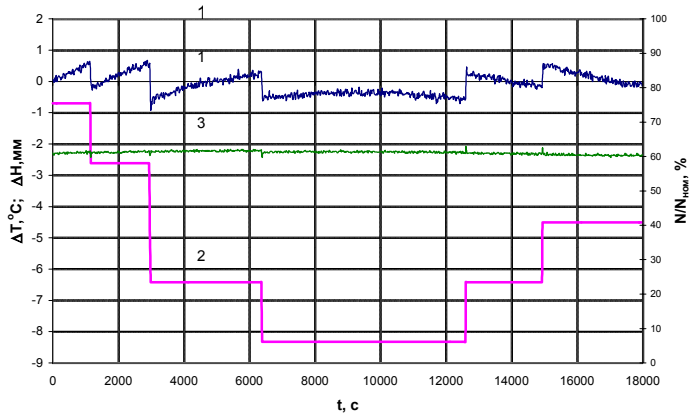


Рис.1. Изменение параметров реактора в нестационарном по ксенону режиме: 1 - отклонение ΔT средней температуры от заданного значения; 2 - изменение положения стержней регулирования ΔH ; 3 - нормированная мощность реактора $N/N_{ном}$

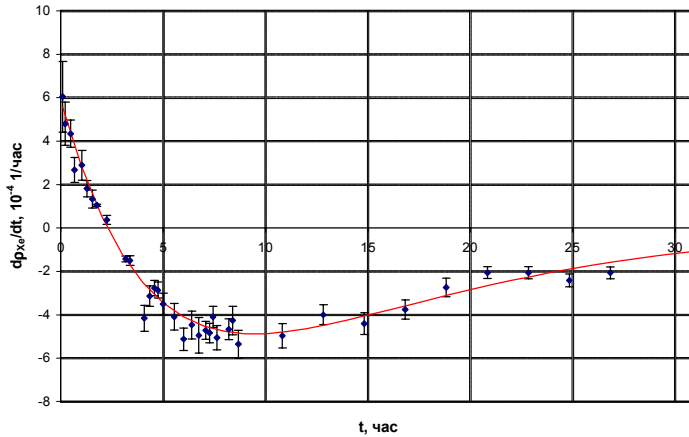


Рис.2. Скорость отравления ксеноном в переходном режиме после увеличения мощности реактора (измеренные значения и кривая их аппроксимации по модели (5))

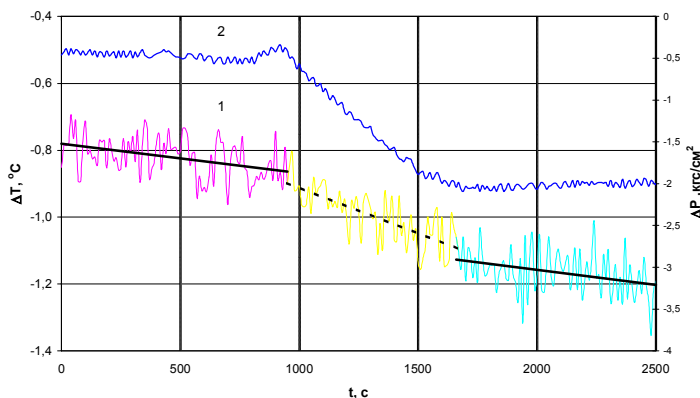


Рис.3. Изменение параметров реактора при дренаже теплоносителя: 1 - отклонение ΔT средней температуры от заданного значения, зарегистрированные данные и кусочно-линейная аппроксимация; 2 - отклонение ΔP давления от заданного значения

В реакторе под давлением изменение температуры сопровождается изменением давления. Если влияние последнего на реактивность существенно, величина α_T в рассматриваемом примере должна содержать "барометрическую составляющую", т.е. $\alpha_T = \alpha_T^0 + \alpha_P dP/dT$, где α_T^0 , α_P - собственно температурный и барометрический коэффициенты реактивности соответ-

ственно, P - давление.

Пример 2. Определение барометрического коэффициента реактивности α_P .

В соответствии с методом измерений для определения α_P необходимо обеспечить медленное линейное изменение давления. Эти требования можно выполнить при дренаже теплоносителя по линии отбора пробы на химический анализ. Скорость возмущения реактивности при дренаже не более (по абсолютной величине) $5 \cdot 10^{-4} \text{ч}^{-1}$. Изменение параметров реактора при выполнении этой операции представлено на рис.3.

В иллюстрируемом режиме процесс дренажа накладывается на другой медленный процесс, индикатором которого является изменение температуры на начальном и конечном участках представленного на рисунке интервала. Возмущение реактивности, обусловленное падением давления, вызывает в этом случае изменение скорости уменьшения температуры. Определяя скорости изменения температуры до, после и при дренаже (соответственно dT^-/dt , dT^+/dt , dT/dt) и скорость изменения давления dP/dt получим в соответствии с (4) α_P из равенства

$$\alpha_P dP/dt = -\alpha_T [dT/dt - (dT^-/dt + dT^+/dt)/2].$$

Эксперименты по определению эффектов реактивности выполняются на разных стадиях создания и эксплуатации реактора. При этом измерения на действующих реакторах имеют свою специфику. Условия эксплуатации диктуют ряд требований к методам измерений. Желательно, чтобы наряду с информативностью они были экономичны и позволяли получать данные непосредственно на энергетических уровнях мощности в пассивном эксперименте (т.е. без специального, необходимого для целей эксперимента воздействия на реактор).

В настоящее время едва ли не единственным методом, отвечающим этим требованиям и широко используемым (в частности, для исследования температурного коэффициента реактивности), является метод анализа шумов параметров реактора. Из приведенных примеров следует, что проведение измерений в соответствии с рассматриваемым методом также полностью «вписывается» в режим нормальной эксплуатации.

Как уже отмечалось, измерения при медленном возмущении реактивности проводятся без определения реактивности реактора. Сравнивая представленные в примерах методики с традиционными [4], можно отметить, в частности, следующее:

- для определения отравления не требуется знания эффективности стержней регулирования, измерение которой на энергетических уровнях мощности представляет самостоятельную задачу, исключается необходимость введения поправок на мощностной и температурный эффекты реактивности;

• при определении барометрического коэффициента реактивности исключаются быстрые и значительные по величине изменения давления нехарактерные для режима нормальной эксплуатации.

Точность метода обусловлена, главным образом, погрешностями коэффициента реактивности контура обратной связи (обычно температурного коэффициента реактивности) и скоростей изменения параметров. В приведенных примерах малые скорости длительного линейного изменения давления и температуры определялись с относительной погрешностью ~10%, при относительной погрешности температурного коэффициента 7%. Таким образом, рассматриваемый метод по точности результатов не уступает другим методам, применяемым в настоящее время (см., например, [5]).

В заключение отметим, что, в случае, когда для стационарных по мощности режимов работы реактора известны предельные скорости возмущения реактивности, обусловленные отравлением и выгоранием, контроль скорости изменения реактивности обратной связи, по-видимому, можно использовать для мониторинга системы и индикации аварийных ситуаций.

Список литературы

1. Хетрик Д. Динамика ядерных реакторов. - М.: Атомиздат, 1975.
2. Фельдбаум А.А., Дудыкин А.Д., Мановцев А.П., Миролюбов Н.Н. Теоретические основы связи и управления. - М.: Изд-во физ.-мат. л-ры, 1963.
3. Саркисов А.А., Пучков В.Н. Физика переходных процессов в ядерных реакторах. - М.: Энергоатомиздат, 1983.
4. Аборина И.Н. Физические исследования реакторов ВВЭР. - М.: Атомиздат, 1978.
5. Терешонок В.А., Бережный В.В., Волков С.Е. и др. Температурный, мощностной и барометрический коэффициенты реактивности активной зоны ВВЭР-1000 с загрузкой двухлетнего топливного цикла. / В кн.: Внутренняя безопасность ядерно-энергетических установок: Тезисы докладов VII Всесоюзного семинара по проблемам физики реакторов (Москва, 3-7 сентября 1991 г.). - М.: ЦНИИ Атоминформ, 1991. - С. 50-52.

Поступила в редакцию 23.03.99.

УДК 621.039.553.34

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ СТЕНКИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО КАНАЛА РЕАКТОРА РБМК ОТ ВЕЛИЧИНЫ ЗАЗОРА МЕЖДУ КАНАЛОМ И ГРАФИТОВОЙ КЛАДКОЙ

А.И.Трофимов, С.А. Виноградов, И.А.Чусов, В.И Белозеров,
М.А.Трофимов, И.А.Шевцов

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск

Р

В работе проводится расчетное и экспериментальное обоснование возможности использования данных по распределению поля температур на внутренней поверхности технологического канала (ТК) для оценки величины газового зазора между ТК и графитовым блоком в реакторе типа РБМК-1000. Численные расчеты с использованием к-ε модели турбулентности показали, что величина газового зазора существенно влияет на распределение температуры по высоте ТК. Экспериментальное исследование с использованием зондов двух типов показало, что нарушение в периодичности укладки разрезных пружинных колец приводит к искажению поля температур как по высоте ТК, так и по радиусу. Делается вывод о возможности экстраполяции величины газового зазора по распределению поля температур.

Одной из основных составляющих обеспечения безопасности энергетических канальных ядерных реакторов является диагностика состояния технологических каналов (ТК). В реакторе РБМК-1000 находится 1700 ТК, изготовленных из сплава цирконий-ниобий, помещенных в ячейки графитовой кладки (рис.1). В зазоре между ТК и графитовой кладкой расположены разрезные пружинные графитовые кольца, часть которых примыкает к ТК (малые кольца), а часть – к стенкам ячейки графитовой кладки (большие кольца). Под действием радиационного облучения и температуры в процессе длительной работы ядерного реактора происходит изменение физических свойств металла и графитовой кладки. Блоки графитовой кладки и ТК претерпевают изменения первоначальных геометрических размеров за счет процессов термодинамической ползучести и радиационного роста. Диаметры ТК увеличиваются, а диаметры отверстий в графитовых блоках уменьшаются. В результате зазор между ТК и графитовой кладкой может уменьшиться вплоть до полного обжатия ТК. Заклинивание ТК в графитовых блоках может вызвать необратимые изменения в системе канал-кладка и существенно сократить ресурс реактора в целом. Величина зазора между ТК и графитовой кладкой – один из основных параметров, определяющих ресурс ТК [1].

© *А.И.Трофимов, С.А. Виноградов, И.А.Чусов, В.И Белозеров, М.А.Трофимов,
И.А.Шевцов, 1999*

Ввиду того, что для измерений доступна только внутренняя полость ТК, прямое измерение величины зазора невозможно. Измерение искривления и диаметра ТК дает возможность сделать лишь качественную оценку величины зазора ТК-графит. В настоящее время в проблемной лаборатории ОИАТЭ разрабатывается метод определения зазора ТК-графит, основанный на анализе распределения температур на внутренней стенке ТК.

Предметом настоящей работы является расчетное и экспериментальное исследование в лабораторных условиях поля температур на внутренней стенке ТК, обусловленного заданной геометрией ячейки ТК. Работа производится с целью дальнейшего практического решения обратной задачи - экстраполяции величины зазора на основе анализа значений температуры внутренней стенки ТК.

Предполагается, что распределение температур на внутренней стенке ТК однозначно связано с расположением больших и малых колец, несоосностью ТК и ячейки графитовой кладки и величиной газового зазора. В частности, предполагается, что в области контакта малых колец с внешней стенкой ТК температура должна быть более высокой, чем в местах расположения больших колец, благодаря перетечкам тепла через торцевые поверхности больших и малых колец и непосредственному контакту малых колец со стенкой ТК. На рис.1 стрелками показано направление перетечек тепла в системе большое кольцо - малое кольцо - ТК для случая, когда топливная сборка извлечена из ТК и реактор находится в расколоченном состоянии.

Для проверки правильности исходного предположения был проведен численный анализ процесса нестационарного теплообмена в системе ТК-графитовый блок.

Исходными уравнениями для расчета процесса нестационарного теплообмена являлись уравнение неразрывности, уравнения переноса количества в продольном и поперечном направлениях, уравнение энергии для потока теплоносителя, уравнение теплопроводности. Для определения корреляционных составляющих турбулентного течения теплоносителя использовалась $k-\epsilon$ модель турбулентности (кинетическая энергия турбулентности - скорость ее диссипации) [2] со стандартным набором констант, приведенных в табл.1. Выбор $k-\epsilon$ модели для моделирования турбулентности обусловлен ее апробированностью при расчетах течений такого типа.

Для расчета характеристик турбулентного переноса в пристеночной области использовался метод коррекции расчета с помощью пристеночных функциональных зависимостей, рекомендованных в работе [3].

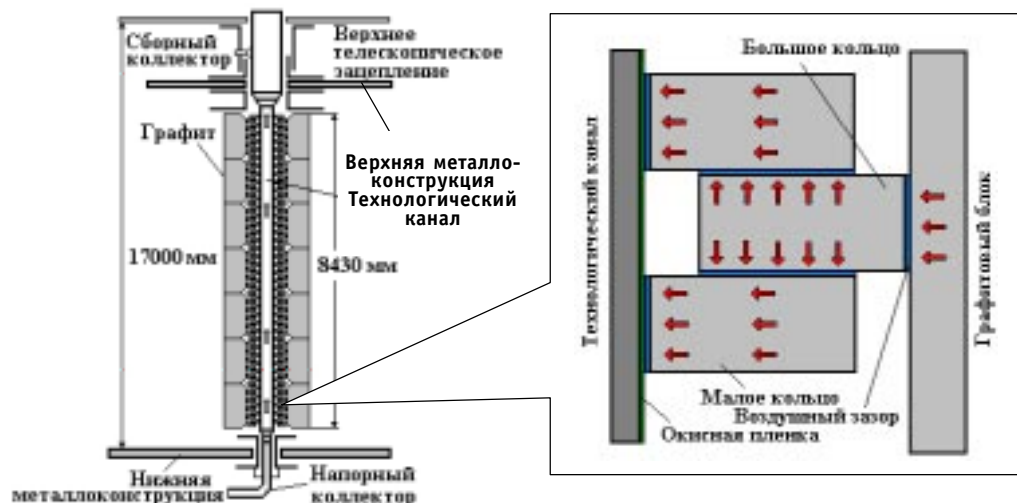


Рис. 1. Технологический канал ядерного реактора РБМК-1000

В цилиндрической системе координат эти уравнения будут иметь вид (уравнение количества движения в продольном (по потоку) направлении, записано с учетом силы плавучести, появляющейся из-за наличия продольного градиента температуры):

$$\frac{\partial}{\partial z}(r\rho U) + \frac{\partial}{\partial r}(r\rho V) = 0, \tag{2.1}$$

$$\rho \frac{\partial U}{\partial \tau} + \rho U \frac{\partial U}{\partial z} + \rho V \frac{\partial U}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_{\text{Ef}} \frac{\partial U}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu_{\text{Ef}} \frac{\partial U}{\partial r} \right] - \frac{\partial P}{\partial z} \pm \rho g \beta \Delta t \tag{2.2}$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial \tau} + \rho U \frac{\partial V}{\partial z} + \rho V \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_{\text{Ef}} \frac{\partial V}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu_{\text{Ef}} \frac{\partial V}{\partial r} \right] - \mu_{\text{Ef}} \frac{V}{r^2} - \frac{\partial P}{\partial z} \tag{2.3}$$

$$\rho c_p \frac{\partial t}{\partial \tau} + \rho U \frac{\partial t}{\partial z} + \rho V \frac{\partial t}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\mu_{\text{Ef}}}{Pr_t} \frac{\partial t}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{r \mu_{\text{Ef}}}{Pr_t} \frac{\partial t}{\partial r} \right] \tag{2.4}$$

$$\rho \frac{\partial k}{\partial \tau} + \rho U \frac{\partial k}{\partial z} + \rho V \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\mu_{\text{Ef}}}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{r \mu_{\text{Ef}}}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial r} \right] + G - \rho \varepsilon \tag{2.5}$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \rho U \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} + \rho V \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\mu_{\text{Ef}}}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{r \mu_{\text{Ef}}}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] - \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon) \tag{2.6}$$

$$G = \mu_{\text{Ef}} \left[2 \left\{ \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{V}{r} \right)^2 \right\} + \left\{ \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial V}{\partial z} \right\}^2 \right] \tag{2.7}$$

$$\mu_{\text{Ef}} = \mu_L + \mu_T = \mu_L + C_\mu \rho k^2 / \varepsilon \tag{2.8}$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial \delta} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ r \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\}. \tag{2.9}$$

Здесь z, r - продольная и поперечная координаты; λ - коэффициент теплопроводности; ρ - плотность; T - температура; c_p - теплоемкость; τ - время; U, V - продольные и поперечные составляющие скорости; k - кинетическая энергия турбулентности; ε - скорость диссипации; Pr_t - турбулентный аналог числа Прандтля; Pr_k - число Прандтля для кинетической энергии турбулентности; Pr_ε - число Прандтля для скорости диссипации кинетической энергии турбулентности; μ_{Ef} - эффективная вязкость; μ_L - молекулярная вязкость; μ_T - турбулентная вязкость; C_1, C_2, C_μ - константы (приведены в табл.1); G - функция генерации турбулентности.

Для связи между коэффициентом турбулентной вязкости с кинетической энергией турбулентности и скоростью ее диссипации использовалась гипотеза Колмогорова-Прандтля.

Поскольку при проведении численных расчетов в качестве теплоносителя был взят воздух, то влиянием силы тяжести пренебрегли.

Непосредственное численное решение системы уравнений (2.1)-(2.9) прово-

Таблица 1

C_1	C_2	C_μ	Pr_ε	Pr_k
1,44	1,92	0.9	1,22	1,0

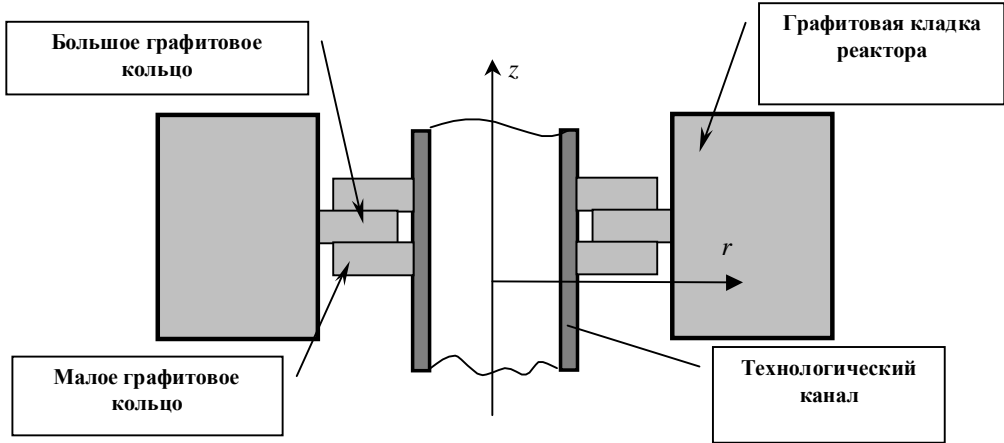


Рис. 2. Система координат расчетной области

дилось при помощи метода контрольного объема. Линеаризация конвективных слагаемых в уравнениях движения осуществлялась при помощи метода Ньютона. Для решения систем линейных уравнений использовалась неявная процедура (MSI), предложенная в работе [4]. Расчетная сетка в области течения теплоносителя формировалась со сгущением узлов в пристенной области. Система координат расчетной области приведена на рис.2.

Граничные условия для системы уравнений (2.1) – (2.6) задавались следующим образом

$$r=0 \quad \frac{\partial U}{\partial r} = \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad V=0 \quad (2.10)$$

$$r=r_{CT} \quad U=V=k=\varepsilon=0.$$

При постановке граничных условий для случаев непосредственного контакта ТК-графитовое кольцо, блок-графитовое кольцо необходимо учитывать неплотность прилегания этих элементов друг к другу. На рис.3 показана ситуация непосредственного контакта графит-графит с учетом воздушной прослойки.

Граничные условия для уравнения теплопроводности ставились следующим образом.

Для всех областей, где воздух непосредственно примыкает к графитовым кольцам или блоку, граничное условие имеет вид :

$$\lambda_B \frac{\partial t}{\partial z} = \lambda_{ГР} \frac{\partial t}{\partial z}, \quad (2.11)$$

где $\lambda_B, \lambda_{ГР}$ – коэффициенты теплопроводности воздуха и графита.

Для областей прямого контакта кольцо-кольцо (рис.3) граничное условие ставится с учетом наличия воздушной прослойки за счет неплотного примыкания

$$q = \frac{t_{CT1} - t_{CT3}}{\frac{\delta_{CT1}}{\lambda_{ГР}} + \frac{\delta_B}{\lambda_B}} = \lambda_{ГР} \frac{\partial t}{\partial z}. \quad (2.12)$$

В этом соотношении t_{CT1} – температура в некоторой точке графитового

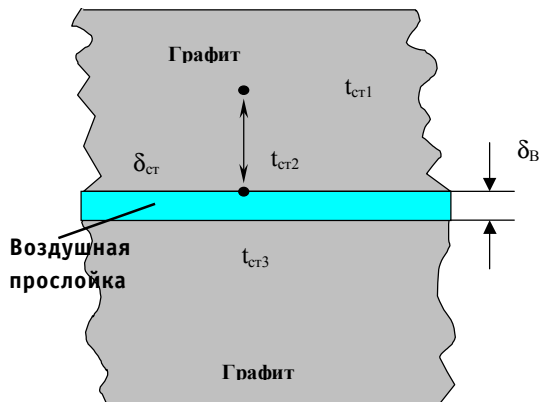


Рис. 3. К постановке граничного условия в месте контакта графит-графит; графит-технологический канал

кольца; δ_{CT1} – расстояние от точки с температурой t_{CT1} до места контакта с воздухом; δ_B – толщина воздушной прослойки; t_{CT3} – температура места контакта воздуха со вторым кольцом.

Для малых колец, примыкающих к технологическому каналу (рис.4), необходимо учитывать то обстоятельство, что кольцо соприкасается с ТК, во-первых, через воздушную прослойку, образующуюся за счет неплотного контакта между окисной пленкой и кольцом, а во-вторых, через окисную пленку сплава цирконий-ниобий. Граничное условие записывается следующим образом:

$$q = \frac{(t_{ГР} - t_{ТК})}{\frac{1}{\lambda_{ГР}} \ln \frac{r_3 + \delta_1}{r_3} + \frac{1}{\lambda_B} \ln \frac{r_3}{r_4} + \frac{1}{\lambda_{оп}} \ln \frac{r_4}{r_5}} = \lambda_{ТК} \frac{\partial t}{\partial r}. \quad (2.13)$$

Здесь $t_{ГР}$ – температура в некоторой точке графитового кольца; $r_3 + \delta_1$ – расстояние по радиусу до точки с температурой $t_{ГР}$; $\lambda_{оп}$ – коэффициент теплопроводности окисной пленки; $\lambda_{ТК}$ – коэффициент теплопроводности технологического канала; остальные обозначения как на рис.4. Для определения граничного условия на внутренней стенке канала необходимо учесть, что внутренняя стенка ТК омывается теплоносителем. При постановке граничного условия жидкость-стенка ТК использовалось условие равенства тепловых потоков, записанное при помощи законов Фурье и Ньютона-Рихмана. Средний коэффициент теплоотдачи определялся с помощью интеграла Лайона. Турбулентный аналог числа Прандтля в соответствии с рекомендациями работы [5] полагался равным 0.7 - для воздуха и 0.9 – для воды.

Граничное условие по всей высоте записывается следующим образом:

$$q = \frac{t_{CT} - t_{Ж}}{\alpha_T + \ln \frac{\delta_{оп}}{\lambda_{оп}}} = \lambda_{ТК} \frac{\partial t}{\partial r}. \quad (2.14)$$

Здесь α_T - коэффициент теплоотдачи теплоносителя.

Для больших колец, примыкающих к графитовому блоку (рис.5) граничное условие в месте контакта кольца с блоком ставится с учетом воздушной прослойки, образуя-

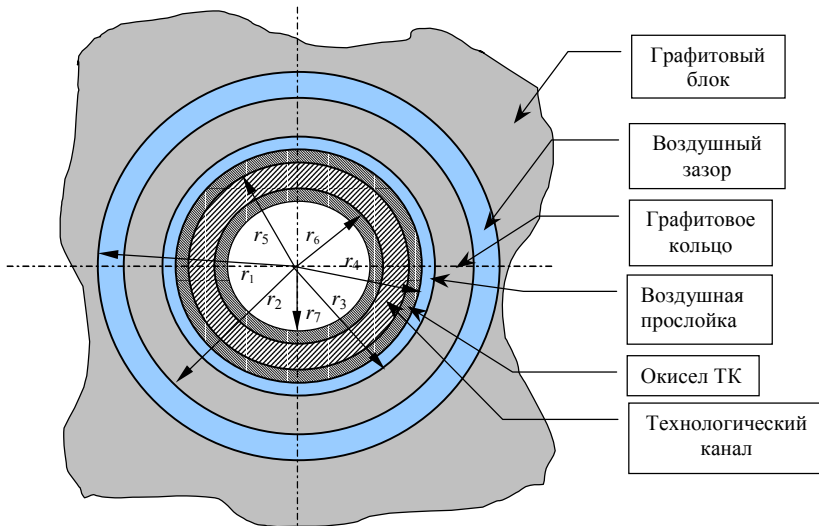


Рис. 4. Малое кольцо, примыкающее к технологическому каналу:
 r_1 – радиус отверстия в графитовом блоке; r_2 – внешний радиус ТК; r_3 – внутренний радиус графитового кольца; r_4 – внешний радиус окисной пленки (расположенной снаружи ТК); r_5 – внешний радиус ТК; r_6 – внутренний радиус ТК; r_7 – внутренний радиус окисной пленки (расположенной внутри канала)

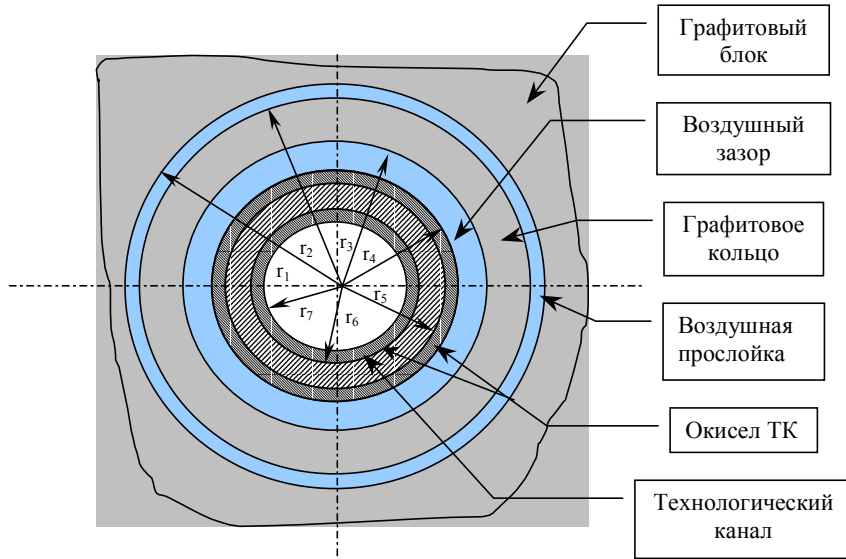


Рис. 5. Большое кольцо, примыкающее к графитовому блоку

щейся за счет неплотного примыкания одного к другому. Математическая форма записи граничного условия в этом случае аналогична соотношению (2.13). На рис.5 обозначения такие же, как и на рис.4.

Отметим, что при постановке граничных условий не учитывалось то обстоятельство, что графитовые кольца имеют разрез.

Численные расчеты проводились на сетке 150x150 узлов с затратами оперативной памяти ~ 65 Мбайт. Время счета одного типового варианта составляло в среднем 120-230 с., относительная точность расчета - 0,01%.

На рис.6 показано типичное распределение температуры в системе технологический канал – графитовый блок, полученное расчетным путем. При проведении расчета температура на входе в ТК полагалась равной 12°C, температура блока равнялась 65°C.

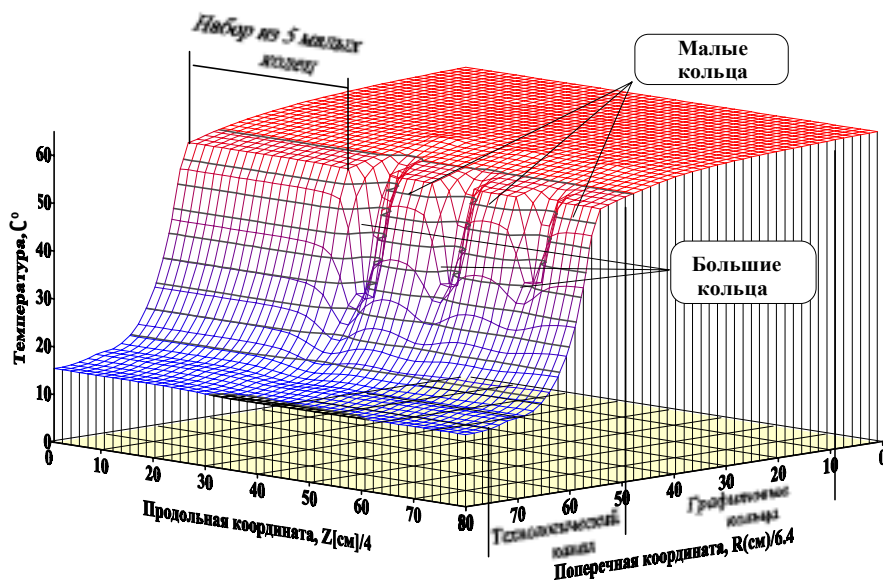


Рис. 6. Распределение температуры в системе ТК-графитовый блок

Подача теплоносителя - снизу вверх. Расчет проводился для 10 графитовых колец.

Из рисунка хорошо видно, что на прилегающих к ТК малых кольцах температура несколько выше, чем на больших. Интересно отметить, что в местах контакта графитовых колец с блоком поле температур остается равномерным. Проведенные расчеты подтверждают предположение о неравномерности распределения температуры по высоте технологического канала в условиях неравенства температур графитовой кладки и прокачиваемого теплоносителя.

Для экспериментальной проверки результатов, полученных расчетным путем, в лабораторных условиях была проведена серия модельных экспериментов, цель которых -

определить зависимость распределения температур на внутренней стенке циркониевой трубы (ТК) от расположения малых и больших графитовых колец и от несоосности ТК и графитового блока.

Экспериментальная установка (рис.8) представляет собой штатный графитовый блок со вставленным в него фрагментом технологического канала. Разогрев блока осуществляется при помощи электрического нагревателя мощностью 3.63 кВт, помещенного в керамические трубки, которые были закреплены на внешней поверхности блока, электропитание нагревателя - от автотрансформатора РНО-250-10. В нижней торцевой части фрагмента ТК было смонтировано устройство для подачи или отвода воды или воздуха.

Набор графитовых колец осуществлялся таким образом, чтобы смоделировать их



Рис. 7. Общий вид экспериментальной установки с термозондом №2

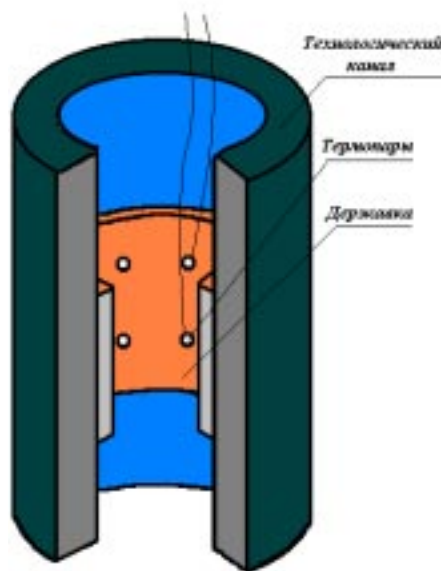


Рис. 8. Принципиальная схема термозонда №1 (разрез)



Рис. 9. Общий вид термозонда №2

предполагаемые дефекты на находящихся в эксплуатации реакторах РБМК.

Подача охлаждающего ТК воздуха осуществлялась со скоростью $4 \div 20$ м/с, что соответствует диапазону чисел Рейнольдса $1.7 \cdot 10^4 \div 4.2 \cdot 10^4$.

Для непосредственного измерения температуры стенки ТК были изготовлены два термозонда. Первый представлял собой полый цилиндр, сделанный из пресшпана, на котором в два ряда с шагом в 90° располагались восемь хромель-копелевых термопар (рис.8). Расстояние между верхним и нижним рядом составляло 2 см, что соответствует толщине графитового кольца.

Второй термозонд (рис.9) представлял собой систему вертикально расположенных стальных стержней, закрепленных на верхней и нижней фиксирующих шайбах, изготовленных из нержавеющей стали 12Х18Н10Т.

На каждом из восьми стержней с помощью специального поджимного устройства закреплялся термометр сопротивления типа ТСП-50. Поджимное устройство позволяло регулировать силу прижима термометров к внутренней стенке ТК. Для перемещения термозонда по высоте канала использовалась стальная штанга длиной 2.5 м.

При проведении измерений первым термозондом обработка сигналов, поступающих с термопар, осуществлялась по двум независимым каналам. По первому каналу выполнялось непосредственное измерение величины термоЭДС цифровым ампервольтметром с компенсацией температуры холодного спая с помощью сосуда Дьюара.

Второй канал состоял из восьми нормирующих усилителей типа НУ-04, 32-канальной платы АЦП PCL-813 фирмы ADVANTECH, включенной в шину ISA персонального компьютера. Подключение нормирующих усилителей осуществлялось по двухпроводной схеме.

Обработка сигнала со второго термозонда также осуществлялась с помощью АЦП, но в этом случае использовались нормирующие усилители типа ПРИНТ-17, включенные по четырехпроводной схеме.

С целью проверки предположения о наличии градиента температур между областями примыкания к ТК больших и малых колец с помощью первого термозонда были проведены измерения температуры по высоте фрагмента технологического канала. Опыты проводились при температуре блока $\approx 95^\circ\text{C}$ и сравнительно невысоких скоростях прокачки воздуха. На рис.10 представлены некоторые результаты этих измерений. Из рисунка видно, что в областях, где расположены большие кольца, наблюдается явно выраженное снижение температуры внутренней стенки ТК, а в местах контакта малых колец - ее увеличение.

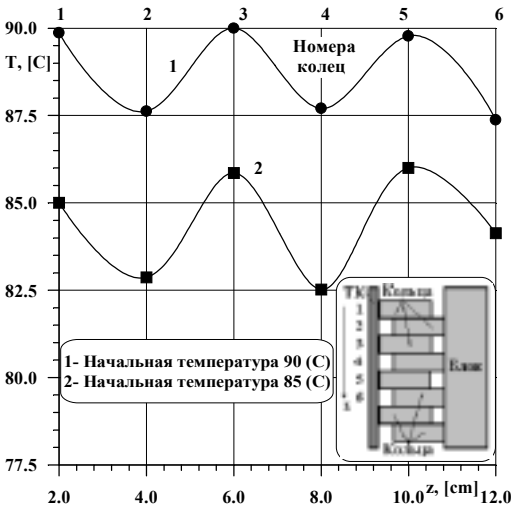


Рис. 10. Результаты измерения температуры по высоте ТК с нормальной укладкой колец

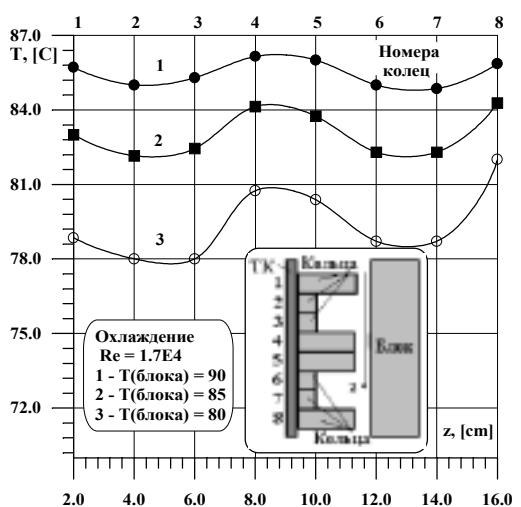


Рис. 11. Распределение температуры по высоте ТК с нарушением периодичности укладки

Таким образом, можно сделать вывод, что в случае, если графитовая кладка не имеет повреждений, то распределение температуры по высоте ТК должно иметь явно выраженную периодическую структуру и появление аperiodичности указывает на изменение величины газового зазора.

Опыты с нарушением периодичности укладки графитовых колец были выполнены с использованием первого термозонда. Укладка колец осуществлялась таким образом, чтобы смоделировать их частичное разрушение по окружности (в кольцах был выбран сегмент с углом раскрытия 157°). Результаты измерений для этого случая приведены на рис.11.

Хорошо видно, что области максимумов и минимумов в распределении температуры стали более протяженными, что также подтверждает предположение о зависимости температур на внутренней стенке ТК от расположения колец и величины газового зазора.

Измерения распределения температур по окружности ТК проводились в основном вторым термозондом и осуществлялись также с прокачкой воздуха. Графитовые кольца в центре блока укладывались с нарушением соосности между ТК и графитовым блоком. В точке 0° (рис.12) большие и малые кольца непосредственно соприкасались с графитовым блоком и внешней стенкой ТК. На рисунке показано характерное распределение температуры по окружности ТК в области большого кольца, расположенного на глубине 23 см от верхнего края блока при различных скоростях подачи охлаждающего воздуха. Температура блока в момент проведения эксперимента поддерживалась постоянной и равнялась 60°C . Из рисунка хорошо видно, что в месте наибольшего зазора наблюдается снижение температуры.

На рис.13 показаны распределения температур на внутренней стенке ТК для малого кольца с различными скоростями прокачки воздуха. Как и в предыдущем случае, в области максимального зазора имеется явно выраженный температурный минимум.

Сравнение графиков на рис.12 и 13 показывает, что в исследованном диапазоне чисел Рейнольдса температура в области большого кольца выше, чем в области малого кольца. Последнее обстоятельство можно объяснить изменением механизма перетечек тепла по графитовым кольцам. В рассматриваемом нами случае наибольшее количество тепла передается через область большого кольца вследствие его непосредственного примыкания к каналу и значительного увеличения величины газового зазора в точке 180° в области малого кольца.

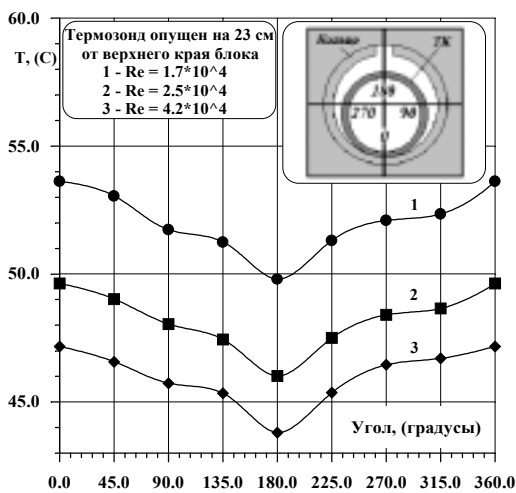


Рис. 12. Распределение температур в области большого кольца

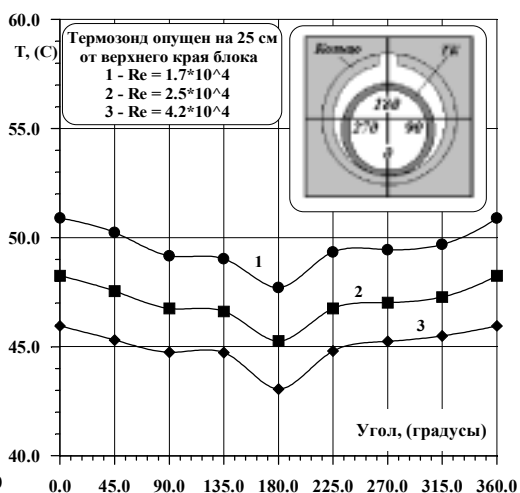


Рис. 13. Распределение температур в области малого кольца

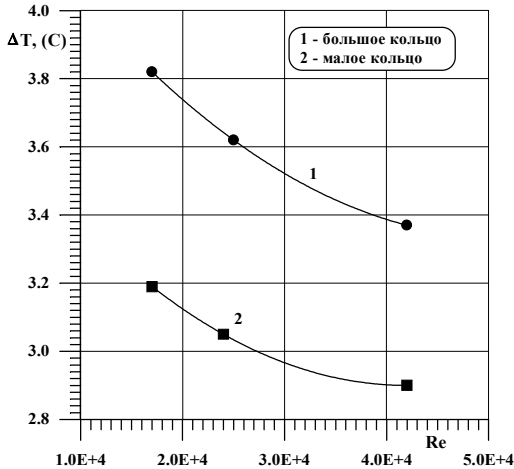


Рис. 14. Разность минимального и максимального значения температур для малого кольца

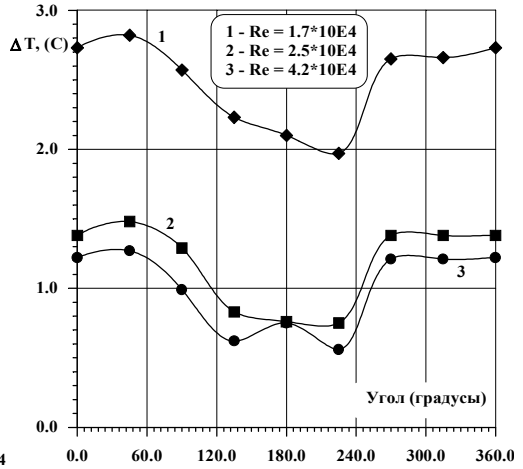


Рис. 15. Разность температур между большим и малым кольцами

Отметим, что разность температур между точками 0 и 180° с увеличением скорости прокачки воздуха начинает более слабо зависеть от числа Рейнольдса и асимптотически стремится к некоторому постоянному значению. Это особенно хорошо видно на примере малого кольца (рис. 14).

На рис.15 показана разность температур между большим и малым кольцами в зависимости от числа Рейнольдса. Хорошо видно, что при малых скоростях обтекания градиент температур увеличивается. Уменьшение градиента температур при больших значениях числа Рейнольдса можно объяснить тем, что коэффициент теплопроводности теплоносителя достаточно мал в рабочем диапазоне температур. Его величина для 30÷90°C и давлении 101.3 кПа составляет $\lambda=26.8 \cdot 10^{-3} \div 31.3 \cdot 10^{-3}$ Вт/(м·К) и теплоноситель за время прохождения рабочего участка стенда не обеспечивает необходимый для появления большого градиента температур унос тепла. Это указывает на то обстоятельство, что при проведении натурных экспериментов на АЭС с РБМК необходимо таким образом отрегулировать расход теплоносителя, чтобы обеспечить наибольшую разность температур между соседними кольцами.

Таким образом, результаты проведенных экспериментов указывают на однозначное соответствие распределения температур на внутренней стенке ТК периоду расположения больших и малых колец и их взаимоположению относительно стенок ТК.

Однако для количественной оценки величины зазора на действующем реакторе необходимо уточнение существующих и постановка дополнительных граничных условий.

Ряд граничных условий, подлежащих уточнению, может быть получен с учетом геометрических параметров конкретного ТК и ячейки графитовой кладки. К таким параметрам, доступным для измерений, относятся:

- внутренний диаметр ТК;
- толщина стенки ТК;
- кривизна ТК;
- наличие разреза заданной геометрии на больших и малых кольцах;
- наличие фасок на стыках между графитовыми блоками.

Дополнительные граничные условия будут обусловлены неравномерностью распределения поля температур по радиусу и высоте активной зоны реактора.

Список литературы

1. Белянин Л.А., Лебедев Ю.В. и др. Безопасность АЭС с каналными реакторами. Реконструкция активной зоны. - М.: Энергоатомиздат, 1997.

2. *Chang K. C., Cebeci T.* Numerical aspects of turbulence models. – Intern. Symp. Comput. Fluids Dynamics, Tokyo, 1985. – Prep. Vol. 2. - P.538-549.
3. Турбулентность. Принципы и применения: /Под ред. У. Фроста и Т. Моулдена. – М.:Мир, 1980.
4. *Schneider G. E., Zedan M.* A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems. Numerical Heat transfer, 1981. – V.4. - P.1-19.
5. *Галин Н.М., Кириллов П.Л.* Тепло-массообмен (в ядерной энергетике). - М.: Энергоатомиздат, 1987.

Поступила в редакцию 14.05.99.

Я Д Е Р Н Ы Е В Е С Т И И З П А У Т И Н Ы

Материалы агентства NucNet (июнь 1999 г.) (<http://www.aey.ch/nucnet>)

НАТО боится ядерной Югославии?

19 апреля пресс-секретарь МАГАТЭ заявил в интервью тележурналистам, что у агентства нет никаких оснований подозревать, что Югославия приступила к разработке ядерного оружия. Это заявление было сделано в ответ на обвинения, прозвучавшие в американской прессе. Пресс-секретарь признал, что с момента начала боевых действий в Югославии экспертам МАГАТЭ не предоставлялась возможность провести проверку белградского реактора VINCA, однако, по его мнению, переделка этого аппарата для военных целей вряд ли возможна.

В Югославии существует единственный ядерный институт (VINCA), расположенный в пригороде Белграда. Институт основан 21 января 1948 г. сначала только как Физический институт. С 1953 г. институт получает статус ядерного центра. Нынешнее имя (VINCA) институту присвоили 1 января 1992 г.

Первый реактор (R-A) в институте – критическая нулевой мощности – был пущен в 1958 г. Вторым реактор, R-B работал с 1959 по 1984 гг. Реактор R-B – это тяжеловодный аппарат мощностью 6,5 МВт. В качестве топлива использовался обогащенный до 80% уран советского производства; в активную зону загружалось до 9,5 кг урана. Реактор использовался для производства радиоизотопов и для экспериментов в области физики твердого тела. Оба аппарата – как R-A, так и R-B – находятся под контролем МАГАТЭ.

Тем не менее, страны НАТО выражают серьезную озабоченность по поводу возможного желания Югославии создать собственное ядерное оружие. Запад считает, что в Белграде до сих пор хранится около 60 кг урана 80-процентного обогащения. Сотрудники VINCA неоднократно предупреждали через сербские и российские узлы о существовании планов альянса по бомбардировке института. Одна из ракет НАТО упала на расстоянии всего лишь нескольких километров от площадки реактора R-A.

Обзор подготовлен по материалам, опубликованным на узле FAS (Федерации американских ученых).

- Большинство шведов остаются приверженцами ядерной энергетики. По данным последних социологических опросов, 82% жителей Швеции выступают против закрытия собственных АЭС. Примерно четверть северян, кроме того, поддерживает идею о строительстве новых атомных энергоблоков в королевстве. В то же время Верховный Суд страны отклонил иск энергетической компании “Сидкрафт” к правительству, требовавший отмены решения о закрытии АЭС “Барсебек”.
- Германская компания “Сименс КВУ” объявила о планах сократить 1200 рабочих мест.

Новости от Курчатовского центра (<http://www.kiae.ru/rus/new/nti/novosti.htm>)

Апрель 1999 г.

10 лет исполнилось Ядерному обществу России (ЯОР).

Отработавшее топливо восточно-европейских исследовательских реакторов советской постройки должно быть возвращено в Россию, декларируется в специальном заявлении ЯОР. Как утверждает, Западная Европа и МАГАТЭ готовы оплатить транспортировку такого топлива до завода по переработке или длительного хранения. В заявлении не фигурирует слово “Югославия”, но направленность его очевидна...

Европейские фирмы выступают как посредники между США и Россией в контракте на продажу российского оружейного урана. Наличие посредников потребовалось из-за отсутствия соглашения между Москвой и Вашингтоном о торговле радиоактивными материалами.

Май 1999 г.

Иран официально предложил Минатому РФ принять участие в строительстве второго блока АЭС “Бушер”. Узел публикует историческую справку о развитии отношений в сфере мирного атома между Россией и Ираном. Особо отмечается, что Иран является членом договора о нераспространении ядерного оружия, а его ядерная программа поставлена под контроль МАГАТЭ, т.ч. возражения США против строительства АЭС “Бушер” выглядят весьма неубедительно.

Кубинская АЭС “Хурагуа” с двумя реакторами ВВЭР-440 также будет достроена российскими специалистами. MOX-топливо должно использоваться в канадских реакторах – такую точку зрения высказало правительство этой страны.

4-й блок (CANDU-6) АЭС “Вольсун” (Корея), который достиг критичности 10 апреля с.г., в мае подключен к электросети. В июне он выйдет на полную мощность (N = 650 МВт(э)), а в сентябре планируется ввод блока в коммерческую эксплуатацию.

УДК 539.1.04:669.017.3

КЛАСТЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ В ГЦК МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВЫСОКИХ УРОВНЯХ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ

В.С.Хмелевская, Н.В.Куликова, А.В.Накин, В.Г.Малынкин

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск

Р

Показано, что в различных материалах (сплавах на основе Fe-Ni-Cr, Ni-Cr, Fe-Cr, V-Ti-Cr, а также в чистых металлах Zr и Ti) при взаимодействии с ионным излучением возникают особые неравновесные состояния со следующими признаками: существенное изменение рентгеновской дифракционной картины (расщепление пиков дифрактограммы); необычная морфология - появление в структуре малых кластеров; сильное (в несколько раз) повышение микротвердости. Предложена модель локальной перестройки кристаллической решетки в окрестности вакансии, при которой образуется атомная группа и далее малый кластер икосаэдрической симметрии. Компьютерный эксперимент показывает, что при таком преобразовании появляется бимодальное распределение длин ребер полиэдра, это должно привести к расщеплению дифракционных пиков. Сильное упрочение, наблюдаемое в области существования неравновесных состояний, по-видимому, также связано с перестройкой структуры - металлическая матрица оказывается армированной кластерами с иной симметрией.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование взаимодействия излучения с веществом является основой прогнозирования поведения материалов в радиационном поле и их эксплуатационных характеристик. Между тем, существующие модели такого взаимодействия являются в значительной мере упрощенными и оказываются не в состоянии описать многие радиационно-индуцированные процессы и возникающие при этом неравновесные состояния вещества. Особенно это относится к состояниям, формирующимся при высоких уровнях радиационного повреждения. Так, например, ранее авторы данной работы наблюдали возникновение специфических радиационно-индуцированных неравновесных состояний в большой группе металлических материалов - сплавов (преимущественно твердых растворов), принадлежащих системам Fe-Ni, Fe-Cr-Ni, Ni-Cr, Cu-Ni, Fe-Cr, V-Ti-Cr, а также в чистых металлах - Zr и Ti [1-3]. Данные состояния появлялись в узком интервале радиационных параметров (доз, температур облучения и интенсивностей потока) и имели универсальные свойства для различных материалов (с ГЦК, ОЦК и ГПУ кристаллическими решетками) и при разных способах облучения (в ионном ускорителе, при облучении стационарной или импульсной плазмой), причем в случае изменения приро-

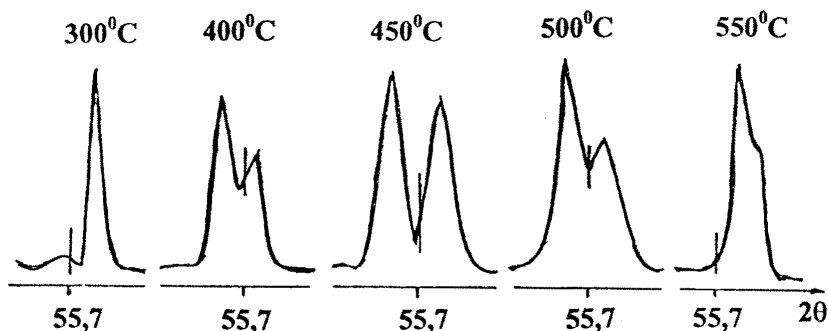


Рис.1. Дифракционные линии (111) в сплаве Fe-Cr-Ni, облученном (Ar+, 20кэВ, $1,5 \cdot 10^{18}$ ион/см²) при различных температурах

ды или энергии иона свойства состояний не изменялись, однако интервал их существования сдвигался по шкале радиационных параметров.

Главные свойства обнаруженных неравновесных состояний следующие:

- существенное изменение рентгеновской дифракционной картины, указывающее на появление гетерофазности в ранее однофазной и равновесной системе;
- неравновесный характер состояния - оно разрушается при температурах, не превышающих температуры облучения;
- формирование необычной морфологии структуры;
- сильные изменения свойств ионной и электронной подсистем твердого тела в области существования неравновесного состояния [3].

Характерным признаком возникновения данного состояния, позволяющим его распознать и идентифицировать, являются существенные дифракционные изменения, в частности, расщепление линий дифрактограммы на два пика (рис.1). Видно, что расщепление возникает в достаточно узком интервале радиационных параметров - в данном случае, температур облучения, задаваемых облучающим устройством.

Морфология материала также изменяется - формируется кластерная структура (пример такой структуры показан на рис.2). Видно, что кластеры занимают значительную долю радиационно-поврежденного объема, причем размер кластера составляет примерно 30-40 А.

Сильно изменяются также макросвойства материала, в частности, его микро-

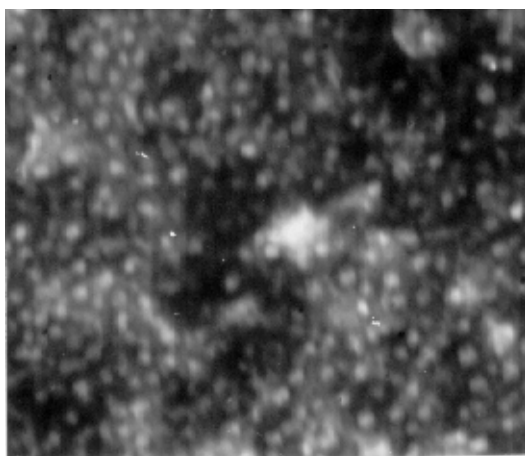


Рис.2. Кластерная структура в облученном сплаве Fe-Cr-Ni

твердость (рис.3) - эти изменения коррелируют с дифракционными эффектами, т.е. максимальная микротвердость соответствует температуре облучения, при которой расщепление линий дифрактограммы является максимальным.

В данной работе предлагается модель локальной перестройки кристаллической решетки, приводящая к наблюдаемым дифракционным эффектам и изменениям структуры и свойств, а также приводятся результаты компьютерных экспериментов, находящиеся в качественном согласии с экспериментальными фактами.

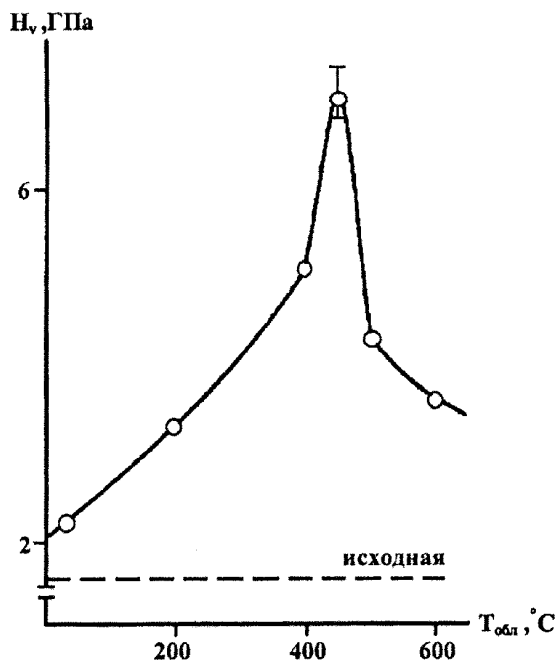


Рис.3. Изменения микротвердости в сплаве Fe-Cr-Ni, облученном при различных температурах

МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ГЦК-РЕШЕТКИ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТА

Обычно считают, что кристаллическая решетка в окрестности вакансии остается неизменной и лишь слегка искажается. В рамках данной модели предполагается, что в действительности происходит локальная перестройка решетки, в результате которой координационный полиэдр (кубооктаэдр) преобразуется в икосаэдр - многогранник с пятерной симметрией. В [4] описано подобное преобразование, при котором происходит вращение треугольных граней {111} полиэдра вокруг нормальных к ним кристаллографических направлений $\langle 111 \rangle$ на $22,24^\circ$.

Возможны также и другие схемы перестройки кристаллической решетки. В результате образуется атомная икосаэдрическая группа, которая в результате укладки последующих слоев может расти, образуя малый кластер с симметрией, отличной от матрицы.

Стимулом подобной перестройки может быть то обстоятельство, что икосаэдрическая симметрия, запрещенная в обычной кристаллической решетке и не позволяющая транслировать элементарную ячейку, в малых кластерах дает возможность заполнения пространства с большой плотностью (77%), что выше, чем в самой плотной металлической решетке (74%). В этом случае может быть частично компенсирован дефект плотности, связанный с вакансией.

Работы последних лет [5,6] показали, что подобная трансформация для малых кластеров в материалах с ГЦК-структурой наблюдается достаточно часто. Более того, в работе [7] показано, что присутствие вакансии в центре икосаэдра может стабилизировать кластер, а изменение свободной энергии, связанное с такой вакансией, становится отрицательным.

Если предположить, что электронно-микроскопически наблюдаемые нами кластеры (рис.2) являются именно такими группами икосаэдрической симметрии, то в этом случае может быть предложено следующее объяснение изменениям картины рентгеновской дифракции и свойств материала. Сами кластеры из-за своей малости не дают самостоятельной дифракционной картины, соответствующей измененной симметрии решетки. Однако в процессе преобразования кубооктаэдр - икосаэдр, а также при дальнейшем формировании икосаэдрического кластера возникают деформации ребер полиэдра. В результате в радиационно-поврежденном объеме мы будем встречать одну и ту же атомную связь (ребро полиэдра), деформированную - в икосаэдрическом кластере и недеформированную - в матрице. Такое бимодальное распределение длин связи должно привести к расщеплению соответствующих дифракционных линий. Кроме того, материал оказывается армированным кластерами иной симметрии, что должно привести к изменению

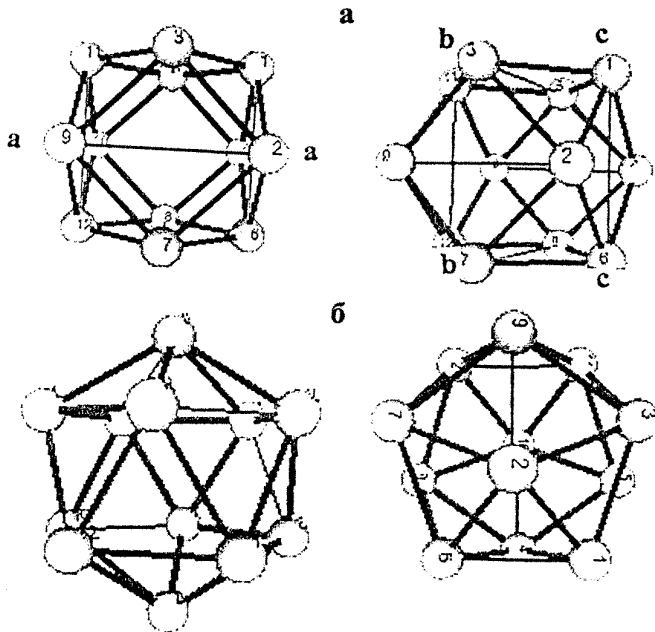


Рис. 4. Схема преобразования координационного полиэдра в ГЦК-структуре (кубооктаэдр - икосаэдр). Исходный кубооктаэдр (а) плавно деформируется вдоль трех различных направлений совокупности $\langle 100 \rangle$ (показаны буквами aa,bb,cc); 4б - икосаэдр в двух проекциях.

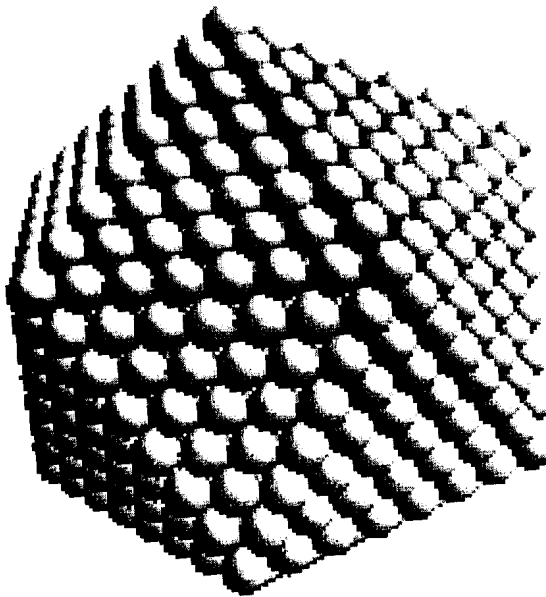


Рис.5. Кластер икосаэдрической симметрии, состоящий из семи слоев

ребра полиэдра в процентах к исходному значению, а также относительное число направлений совокупности, вошедшее в группу с данной деформацией.

Измерялись деформации для икосаэдра, а также для кластера (рис.5) из семи последовательных слоев (общее число атомов - 1414). Поскольку деформации однотипны для всех четных и нечетных слоев, в таблице показаны результаты для первого, а также для шестого и седьмого слоев. При формировании кластера ато-

свойств ионной и электронной подсистем твердого тела.

РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе преобразование координационного полиэдра кубооктаэдр - икосаэдр реализовано несколько другим путем, чем в работе [4], результаты данного преобразования показаны на рис.4а и 4б. Плавно выполнена одновременная деформация вдоль трех различных направлений типа $\langle 100 \rangle$ (выделены на рисунке). При этом фиксировались изменения длин для различных совокупностей кристаллографических направлений, в частности, для направлений типа $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$.

На данном этапе исследования использовался прямоугольный потенциал - жесткие шарики - для качественной оценки результатов преобразования.

В результате преобразования все совокупности кристаллографических направлений разбились на группы, причем для разных групп наблюдаются деформации разного знака, а некоторые из направлений не изменили свою длину после преобразования. Результаты измерений показаны в табл.1. Указана деформация

мы данного слоя касались друг друга, а при наложении последующих слоев они деформировались, “проникая” друг в друга примерно на пять процентов, что находится в качественном согласии с результатами работы [4].

Видно, что, действительно, в результате преобразования кубооктаэдр - икосаэдр совокупности направлений разбиваются на две группы, а это должно привести к расщеплению соответствующего дифракционного максимума.

Данный эффект максимален для направления <100> и является наименьшим для направления <110>. Такой результат согласуется с результатами структурных экспериментов, выполненных нами ранее для облученного монокристалла Fe-Ni [8]. При облучении образца монокристалла Fe-Ni вдоль различных кристаллографических направлений во всех случаях соответствующие линии дифрактограммы оказывались расщепленными, однако при этом наибольший эффект расщепления наблюдался нами для направления <100>, наименьший - для направления <110>. В табл.2 показаны изменения периода решетки, подсчитанные по величине расщепления рентгеновских линий. Видно, что эти изменения для направления <100> для всех доз превосходят изменения для направления <110> не менее, чем в два раза.

Таблица 1

Деформация ребер полиэдра при трансформации кубооктаэдр-икосаэдр для различных совокупностей кристаллографических направлений <100>

Число уровней - 1, число атомов - 12

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
12,597	50
41,424	50

Число уровней - 7, число атомов - 1414

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
-18,351	19
-12,597	20
-2,476	37
-41,424	29

<110>

Число уровней - 1, число атомов - 12

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
0,000	67
5,147	33

Число уровней - 7, число атомов - 1414

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
-27,539	8
0,000	51
5,147	41

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено сравнение результатов структурного исследования неравновесного радиационно-индуцированного состояния в металлических материалах и результатов компьютерного эксперимента, описывающего формирование кластер-

Таблица 2

Разность периодов решетки ($\Delta a \times 10^2$ А), соответствующая расщеплению дифракционных линий, при облучении вдоль различных кристаллографических направлений

Доза, ион/см ²	<111>	<110>	<100>
$1 \cdot 10^{17}$	1,0	0,8	2,4
$5 \cdot 10^{17}$	0,8	1,1	1,7
$1 \cdot 10^{18}$	0,9	0,9	1,9

ной структуры после облучения. Получено качественное согласие, позволяющее продвинуться в понимании взаимодействия излучения с веществом и природы образующихся неравновесных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Khmelevskaya V.S. and Malynkin V.G.* // Phase Transitions.- 1997. - V.60.- P.59-60.
2. *Khmelevskaya V.S., Kraposhin V.S. and Malynkin V.G.* // Int.Journ.Non-Equilibrium Processing.- 1998. - V.10. - № 3/4. - P.323-331.
3. *Хмелевская В.С., Малынкин В.Г.* // Материаловедение. - 1998. - №2. - С.25-33.
4. *MacKay A.L.* Acta Cryst. - 1962. - V.15. - P. 916-918.
5. *Howie A. and Marks L.D.* //Philos.Mag.- 1984.- V. A 49. - P.95-101.
6. *Reinhard D., Hall B.D., Ugarte D., Monot R.* // Phys.Rev. B. - 1997. - V.55.- №12.- P. 7868-7881.
7. *Morret C., Treglia G., Legrand B.* // Surface Science.- 1997.- V. 383.- P.L719-L727.
8. *Хмелевская В.С., Малынкин В.Г., Кудря Е.В.* //Вопр.ат. науки и тех. Сер.:ФРП и РМ. - 1989. - Вып. 3(50).- С. 58-61.

Поступила в редакцию 23.05.99.

УДК 539.163.517.91

СПРАВОЧНО-ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА “ТРАНСМУТАЦИЯ НУКЛИДОВ В ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРАХ”

В.И. Пляскин, Р.А. Косилов

Обнинский институт атомной энергетики, г.Обнинск



Приводится описание справочно-информационной системы (СИС), дающей возможность на ПЭВМ выполнять расчеты трансмутации нуклидов в ядерных реакторах. Предложенные алгоритмы расчета основных параметров трансмутации нуклидов в реакторе, основанные на направленном графе превращений нуклидов, позволили повысить скорость вычислений. Расчеты выполняются с помощью новейших баз данных по ядерно-физическим константам, что повышает надежность получаемых результатов.

ВВЕДЕНИЕ

Под воздействием нейтронного облучения изменяется нуклидный состав материалов. Задача расчета этих изменений, именуемых трансмутациями, возникает в широком круге теоретических исследований и практических работ, связанных с ядерными реакторами. В частности, при облучении мишеней для получения радионуклидов.

Созданная справочно-информационная система (СИС) дает возможность выполнять расчеты трансмутации нуклидов в ядерных реакторах с помощью ПЭВМ. Для расчета трансмутаций нуклидов в ядерных реакторах необходимо знание сечений для тепловых нейтронов, резонансных интегралов, факторов Вескотта. Нами [1] была выполнена новая оценка этих величин, учитывающая все современные данные. В созданной СИС расчеты выполняются на основе ядерно-физических констант этой новой оценки, что повышает надежность получаемых результатов.

Решение задачи по расчету трансмутаций включает в себя следующие этапы:

- составление схемы нуклидных превращений в результате реакций, вызываемых нейтронами реактора, и распадом радионуклидов;
- определение скоростей всех рассматриваемых каналов нуклидных превращений;
- расчет спектров излучений как отдельного нуклида, так и всего вещества в целом на заданный момент времени;
- определение оптимальных режимов облучения образца.

В общем случае, расчет параметров трансмутации вещества произвольного состава в ядерном реакторе является сложной и ресурсоемкой задачей даже для современных ЭВМ, т.к. требует одновременного решения пространственно-энергетической задачи и задачи выгорания нуклидов. В работе [2] теория, лежащая в основе расчетов трансмутации нуклидов в реакторе, представлена достаточно полно, но предложенные алгоритмы расчетов сложны и времязатратны, что делает их малоприменимыми для широкого круга прикладных задач.

© ***В.И. Пляскин, Р.А. Косилов, 1999***

Ниже представлены алгоритмы расчета основных параметров трансмутации веществ в ядерном реакторе, в основе которых лежат расчеты по графу превращений нуклидов. Указанные алгоритмы были использованы в расчетной части справочно-информационной системы.

ПОСТРОЕНИЕ ЦЕПОЧКИ ТРАНСМУТАЦИИ

В общем случае, задача построения схемы трансмутации вещества произвольного состава при облучении потоком нейтронов формулируется следующим образом: пусть задан состав вещества мишени в виде набора составляющих его нуклидов (с указанием концентрации каждого нуклида) и поток нейтронов. Необходимо определить наиболее значимые нуклиды-продукты ядерных реакций и построить схему взаимного превращения нуклидов.

Заметим, что результирующая схема представляет собой направленный граф, вершинами которого являются нуклиды, а ребра соответствуют превращениям нуклидов в процессе ядерных реакций.

Будем представлять граф в виде списка вершин, для каждой из которых приводится список дочерних вершин (т.е. нуклидов, образующихся из данного, в результате ядерной реакции). Тогда алгоритм построения графа можно записать следующим образом:

- 1). Первоначально список вершин пуст.
- 2). Для каждого нуклида I из состава вещества мишени выполняется рекурсия:
 - нуклид I добавляется в список вершин графа, если нуклид уже содержится в списке, то построение заканчивается, и происходит возврат к предыдущему шагу рекурсии;
 - для нуклида I строится список дочерних нуклидов;
 - если список дочерних нуклидов пуст, то построение заканчивается, и происходит возврат к предыдущему шагу рекурсии;
 - иначе, п. 2.1-2.4 выполняются для каждого нуклида из списка дочерних.
- 3). Получен полный список вершин графа.

В результате построения получается список вершин графа и списки дочерних нуклидов для каждой вершины. Таким образом полностью определяется направленный граф, соответствующий цепочке трансмутации вещества мишени. Особенностью данного графа является то, что он может иметь более одной вершины-источника (т.е. вершины, не являющейся дочерней ни для одной другой вершины в графе), а также граф может иметь циклы, содержащие две и более вершины.

Особое внимание следует обратить на следующее обстоятельство: список дочерних нуклидов для заданного нуклида I строится на основе информации о протекающих ядерных реакциях. Для случая трансмутации нуклида в реакторе учитывается информация о реакциях, вызванных потоком нейтронов, а также информация о радиоактивном распаде нуклида. При полном учете всех возможных реакций список вершин графа может содержать до нескольких сотен вершин, что несет избыточную информацию для большинства прикладных задач и приводит к неоправданной трате вычислительных ресурсов. Поэтому при построении списка дочерних нуклидов необходимо учитывать информацию о скоростях соответствующих реакций. В представленной СИС, при построении списков дочерних нуклидов учитывались следующие факторы:

- список дочерних не строился для нуклидов, у которых полная скорость уничтожения нуклида не превышала величины $(10 \cdot \ln 2) / T_p$, где T_p - время расчета (расчет производится на промежутке $[0, T_p]$);

- полный список дочерних нуклидов каждой вершины сортировался с учетом убывания скорости реакции.

Эти действия позволили сократить полное число вершин графа до десятков, что существенно сократило время расчетов основных характеристик процесса трансмутации, не влияя заметным образом на точность расчетов.

РАСЧЕТ ЧИСЛА ЯДЕР И АКТИВНОСТИ НУКЛИДОВ ЦЕПОЧКИ

Временные характеристики процессов трансмутации нуклидов в реакторе обусловлены скоростями, происходящих при этом ядерных реакций. Под скоростью реакции S_n^i превращения нуклида i в нуклид n понимается доля ядер нуклида i , превратившихся в нуклид n в единицу времени.

Для процессов радиоактивного распада скорость $S_n^i = k_n^i \lambda_i$, где λ_i - постоянная распада нуклида i ; k_n^i - доля радиоактивного распада нуклида i , приводящая к образованию нуклида n в общем числе радиоактивных превращений нуклида i .

Для реакций, вызываемых нейтронами, скорость реакции S_n^i зависит от свойств ядра i и спектра нейтронов. Далее в данной работе используется двучленное представление $S_n^i = s_n^i F_T + I_n^i F_P$, где s_n^i , I_n^i - эффективное тепловое сечение и резонансный интеграл соответствующей реакции, а F_T , F_P - плотности потоков тепловых и резонансных нейтронов соответственно.

Пусть x_n - количество ядер нуклида n . Уравнения, описывающие изменение во времени величины x_n , получаются из условия баланса и имеют вид:

$$\left\{ \frac{dx_n}{dt} = \sum_{i \neq n} S_n^i x_i - S_n x_n, \quad n = 1..N, \right. \quad (1)$$

где N - общее число нуклидов в цепочке трансмутации; x_n - число ядер нуклида n ; S_n - полная скорость уничтожения нуклида n ; S_n^i - скорость образования нуклида n из нуклида i .

Очевидно, что полная скорость уничтожения S_n определяется соотношением:

$$S_n = \sum_i S_i^n,$$

где суммирование производится по всем продуктам ядерных реакций нуклида n .

Следует обратить внимание на то, что величина x_n может носить различный физический смысл. Размерность и физический смысл x_n зависят от выбранной нормировки: если под x_n просто число ядер нуклида n , то x_n - безразмерно; если x_n - плотность числа ядер то размерность $x_n = [\text{см}^{-3}]$. В данной работе принимается, что x_n - число ядер нуклида n в расчете на 1г вещества мишени. В этом случае x_n имеет размерность $x_n = [\text{г}^{-1}]$.

Исходя из выбранной нормировки, начальные условия для задачи трансмутации записываются в виде:

$$x_i(0) = \begin{cases} x_{i,0}, & \text{если нуклид } i \text{ содержится в исходном веществе} \\ 0, & \text{если нет,} \end{cases} \quad (2)$$

где $x_{i,0}$ - число ядер нуклида i в 1 г вещества мишени в начальный момент времени.

Для широкого круга прикладных задач начальные данные для расчетов удобнее задавать в виде концентрации нуклида или целого химического элемента в составе мишени. В этом случае начальные значения числа ядер отдельных нуклидов в задаче трансмутации могут быть получены как:

а) если задана концентрация конкретного нуклида i в мишени, то $x_{i,0} = \eta_i / 100 \cdot N_A / A_i$, где η_i - концентрация нуклида i в составе мишени (в %); A_i - атом-

ная масса нуклида i ; N_A - число Авогадро;

б) если задана концентрация целого химического элемента k , то:

- в состав мишени автоматически включаются все нуклиды, содержащиеся в естественной смеси нуклидов химического элемента k ;

- для каждого такого нуклида $x_{i,0} = h_k / 100 \cdot \eta_i^k / 100 \cdot N_A / W_i$, где η_k - концентрация химического элемента k в составе мишени (%); h_i^k - содержание нуклида i в естественной смеси нуклидов элемента k ; W_i - средняя атомная масса элемента k .

В общем случае, решение задачи (1),(2) требует больших затрат времени и вычислительных ресурсов, т.к. скорости реакций S_n^i непостоянны и имеют сложную зависимость от всех x_n . Простейшим случаем задачи (1),(2) является тот, когда схема превращений нуклидов представляет собой линейную цепочку. При этом общая задача (1),(2) может быть преобразована к виду:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -S_1 x_1 \\ \frac{dx_n}{dt} = S_n^{n-1} x_{n-1} - S_n x_n, \quad n = 2..N \end{cases} \quad (3)$$

с начальными условиями:

$$\begin{cases} x_1(0) = x_{1,0} \\ x_n(0) = 0, \quad n = 2..N \end{cases} \quad (4)$$

Задача (3),(4) имеет простое аналитическое решение:

$$\begin{cases} x_1(t) = x_{1,0} \exp(-S_1 t) \\ x_n(t) = x_{1,0} S_1^{n-1} \sum_{j=1}^n \frac{\exp(-S_j t)}{\prod_{k \neq j} (S_k - S_j)}, \quad n = 2..N \end{cases} \quad (5)$$

В настоящей работе предлагается алгоритм решения общей задачи (1),(2) в основе которого лежит использование описанного ранее направленного графа, представляющего схему превращений нуклидов в процессе трансмутации и построенного исходя из начальных условий (2) задачи.

Имея направленный граф превращений, число ядер x_n конкретного нуклида n в момент времени T может быть получено как:

$$x_n(T) = \sum_l x_n^{(l)}(T),$$

где суммирование производится по всем линейным цепочкам, приводящим от нуклидов исходной мишени к нуклиду n . Получение списка всех указанных линейных цепочек по графу превращений не представляет сложной задачи.

Для нахождения $x_n^{(l)}(T)$ используется задача (3),(4). Для учета изменения скоростей реакций в процессе трансмутации, решение задачи (3),(4) производится путем разбиения отрезка расчета $[0, T]$ на ряд интервалов, на которых значения скоростей считаются постоянными. Тогда на каждом из интервалов решение находится по формулам (5), при этом значения скоростей реакций считаются равными своим значениям на момент начала интервала.

Выбор числа интервалов разбиения зависит от динамики изменения скоростей реакций в процессе трансмутации. Для большинства практических задач, таких как получение радионуклидов в реакторах или облучение мишеней в постоянном по-

токе нейтронов, изменение скоростей реакций за время расчета происходит достаточно плавно и количество интервалов разбиения отрезка расчета можно выбрать постоянным (например 100). Кроме упрощения расчетов, такой выбор количества интервалов разбиения позволяет избежать проблем согласования, т.к. разбиение получается одинаковым для всех выделяемых линейных цепочек, а значения скоростей реакций, как уже отмечалось, зависят от всех нуклидов, участвующих в процессе трансмутации.

Итак, с учетом приведенных выше замечаний, решение задачи (1),(2) может быть получено по следующему алгоритму:

- 1) отрезок расчета $[0, T]$ разбивается на 100 интервалов;
- 2) для каждого нуклида, участвующего в процессе трансмутации, по направленному графу превращений строится список линейных цепочек его получения;
- 3) для каждого интервала разбиения выполняются следующие действия:
 - по значениям числа ядер всех нуклидов на момент начала интервала вычисляются скорости реакций;
 - производится расчет числа ядер нуклидов на момент окончания интервала по формулам (5);
 - суммируются значения числа ядер соответствующих нуклидов, полученные на момент окончания интервала по всем линейным цепочкам;
- 4) в результате получается массив значений числа ядер нуклидов цепочки на момент времени T .

ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ СКОРОСТЕЙ РЕАКЦИЙ

Как уже отмечалось выше, при расчете трансмутации вещества в реакторе основное внимание уделяется радиоактивному распаду образующихся радионуклидов и реакция, вызванным потоком нейтронов.

Для радиоактивного распада скорость превращения нуклида i в нуклид j выражается через постоянную распада:

$$S_j^i = \lambda_i k_j^i, \quad (6)$$

где k_j^i - коэффициент ветвления, т.е. доля радиоактивного распада нуклида i , приводящая к образованию нуклида j . Очевидно, что $k_j^i = 1$, если нуклид j - единственный дочерний нуклид у i , $k_j^i = 0$, если нуклид j - не является дочерним нуклида i и, во всех случаях, $\sum_j k_j^i = 1$.

Для реакций, вызываемых потоком, нейтронов используется двухкомпонентное представление скорости реакции:

$$S_j^i = (\sigma_j^i g_{W_j^i} p + \gamma q I_j^i) \Phi, \quad (7)$$

где σ_j^i - тепловое сечение реакции при энергии нейтронов 0.0253эВ; $g_{W_j^i}$ - фактор Вескотта; I_j^i - резонансный интеграл бесконечного разбавления от граничной энергии 0.5эВ; γ - жесткость спектра, отнесенная к граничной энергии 0.5эВ; Φ - плотность потока тепловых нейтронов, отнесенная к энергии 0.0253эВ;

p - коэффициент тепловой блокировки; q - коэффициент блокировки резонансного интеграла.

Полная скорость уничтожения нуклида по всем реакциям представляет собой величину:

$$S_i = \sum_j S_j^i. \quad (8)$$

БЛОКИРОВКА ТЕПЛОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Двухкомпонентное представление скорости реакции с поглощением нейтронов физически интерпретируется как представление энергетического спектра нейтронов в виде двух компонент: теплового максвелловского и резонансного фермиевского спектров. Скорость реакции за счет тепловой компоненты из (7) равна:

$$S_T = \sigma g_w p \Phi. \quad (9)$$

Параметр g_w - фактор Весткотта учитывает отклонение сечения от закона $1/v$. Параметр p показывает какую долю от падающего на мишень потока составляет средний поток в мишени. Он учитывает пространственную неравномерность потока в мишени в тех случаях, когда в ней присутствуют нуклиды со значительными сечениями поглощения.

Согласно выводам, приводимым в работе [5] с точностью 1%, параметр p может быть определен как:

$$p = (1 - e^{-a}) / a - B a e^{-a}, \quad (10)$$

где B - коэффициент, учитывающий форму мишени; $B=0.068$ - для сферы, 0.098 - для цилиндра и 0.205 - для пластины; a - "оптическая средняя хорда" мишени.

В свою очередь, параметр a определяется через макроскопическое сечение поглощения и может быть представлен следующим образом:

$$a(t) = l \sum_i N_i(t) \sigma_i g_{wi}, \quad (11)$$

где l - средняя геометрическая длина пробега нейтрона в мишени; $N_i(t)$ - число ядер нуклида i в единице объема мишени; σ_i - полное тепловое сечение поглощения нейтронов нуклидом i ; g_{wi} - фактор Весткотта.

Величина $N_i(t)$ выражается через число ядер $x_i(t)$ в принятой нами нормировке как:

$$N_i(t) = N_A \rho_i x_i(t), \quad (12)$$

где N_A - число Авогадро; ρ_i - плотность химического элемента нуклида i .

Учитывая, что полное тепловое сечение поглощения σ_i представляет собой сумму сечений отдельных реакций нуклида i , вызванных потоком нейтронов, окончательно получим:

$$a(t) = l N_A \sum_i \left(\rho_i x_i(t) \sum_j \sigma_j^i g_{wj}^i \right). \quad (13)$$

Как видим, коэффициент тепловой блокировки p имеет достаточно сложную зависимость от числа ядер нуклидов мишени.

БЛОКИРОВКА РЕЗОНАНСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Второе слагаемое в формуле (7) соответствует энергетическому диапазону нейтронов, в котором взаимодействие нейтронов с ядрами обусловлено резонансной структурой сечений нуклидов

$$S_p = \gamma q I \Phi. \quad (14)$$

Величина I представляет собой приводимый в справочной литературе резонансный интеграл бесконечного разбавления, который для произвольного нуклида может быть представлен в виде суммы вкладов отдельных резонансов ΔI_k^{res} (где k - номер резонансного уровня) и вклада $\Delta I(1/\nu)$ сечения, подчиняющегося закону $1/\nu$:

$$I = \Delta I(1/\nu) + \sum_k \Delta I_k^{\text{res}}. \quad (15)$$

Воспользовавшись известными соотношениями, можно получить:

$$\Delta I_k^{\text{res}} = 4,099 \cdot 10^6 \left(\frac{A+1}{A} \right)^2 \frac{g_k \Gamma_{\gamma k} \Gamma_{nk}}{E_k \Gamma_k^2}, \quad (16)$$

где A - массовое число нуклида; g_k - статистический фактор; E_k , $\Gamma_{\gamma k}$, Γ_{nk} , Γ_k - энергия, радиационная ширина, нейтронная ширина и полная ширина k -го резонанса.

Также из известных соотношений:

$$\Delta I(1/\nu) \approx 0,45 \sigma_T.$$

Параметр q из (14) определяет, какую долю от максимального значения, соответствующего бесконечному разбавлению, составляет эффективный резонансный интеграл. Эффективный резонансный интеграл учитывает блокировку резонансных уровней, обусловленную наличием сильнопоглощающих резонансов. В общем виде параметр q может быть представлен как:

$$q = \frac{1}{I} \left[\Delta I(1/\nu) + \sum_k \xi(a_k) \Delta I_k^{\text{res}} \right],$$

где $\xi(a_k)$ - коэффициент блокировки вклада отдельного уровня в резонансный интеграл для брейт-винеровской формы резонансной линии, без учета доплеровского уширения; $a_k = \sigma_{\gamma}^{\text{res}} l N(t)$ - безразмерная величина, по смыслу аналогичная "оптической средней хорде" для рассматриваемого резонансного уровня; $\sigma_{\gamma}^{\text{res}}$ - сечение радиационного захвата для уровня; l - средняя геометрическая длина пробега нейтрона в мишени; $N(t)$ - число ядер нуклида в единице объема мишени.

Величина $\xi(a_k)$ может быть получена из соотношения:

$$\xi(a) = e^{-a/2} [I_0(a/2) + I_1(a/2)],$$

где I_0 , I_1 - функции Бесселя.

"Оптическая средняя хорда" a_k меняется в процессе облучения вместе с концентрацией "своего" нуклида и в принятой нами нормировке может быть получена по формуле:

$$a_k(t) = l N_A \rho x(t) \sigma_{\gamma}^{\text{res}}(E_k),$$

где E_k - энергия k -го резонансного уровня; ρ - плотность химического элемента рассматриваемого нуклида; $x(t)$ - число ядер нуклида на 1г мишени в момент времени t .

Следует обратить внимание на принципиальное отличие характера зависимости коэффициентов тепловой и резонансной блокировок от концентрации ядер

нуклидов в мишени. Тепловая блокировка определяется полным тепловым макроскопическим сечением поглощения, в которое вносят вклад все нуклиды, обладающие сильным поглощением. Резонансная блокировка - своя для каждого нуклида, и определяется его собственной системой резонансных уровней. Резонансные интегралы от разных нуклидов блокируются независимо друг от друга и коэффициент резонансной блокировки зависит от концентрации только "своего" нуклида. Однако в тех случаях, когда резонансные уровни разных нуклидов накладываются друг на друга, блокировка резонансного интеграла одного нуклида может зависеть от концентрации другого нуклида.

ПОЛУЧЕНИЕ РАДИОНУКЛИДОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МИШЕНЕЙ В РЕАКТОРАХ

Одним из важнейших практических применений задачи трансмутации веществ в ядерном реакторе является расчет характеристик получения радионуклидов при облучении мишеней. Основными показателями этого процесса являются: число ядер целевого нуклида, удельная активность целевого и всех побочных нуклидов, расход нейтронов.

Число ядер целевого нуклида $x_m(t)$ в расчете на 1г вещества мишени определяется решением задачи (1),(2). Активность радионуклида по определению - это число распадов радионуклида в единицу времени. Удельная активность Q радионуклида в мишени есть отношение активности радионуклида к массе мишени и в принятой нормировке:

$$Q_i(t) = \lambda_i x_i(t).$$

Возможность рассчитать удельную активность побочных радионуклидов позволяет производить анализ процесса получения радионуклида и выбирать оптимальные параметры режима облучения и выдержки.

Расход нейтронов R - величина, характеризующая затраты нейтронов, поглощенных в мишени при образовании одного ядра целевого нуклида. при отсутствии в схеме превращений делящихся ядер величина расхода нейтронов может быть получена по формуле:

$$R = \frac{1}{x_m(T)} \sum_i \int_0^T \bar{S}_i x_i(\tau) d\tau, \quad (17)$$

где $x_m(T)$ - число ядер целевого нуклида в момент времени T ; $x_i(t)$ - число ядер нуклида i в момент времени t ; \bar{S}_i - полная скорость реакций нуклида i , обуслов-

ленных потоком нейтронов - $\bar{S}_i = \sum_k (\sigma_k^i g_{wk}^i p + \gamma q_i I_k^i) \Phi$ (суммирование ведется по всем продуктам ядерных реакций нуклида i).

При наличии в мишени делящихся нуклидов формула для расчета расхода нейтронов должна быть скорректирована, чтобы учитывать нейтроны деления:

$$R = \frac{1}{x_m(T)} \sum_i \int_0^T (1 - \nu_i) \bar{S}_i x_i(\tau) d\tau, \quad (18)$$

где ν_i - число нейтронов деления, приходящихся на один захват.

Алгоритм решения задачи (1),(2), предлагаемый в данной работе, позволяет получить аналитическое выражение для интегралов, стоящих в правых частях формул (17) и (18). Для этого достаточно проинтегрировать соотношения (5) для

линейных цепочек и произвести суммирование результатов по всем линейным цепочкам, приводящим к рассчитываемому нуклиду (аналогично расчетам числа ядер). Интегрирование соотношений (5) дает следующий результат:

$$\int_0^t x_n(\tau) d\tau = x_{1,0} S_2^1 K S_n^{n-1} \sum_{j=1}^n \frac{1 - \exp(-S_j t)}{S_i \prod_{k \neq j, k \neq i} (S_k - S_j)}. \quad (19)$$

Используя соотношение (19), можно также легко получить значение энерговыделения от распада произвольного радионуклида в схеме трансмутации и всех нуклидов схемы вместе. Согласно определению, энерговыделение от распада радионуклида представляет собой величину:

$$D_i(t) = K \bar{E}_i \int_0^t \lambda_i x_i(\tau) d\tau,$$

где $x_i(t)$ - число ядер радионуклида i в момент времени t ; λ_i - постоянная распада радионуклида i ; \bar{E}_i - средняя энергия, выделяющаяся при единичном распаде радионуклида i ; K - коэффициент, зависящий от выбора единиц измерения. Если \bar{E}_i в МэВ и D - в Гр, то $K=1.602 \cdot 10^{-13}$. Следует отметить, что в принятой в настоящей работе нормировке при расчетах с использованием формулы (19) получается значение удельного энерговыделения радионуклида, т.е. энерговыделения от распада радионуклида в расчете на грамм мишени.

Энерговыделение от распада всех нуклидов в схеме трансмутации получается суммированием энерговыделения отдельных нуклидов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Создана СИС, дающая возможность на ПЭВМ выполнять расчеты трансмутации нуклидов в ядерных реакторах. Расчеты выполняются с помощью баз данных ядерно-физических констант новейших оценок, что повышает надежность получаемых результатов. СИС снабжена общей и контекстной системой помощи (HELP), делающих удобным ее использование. Работа поддержана грантом Минобразования РФ (№ 97-25-5.3-518).

Список литературы

1. *Ignatyuk A.V., Plyaskin V.I., Popov Yu.P.* Interaction of Low Energy Neutrons with Nuclear and Matter // Springer-Verlag. - 1999 (chapter 8).
2. *Круглов А.К., Рудик А.П.* Реакторное производство радионуклидов. - М.: Энергоатомиздат, 1985. - С.64-108.
3. *Герасимов А.С., Зарицкая Т.С., Рудик А.П.* Справочник по образованию нуклидов в ядерных реакторах. - М.: Энергоатомиздат, 1989. - 258 с.
4. *Пляскин В.И., Косилов Р.А., Мантуров Г.Н.* Справочно-информационная система ядерно-физических свойств нуклидов и цепочек радиоактивного распада // Известия вузов. Ядерная энергетика. - 1998. - №6. - С.45.
5. *Chao Y.A., Martinez A.S.* On Approximations to the neutron escape probability from an absorbing body // Nucl.Sci.and Engng, 1978. - V.66. - P.254.

Поступила в редакцию 20.05.99.

РАСЧЕТ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕАКЦИИ ПРЯМОГО ПОДХВАТА ТРЕХ НУКЛОНОВ

В.С. Мастеров, Н.П. Савельев

Обнинский институт атомной энергетики, г.Обнинск



В работе проводится построение расчетной модели для описания прямой реакции вида (p,α) с передачей трех нуклонов. Предложен метод расчета динамической амплитуды дифференциального сечения. Приводятся результаты расчетов сечений для ядер ^{39}K , ^{42}Ca , ^{58}Ni в диапазоне энергий от 20 до 72 МэВ.

ВВЕДЕНИЕ

Реакции с участием легких нуклидов вызывают неослабевающий интерес на протяжении многих лет по нескольким причинам. Характерная зависимость сечений реакций (p,α) и (n,α) от передаваемого углового момента делает их мощным средством изучения спектроскопических параметров [1]. С другой стороны, реакция (n,α) исключительно важна в ядерной энергетике, так как является одной из причин “распухания” конструкционных материалов атомных реакторов. Существует масса экспериментальных данных по этим реакциям, например, [13-15]. Тем не менее, в силу ряда причин невозможно получить экспериментальные данные для всех нуклидов, образующихся в активной зоне и конструкциях реактора во всем диапазоне энергий нейтронов. Новейшие концепции атомных энергетических установок еще более расширяют потребности в сведениях о сечении ядерных реакций, в основном, из-за участия в реакциях протонов с большими энергиями (вплоть до нескольких ГэВ). Эти причины стимулируют теоретические разработки в данной области. Ведущими механизмами реакции (n,α) , приводящей к образованию в конструкциях гелия, принято считать статистический и полустатистический (предравновесный). Тем не менее, остается неясным вопрос, так ли уж мал вклад в образование α -частиц прямого механизма реакции. На наш взгляд, нет оснований предполагать, что им можно пренебрегать даже для энергий в области порога реакции, т.к. попытки описать теоретически всю совокупность экспериментальных данных в широком диапазоне энергий и испытываемых нуклидов не привели к успеху. Детальные обзоры по теории этих процессов (n,α) и (p,α) можно найти в [14,15]. Предметом настоящей работы является расчет сечения реакций (p,α) и (n,α) с учетом именно прямого механизма.

ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Модель развита на основе теории прямых ядерных реакций [2] для случая передачи трех нуклонов. Для расчетов используется приближение искаженных волн. Сечение реакции $A(a,b)B$ согласно [2,9] может быть записано в виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu_{aA}\mu_{bB}}{(2\pi\eta^2)^2} \cdot \frac{k_{bB}}{k_{aA}} \cdot \frac{1}{(2S_a + 1)(2J_A + 1)} \sum_{\substack{m_a m_b \\ M_A M_B}} |T_{DW}|^2, \quad (1)$$

где μ_{aA} - приведенная масса в канале (a,A), k_{aA} - импульс относительного движения, S_a и J_A - спины налетающей частицы и ядра мишени соответственно. Суммирование проводится по магнитным квантовым числам частиц, участвующих в реакции. Амплитуда реакции T_{DW} в методе искаженных волн дается выражением

$$T_{DW} = J \int d\mathbf{p}_{aA} \int d\mathbf{p}_{bB} \chi_{bB}^{(-)}(\mathbf{k}_{bB}, \mathbf{p}_{bB}) \langle bB|V|aA \rangle \chi_{aA}^{(+)}(\mathbf{k}_{aA}, \mathbf{p}_{aA}), \quad (2)$$

где J - якобиан перехода к координатам относительного движения систем (aA) и (bB), $\chi^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ - сходящаяся и расходящаяся искаженные волновые функции. Формфактор $\langle bB|V|aA \rangle$ можно представить как

$$\langle bB|V|aA \rangle = 2C \int d\xi_B \dots \int \Psi_{J_b M_b}^*(\xi_B) \Psi_b^*(\xi_b) V \Psi_{J_A M_A}^*(\xi_A, 1, 2, 3), \quad (3)$$

где $\Psi_{J_A M_A}(\xi_B, 1, 2, 3)$ и $\Psi_{J_b M_b}(\xi_B)$ - волновые функции ядра-мишени и остаточного ядра, $\Psi_b(\xi_b)$ - внутренняя волновая функция образовавшейся частицы b, а коэффициент равен $(C_1^Z)^{1/2} (C_2^N)^{1/2}$ в случае реакции (p,α) или для (n,α) реакции - $(C_1^Z)^{1/2} (C_2^N)^{1/2}$. Волновая функция ядра-мишени может быть разложена по произведениям волновых функций остаточного ядра и переданных нуклонов

$$\Psi_{J_A M_A}(\xi_B, 1, 2, 3) = \sum_{\substack{JT \\ q_1 q_2 q_3}} S_{AB}^{1/2}(q_1 q_2 q_3, LSJT) \langle J_b J M_b M | J_A M_A \rangle \langle T_B T N_B N | T_A N_A \rangle \times \\ \left[\Psi_{J_b M_b}(\xi_B) \Psi^{LSJT}(1, 2, 3) \right]_{J_A M_A}. \quad (4)$$

Здесь $\langle J_1 J_2 M_1 M_2 | JM \rangle$ - коэффициенты векторного сложения, а $LSJT$ - орбитальный, спиновой, полный и изотопический моменты. Коэффициенты разложения $S_{AB}^{1/2}$, которые принято называть спектроскопическими амплитудами, вычисляются согласно выражению

$$S_{AB}^{1/2}(q_1, q_2, q_3, LSJT) = 2C \int d\xi_B \dots \int \Psi_{J_A M_A}^*(\xi_B, 1, 2, 3) \left[\Psi_{J_b M_b}(\xi_B) \Psi_M^{LSJT}(1, 2, 3) \right]_{J_A M_A}. \quad (5)$$

В новых обозначениях выражение для амплитуды реакции имеет вид:

$$T_{DW} = \sum_{\substack{q_1 q_2 q_3 \\ LSJT}} \langle J_b J M_b M | J_A M_A \rangle \langle T_B T N_B N | T_A N_A \rangle S_{AB}^{1/2}(q_1 q_2 q_3, LSJT) \times \\ \times \int d\mathbf{p}_{\alpha B} \int d\mathbf{p}_{\alpha A} \chi_{\alpha B}^{(-)*}(\mathbf{k}_{\alpha B}, \mathbf{p}_{\alpha B}) F_{LS}^{q_1 q_2 q_3} \chi_{\alpha A}^{(+)}(\mathbf{k}_{\alpha A}, \mathbf{p}_{\alpha A}), \quad (6)$$

где $F_{LS}^{q_1 q_2 q_3}$ - есть динамический формфактор.

В этом приближении задача восстановления сечения реакции сводится к двум этапам: вычисление формфактора в рамках предположений о динамике процесса и расчет спектроскопической амплитуды, которые будут сформулированы ниже.

ФОРМФАКТОР

Внутренняя волновая функция α-частицы для LS-связи с квантовыми числами $L\alpha = S\alpha = J\alpha = T\alpha = 0$ может быть записана в виде:

$$\Psi_{\alpha}^{J_{\alpha}=T_{\alpha}=0}(1,2,3,4) = \Phi_{\alpha}^{L_{\alpha}=0}(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4) \chi_{\alpha}(1,2,3,4)^{J_{\alpha}=T_{\alpha}=0}. \quad (7)$$

Здесь мы положим, что пространственная волновая функция α -частицы имеет вид гауссиана:

$$\Phi_{\alpha}^0(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4) = N_{\alpha} \exp \left\{ -\eta^2 \sum_{i < j} |\rho_i - \rho_j|^2 \right\}, \quad (8)$$

где $\eta=0,233 \text{ фм}^{-1}$ - параметр размера α -частицы, а $N_{\alpha} = (128\eta^6 / \pi^3)^{3/4}$ - нормировочная постоянная.

Предположим, что налетающий нуклон (для определенности будем в дальнейшем говорить о протоне) взаимодействует именно с трехнуклонной системой, которая впоследствии войдет в состав α -частицы. В соотношении (4) соответствующая нуклонная ассоциация описывается волновой функцией $\Psi_a^{\gamma,LSJT}(1,2,3)$. Эта волновая функция может быть представлена через волновые функции одночастичных состояний:

$$\Psi_a^{\gamma,LSJT}(1,2,3) = [\Phi^{q_1}(1)\Phi^{q_2}(2)\Phi^{q_3}(3)]_a^{LSJT}. \quad (9)$$

Подразумевается, что Ψ_{α} антисимметризована. $\Phi^{q_i}(i)$ - одночастичные волновые функции с соответствующим набором квантовых чисел $q_i = n_i, l_i, j_i$, при этом

$$\Phi^{q_i}(i) = [\Phi_{m_i}^{l_i}(\rho_i) \chi^{\frac{1}{2}t_i}(i)]^{JT}, \quad (10)$$

где $\Phi_{m_i}^{l_i}(\rho_i)$ - ее пространственная, а $\chi^{\frac{1}{2}t_i}(i)$ - спин-изоспиновая части, где $\frac{1}{2}$ - спин нуклона, а t - изоспин. Пространственная волновая функция есть стандартное решение уравнения Шредингера для нуклона с потенциалом Саксона-Вудса. С учетом сделанных предположений волновая функция трехнуклонной системы принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \Psi_a^{q_1q_2q_3,LT}(\rho_1\sigma_1, \rho_2\sigma_2, \rho_3\sigma_3) = \sum_{LS} \sum_{L_{12}} \langle (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_3 \frac{1}{2})_{j_3} | (l_1 l_2)_{L_{12}} (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_{S_{12}} (l_3 \frac{1}{2})_{j_3} \rangle \times \\ \langle (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_3 \frac{1}{2})_{j_3} | (l_1 l_2)_{L_{12}} (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_{S_{12}} (l_3 \frac{1}{2})_{j_3} \rangle \times \\ \left\{ \Phi_{Ma}^{q_1q_2q_3,L}(\overline{\rho}_1, \overline{\rho}_2, \overline{\rho}_3) \left[\left[\chi^{\frac{1}{2}}(\sigma_1) \chi^{\frac{1}{2}}(\sigma_2) \right]_{L_{12}} \chi^{\frac{1}{2}}(\sigma_3) \right]_S \right\}^{JM}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\langle | \rangle$ - коэффициенты разложения по одночастичным волновым функциям, а $\Phi_{Ma}^{q_1q_2q_3,L}$ - пространственная волновая функция трехнуклонной системы, антисимметризованная по одночастичным состояниям.

Взаимодействие налетающего протона с трехнуклонной ассоциацией представим в виде:

$$U = V(\rho_4 - \rho_1) + V(\rho_4 - \rho_2) + V(\rho_4 - \rho_3), \quad (12)$$

где $V(\rho_4 - \rho_i)$ - потенциал нуклон-нуклонного взаимодействия протона с i -м нуклоном, входящим в ассоциацию. В дальнейшем предположим, что взаимодействие осуществляется в случае, если координата протона ρ_4 совпадает с координатой центра масс ассоциации. Это приближение носит название нулевого радиуса действия. Тогда

$$U \Phi_{\alpha}(\overline{\rho}_1, \overline{\rho}_2, \overline{\rho}_3, \overline{\rho}_4) \approx d_0 (\overline{\rho}_1, \overline{\rho}_2) \delta(\overline{\rho}), \quad (13)$$

где β_1, β_2 и β - координаты относительного движения.

Нуклон-нуклонное взаимодействие выберем в виде гауссиана

$$V(x) = V_0 e^{-\beta x^2} \tag{14}$$

с параметрами $V_0 = 70$ МэВ, $\beta = \eta^2$.

Это приближение локального взаимодействия дает удовлетворительные результаты в случае, когда переданные угловые моменты не слишком велики, поэтому в дальнейшем ограничимся соответствующими энергиями.

Теперь можно выписать выражение для формфактора, принятое нами для расчета:

$$F_{LS}^{q_1 q_2 q_3}(\vec{r}_4) = \sum_{L_{23}} \langle (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_3 \frac{1}{2})_{j_3} | (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (L_2 l_3)_{L_{23}} (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_{S_{23}} \rangle \times \\ \times \langle (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 l_3)_{L_{23}} (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_{S_{23}} | (l_1 L_{23})_L (\frac{1}{2} S_{23})_S \rangle N^{-\frac{1}{2}} \times \\ \int d\vec{\rho}_1 \int d\vec{\rho}_2 \int (\vec{\rho}_1 \vec{\rho}_2) \exp\left\{-\frac{\rho_1^2}{4\Delta^2} - \frac{\rho_2^2}{3\Delta^2}\right\} U_{0,L}^t(\rho_1, \rho_2, r_4) [Y^\lambda(\hat{\rho}_1) Y^\mu(\hat{\rho}_2)]_0. \tag{15}$$

Здесь $Y^\lambda(\hat{\rho})$ - сферические волновые функции, а $\hat{\rho}$ - углы, определяющие соответствующий вектор.

Спектроскопический фактор представляет собой интеграл перекрытия волновой функции ядра мишени и прямого произведения функций остаточного ядра и трехнуклонной ассоциации:

$$S_{AB}^{\frac{1}{2}}(\gamma, LSJ) = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 d\xi_B \Psi^{J_A T_A^*}(\xi_B, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) [\Psi^{J_B T_B}(\xi_B) \Psi_{\mu}^{\gamma, JT}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)]^{J_A T_A}. \tag{16}$$

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для расчетов по развитой методике была использована широко известная программа расчета сечений прямых реакций DWUCK4 (P.Kunz [12]), дополненная для наших целей рядом процедур. Вычисления дифференциального сечения реакции (p, α) были про-

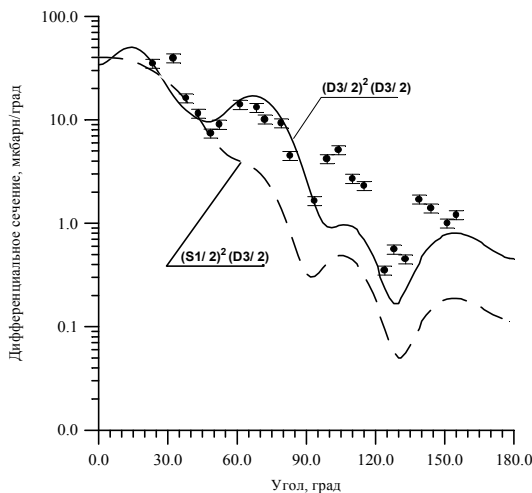


Рис.1. Угловое распределение реакции $^{39}\text{K}(p, \alpha)^{36}\text{Ar}$ с энергией протона $E_p = 22$ МэВ. Верхняя кривая соответствует подхвату нейтронной пары с оболочки - $d_{3/2}$, нижняя - $d_{1/2}$

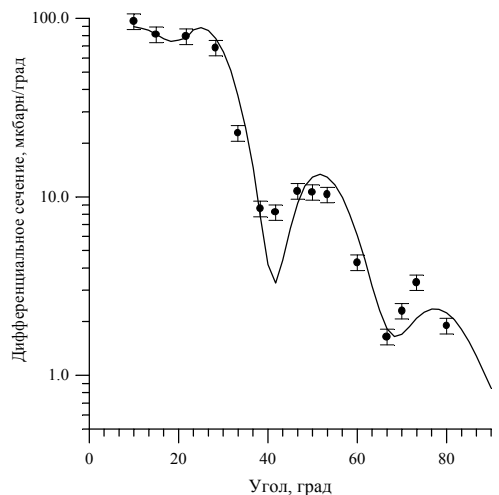


Рис.2. Угловое распределение реакции $^{42}\text{Ca}(p, \alpha)^{39}\text{K}$, энергия протона $E_p = 40.2$ МэВ, с передачей углового момента $L=0$ (экспериментальные данные взяты из работ [14,15])

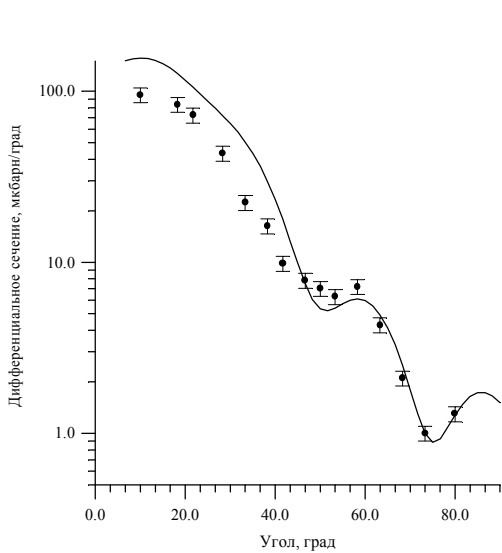


Рис. 3. Угловое распределение реакции $^{42}\text{Ca}(p,\alpha)^{39}\text{K}$, энергия протона $E_p=40.2\text{МэВ}$, с передачей углового момента $L=2$ (экспериментальные данные взяты из работ [14,15])

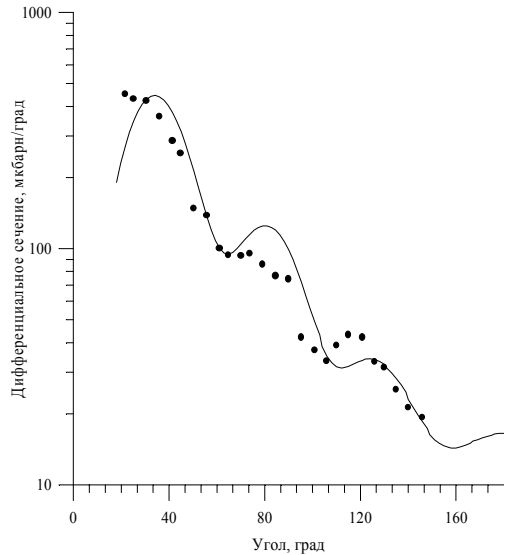


Рис. 4. Угловое распределение реакции $^{58}\text{Ni}(p,\alpha)^{55}\text{Co}$ с энергией налетающего протона $E_p=22\text{МэВ}$ (экспериментальные данные взяты из [13])

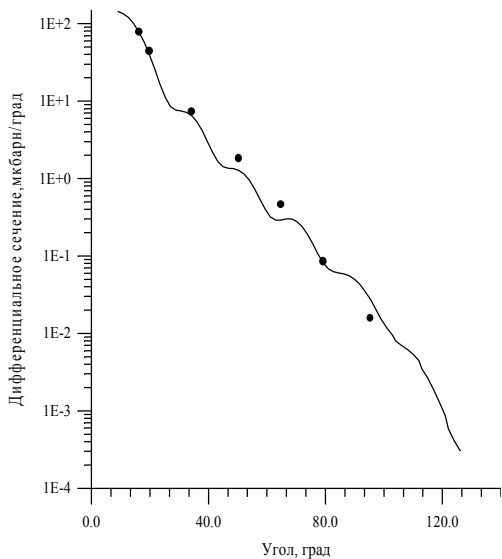


Рис.5. Угловое распределение реакции $^{58}\text{Ni}(p,\alpha)^{55}\text{Co}$ с энергией налетающего протона $E_p=72\text{МэВ}$ (экспериментальные данные взяты из [13])

на 22 МэВ. Верхняя кривая соответствует подхвату двух нейтронов и протона с оболочки $d_{3/2}$, нижняя – подхвату нейтронной пары с $s_{1/2}$ оболочки. На наш взгляд сравнение данных говорит о том, что реакция включает в себя когерентную сумму обоих процессов.

На рис.2 и 3 изображены угловые распределения α -частиц, образующихся в реакции протонов с энергией 40,2 МэВ с ядром ^{40}Ca . На рис.2 представлены данные без передачи углового момента ($L=0$), на рис.3 – с передачей $L=2$. В обоих случаях остаточное ядро остается в основном состоянии.

ведены для нескольких ядер с $A<100$ и для различных энергий налетающей частицы. Данная работа носит методический характер, и поэтому нашей целью являлось выяснение способности предложенной расчетной модели дать качественное согласие с экспериментальными данными. Детальное описание экспериментов не подразумевалось, поэтому расчетные параметры брались стандартными и их подгонки не проводилось. Параметры для изотопов были взяты из таблиц Г.Ауди и А.Вапстера [16], параметры потенциалов также были выбраны стандартными: для протонного канала это были параметры Беччети-Гринлиса, для нейтронного – Берселона, а для α -частицы – Макфаддена-Сатчлера [17].

На рис.1 представлены результаты расчетов и экспериментальные данные для реакции $^{39}\text{K}(p,\alpha)^{36}\text{Ar}$ при энергии протона

Рис.4 и 5 показывают сечение $^{58}\text{Ni}(p,\alpha)^{55}\text{Co}$ для энергий протона 22 и 72 МэВ, соответственно, с передачей углового момента $L=3$ в обоих случаях.

Данные, представленные на рисунках, демонстрируют адекватность выбранной методики расчета для описания экспериментальных данных. Это позволяет надеяться на дальнейшее продвижение как в область более тяжелых ядер, так и в область больших энергий без потери аккуратности в расчетах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность А.Ю. Конобееву, А.Ф. Гурбичу и В.П. Луневу за полезные обсуждения затронутых здесь проблем, а также Н.О. Савельевой за техническую помощь при подготовке данной статьи.

Список литературы

1. *Gadioli E. et al.* // *Zeitschrift fur Physik, A – Atomic Nuclei.* - 1986. - V.325. - P.61-68.
2. *Satchler G.R.* *Direct nuclear reactions*, Oxford University Press, Oxford OX2 6DP, 1983.
3. *Сутенко А.Г.* *Теория ядерных реакций.* - М.: Энергоатомиздат, 1983.
4. *Престон М.* *Физика ядра.* - М.: Мир, 1964.
5. *Norman K. Glendinning.* // *Phys. Rev.* - 1965. - V.137. - №15.
6. *Zhang Jingchang, Yan Shiwei, Wang Cuilan.* // *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei.* - 1993. - A344.
7. *Iwamoto A. and Harada K.* // *Phys. Rev.* - 1982. - V.137. - №5.
8. *Fliessbach T.* // *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei*, 1976, A278.
9. *Baytan B.F. and Kalio A.* // *Phys. Rev.* - 1967. - V.156. - №4.
10. *Воршалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* *Квантовая теория углового момента.* - Л.: Наука, 1975.
11. *Крылов В.И.* *Приближенное вычисление интегралов.* - М.: Физ.-мат. лит., 1959.
12. *Kunz P.D. and Rost E.* *General description of DWUCK4*, Department of Physics University of Colorado.
13. *Bonetti R., Crespi F.* // *Nucl. Phys.* - 1989. - A499. - P.381-391.
14. *Falk W.R.* // *Phys. Rev.* - 1973. - V.8. - №8. - P.1757-1769.
15. *Gadioli E., Hodgson P.E.* // *Rep. Prog. Phys.* - 1989. - V.52. - P.247-299.
16. *Audi G., Wapstra A.H.* // *Nucl. Phys.* - A596. - V.4. - P.409-480.
17. *Bersellon O.* *SCAT2: un programme de modele optique spherique.*

Поступила в редакцию 2.03.99.

ABSTRACTS OF THE PAPERS

УДК 621.311.25:621.039.004(55)

Scenarios of Development of Nuclear Power Engineering on BBЭP-1000 and BREST-type Fast Reactors in Iran \N. Mataji Kajuri; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 8 pages, 2 tables, 8 illustrations. - References, 5 titles.

The different scenarios of development of Iranian nuclear power engineering are considered. A possibility of BREST-type lead-cooled fast reactors introduction in the Iranian nuclear industry is analyzed.

УДК 621.311.25:621.039

Management of Technical and Industrial Hazards on Objects of Nuclear Power Engineering Using the Automated System of Recording and Documenting of Signals \V.V. Titov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 8 pages, 2 illustrations.

The opportunities of application of the multifunctional automated systems of recording of signals on high-hazard industrial objects, including nuclear power engineering are uncovered in the paper.

УДК 523.683:523.64

Chaotic Dynamics in a Problem of N-bodies \N.V. Kulikova, A.V. Mishev, P.I. Ignatenko; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages, 9 illustrations. - References, 11 titles.

The technique of realization of computer modeling and research method of the evolution of objects in the N-bodies problem (formalization of the model, construction of the solution, processing and analysis of results) is considered. Using examples of the decision of spatial gravitational problems for 4 and 6 bodies it was shown that the developed approaches and methods are unique for the research of the evolution of N-bodies dynamic system interaction is caused by fields of a various nature.

УДК 504.3.054:681.7.069.24

The Possibilities of Sondage of Contaminants in the Real Atmosphere Using Industrial Lasers \M.M. Troyanov, Yu.D. Il'ichev; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages, 2 tables, 3 illustrations. - References, 9 titles.

The possibilities of instrumental determination of adsorbing admixtures in a real atmosphere by the method of differential absorption using isotope CO₂-lasers are investigated.

УДК 51-73:504.054

Prediction of Contaminations of Surface Stratum of Territory in Region NPP \K.M. Efimov, E.A. Yas'ko; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 4 pages, 1 illustration. - References, 4 titles.

Development of mathematical models of pollution spreading due to natural processes in the soil is hampered by the complexity of representing the soil as a medium of migration owing to heterogeneity of its physicochemical properties and insufficient knowledge of transfer mechanisms. This study offers rather a simple mathematical model of both the formation of rainfall run-off at a catchment area, and the process of transfer of polluting substances by the generated flow. The constructed model is convenient for practical application. Numerical calculations for the Covashy river basin (vicinity of the Leningrad Nuclear Power Plant) have been carried out.

УДК 551.510.42

Removing of Aerosol Fraction from the Troposphere by Atmospheric Precipitation \M.M. Troyanov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 4 pages. - References, 9 titles.

The problem of removal of an aerosol from the atmosphere by clouds is considered. Two different mechanisms of an aerosol removing - at the expense of aerosol moisturing inside clouds and due to

interaction with atmospheric precipitation are chosen. Quantitative estimations of a ratio of these factors in the real atmosphere are given.

УДК 541.64:541.183

Study of Influence of Alkaline Hydrolysis Products in Production of Track Membranes on the Basis of Polyethyleneterephthalate Films \T.E. Laricheva, A.A. Machula, V.K. Milinchuk; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 5 pages, 3 illustrations. - References, 10 titles.

The influence of ethylenglycol (EG) and terephthalate ions (TPI), generated during an alkaline hydrolysis of polyethyleneterephthalate films, on the process of formation of track membranes is investigated. It is shown that TPI do not influence on the velocity of chemical etching polymer and of the latent tracks (LT). At the same time the kinetics of chemical etching polymer and of the LT essentially depends on the concentration of EG in etching solution. As a result accumulation of EG in the etching solution the selectivity of the process becomes worse along with the change of characteristics of track membranes.

УДК 539.172.8

Study of Phase Distribution of Initial and Final States of Multiparticle Systems in the Monte-Carlo Method of Classical Trajectories \A.E. Yanovsky; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages, 14 illustrations. - References, 5 titles.

The results of calculation of phase distribution of reaction fragments simulated by three and four-partical models within the method of classical trajectories are represented in the paper.

УДК 621.039.525; 621.039.534.6

Universal Algorithm of the Monte-Carlo Method for Calculation of Blankets of Accelerator-Driven Systems \V.V. Korobeinikov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 7 pages, 2 illustrations. - References, 5 titles.

The universal algorithm for physical calculation of subcritical systems with an external source of neutrons by the Monte-Carlo method is developed. This algorithm is effective in calculation of accelerator-driven systems within a wide range of subcriticality. Description, theoretical evidence, method of realization, and results of testing of the algorithm for the test subcritical systems with an external neutron source are given in the paper.

УДК 621.039

On the Method of Determination of Physical Characteristics of a Nuclear Reactor under Slow Reactivity Perturbation \N.A. Vinogorov, D.N. Jukovsky; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 5 pages, 3 illustrations. - References, 5 titles.

The method of determination of nuclear reactor characteristics under slow reactivity perturbation by means of measurement of the parameter providing the feedback is presented.

The application of the method is demonstrated by examples of estimation of the poisoning effect of xenon-135 and barometric reactivity coefficient for VVR.

УДК 621.039.553.34

Study of Dependence of Wall Temperature in the Technological Channel of the RBMK-Reactor on the Gas Clearance between the channels and Graphite Blocks \A.I. Trofimov, S.A. Vinogradov, I.A. Tchusov, V.I. Belozerov, M.A. Trofimov, I.A. Shvetsov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 11 pages, 1 table, 15 illustrations. - References, 5 titles.

Theoretical and experimental proof of the usage of data on the temperature field distribution over the inner surface of a technological channel (TC) for evaluating the size of the gas clearance in RBMK-reactors are considered in the paper. The calculations performed using k-ε turbulence model, showed that the size of the gas clearance considerably affects the temperature distribution over the length of the TC.

The experimental study carried out using probes of two types have shown that the violation of periodicity in staking of the cut spring rings results in distortion of the temperature field both over the length and radius of the TC. Thus a conclusion is reached that it is possible to extrapolate the size of the gas clearance on the base of the temperature field distribution.

УДК 539.1.04:669.017.3

Cluster Structures in FCC-materials at High Levels of Radiation Damage \ V.S. Khmelevskaya, N.V. Kulikova, A.V. Nakin, V.G. Malynkin; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 6 pages, 2 tables, 5 illustrations. - References, 8 titles.

It is shown, that in various metal materials (alloys on the basis Fe-Ni-Cr, Ni-Cr, Cu-Ni, Fe-Cr, V-Ti-Cr, and also pure Zr and Ti) as a results of interaction with ion radiation special non-equilibrium states arise. The model of local reorganization of a crystal lattice in the vicinity of vacancy is suggested atomic groups and small clusters of icosahedral symmetry are formed. The computer experiment shows that a bimodal distribution of lengths of edges of a polyhedron appears at such transformation and it should lead to splitting of X-ray diffraction peaks.

УДК 539.163.517.91

Information Reference System «Transmutation of Nuclides in Nuclear Reactors» \ V.I. Plyaskin, R.A. Kosilov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages. - References, 5 titles.

Description of the information reference system is given permits to perform calculations of nuclides transmutation in nuclear reactors. The offered algorithms of calculation of the basic parameters of the transmutation are based on the directional graph of the transmutations of nuclides, have allowed to increase the rate of calculations. The calculations are carried out using newest databases for nuclear-physical constants which raise the reliability of results.

УДК 539.17.212

Calculation of Angular Distribution of Direct Pick-up Reaction with Transfer of Three Nucleons \ V.S. Masterov, N.P. Savelyev; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 6 pages, 5 illustrations. - References, 17 titles.

The computational model for the three-nucleon transfer reaction (p, α) is developed. The approach to calculation of the dynamic amplitude of the differential cross-section is offered. The results of calculations of the cross-sections for nuclei ^{39}K , ^{42}Ca , ^{58}Ni within the energy range from 20 up to 72 MeV are given.

НАШИ АВТОРЫ

В.И. Белозеров – к.т.н., доцент кафедры теплотехники ОИАТЭ, закончил Московский инженерно-физический институт в 1975 г. Область научных интересов: тепло- и массообмен, методы измерения теплогидравлических характеристик в ядерных энергетических установках.

С.А. Виноградов – к.т.н., закончил ОИАТЭ в 1989 г. Научные интересы связаны с разработкой автоматизированных систем диагностики технологического оборудования АЭС.

К.М. Ефимов – к.ф.-м.н., директор института эколого-технологических проблем, г. Москва. В 1979 г. закончил Механико-математический факультет МГУ. Область научных интересов: стохастичность динамических систем, экологическое моделирование, оценка экологического риска.

П.И. Игнатенко – аспирант каф. “Компьютерные сети, системы и технологии” ОИАТЭ. Область научных интересов: математическое моделирование, стохастические методы, вычислительный эксперимент, компьютерные динамические системы, топологические пространства.

Ю.Д. Ильичев – к.ф.-м.н., зав. кафедрой инженерной графики ОИАТЭ. Закончил Одесское высшее мореходное училище в 1957 г. Область научных интересов – физика атмосферы.

В.В. Коробейников – д.ф.-м.н., начальник лаборатории ГНЦ РФ-ФЗИ, профессор кафедры РКР ОИАТЭ. Область научных интересов: физика реакторов и защиты, физика электроядерных установок, математическое моделирование систем со сложной структурой.

Р.А. Косилов – аспирант, закончил ОИАТЭ. Область научных интересов – применение вычислительной техники в научных исследованиях.

Н.В. Куликова – д.ф.-м.н., проф., зав. каф. “Компьютерные сети, системы и технологии” ОИАТЭ. Область научных интересов: математическое моделирование, вероятностные методы, компьютерное моделирование, малые тела Солнечной системы, пылевая компонента космического пространства, теория фрактальной размерности.

Т.Е. Ларичева – ст. преподаватель кафедры общей и специальной химии ОИАТЭ. Область научных интересов – радиационная химия полимеров.

В.Г. Малышкин – зав. кафедрой материаловедения ОИАТЭ. Область научных интересов –

радиационное модифицирование материалов, радиационно-индуцированные структурные превращения.

В.С. Мастеров – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей и специальной физики, окончил Московский инженерно-физический институт в 1975 г.

А.А. Мачула – к.х.н., доцент кафедры общей и специальной химии ОИАТЭ. Область научных интересов – радиационная химия полимеров.

В.К. Милинчук – д.х.н., заведующий кафедрой общей и специальной химии ОИАТЭ. Область научных интересов – радиационная химия.

А.В. Мышев – к.ф.-м.н., доцент каф. “Компьютерные сети, системы и технологии” ОИАТЭ. Область научных интересов: математическое моделирование, стохастические методы, вычислительный эксперимент, небесная механика, теория фрактальной размерности, теория образов, топологические пространства.

А.В. Накин – аспирант кафедры материаловедения. Область научных интересов – компьютерные эксперименты в области физики твердого тела.

В.И. Пляскин – к.ф.-м.н., доцент ОИАТЭ, окончил Московский инженерно-физический институт. Область научных интересов – экспериментальная и теоретическая ядерная физика.

Н.П. Савельев – аспирант кафедры общей и специальной физики, закончил в 1997 г. ОИАТЭ. Область научных интересов – теория ядерных реакций.

А.И. Трофимов – д.т.н., профессор, действительный член АЕПРФ, закончил Томский политехнический институт в 1964 г. Имеет более 300 научных трудов в области создания измерительных преобразователей и систем автоматики измерительной техники.

М.А. Трофимов – аспирант кафедры контроля, автоматики и диагностики, закончил ОИАТЭ в 1996 г. Область научных интересов: диагностика оборудования ЯЭУ.

М.М. Троянов – к.ф.-м.н., доцент ОИАТЭ, закончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 1976 г. Область научных интересов – физика атмосферы.

В.С. Хмелевская – д.ф.-м.н., профессор кафедры материаловедения ОИАТЭ, закончила физический факультет Киевского университета. Область научных интересов: фазовые превращения в металлах и сплавах.

И.А. Чусов – к.т.н., доцент кафедры теплофизики, закончил ОИАТЭ в 1991 г. Область научных интересов: тепло- и массообмен в ЯЭУ, гидродинамика и теплообмен в потоках с физико-химическими взаимодействиями.

И.А. Шевцов – научный сотрудник кафедры автоматики, контроля и диагностики, закончил

ОИАТЭ в 1989 г. Область научных интересов: диагностика оборудования ЯЭУ.

Е.А. Ясько – закончила Ленинградский инженерно-строительный институт в 1962 г., ведущий программист ВНИПИЭТ, г. Санкт-Петербург. Область научных интересов: САПР, расчетные исследования в области экологического моделирования.

OUR AUTHORS

V.I. Belozarov - Cand.Sci. (Engineering), Associate Professor of the thermal physics department of the Obninsk INPE, graduated from the Moscow Physics and Engineering Institute in 1975. Scientific interests: heat- and mass exchange in nuclear power installations, methods for measuring thermohydraulic characteristics of nuclear power installations.

K.M. Efimov – Cand.Sci. (Phys.-Math.), director of the Institute of Ecologo-technical Problems, Moscow. Graduated from the mechanico-mathematical faculty of the Moscow State University in 1979. Scientific interests: stochasticity of dynamic systems, ecological modelling, estimation of ecological hazard.

P.I. Ignatenko – post-graduated student of the computer nets, system and technology department of the Obninsk INPE. Scientific interests: mathematical modelling, stochastic methods, computer experiment, computer dynamic systems, topological spaces.

V.V. Korobeinikov – Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor of Obninsk INPE, head of laboratory of the IPPE. Scientific interests: nuclear reactor physics, physics of radiation shielding, physics of accelerator driven nuclear systems, mathematical modelling of complicated systems.

Yu.D. Il'ichev - Cand.Sci. (Phys.-Math.), head of the department of the Obninsk INPE. Graduated from the Odessa High Nautical school in 1957. Scientific interests: physics of atmosphere.

V.S. Khmelevskaya - Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor of the material science department of the Obninsk INPE, graduated from the physical faculty of the Kiev State University. Scientific interests: phase and structure transitions in metals and alloys under irradiation.

R.A. Kosilov - post-graduate student of the Obninsk INPE, graduated from the OINPE. Scientific interests: application of computers in scientific research.

N.V. Kulikova – Dr.Sci. (Phys.-Math.), head of the computer nets, system and technology department of the Obninsk INPE. Scientific interests: mathematical modelling, probability methods, computer modelling, small bodies of the Solar system, dust component of space, theory of fractal dimensionality.

T.E. Laricheva – senior lecturer of the general and special chemistry department of the Obninsk INPE. Scientific interests: radiation chemistry of polymer compounds.

A.A. Machula – Cand.Sci. (Chemistry), Associate Professor of the general and special chemistry department of the Obninsk INPE. Scientific interests: radiation chemistry of polymer compounds.

V.S. Masterov - Cand.Sci. (Phys.-Math.), senior lecturer at the common and special physics department, graduated from the Moscow Physics and Engineering Institute in 1975.

V.G. Malinkin - head of the material science department of the Obninsk INPE. Scientific interests: radiation modifications of materials, structure transitions under irradiation.

V.K. Milinchuk – Dr.Sci. (Chemistry), Professor, head of the general and special chemistry department of the Obninsk INPE. Scientific interests: radiation chemistry.

A.V. Myshev – Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the computer nets, system and technology department of the Obninsk INPE. Scientific interests: mathematical modelling, stochastic methods, computer experiment, gravitational astronomy, theory of fractal dimensionality, theory of images, topological spaces.

A.V. Nakin - post-graduated student at the material science department of the Obninsk INPE. Scientific interests: computer experiments in the field of physics of the solid body.

V.I. Plyaskin - Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Obninsk INPE, graduated from the

Moscow Physics and Engineering Institute. Scientific interests: experimental and theoretical nuclear physics.

N.P. Savelyev – post-graduate student of the common and special physics department of OINPE, graduated from the Obninsk INPE in 1997. Scientific interests: theory of nuclear reactions.

I.A. Shevtsov - researcher of the automatic, control and diagnostic department of the Obninsk INPE, graduated from the OINPE in 1989. Scientific interests: diagnostics of components in nuclear power installations.

I.A. Tchusov - Cand.Sci. (Engineering), Associate Professor of the thermal physics department of the Obninsk INPE, graduated from the Obninsk INPE in 1991. Scientific interests: heat and mass exchange in nuclear power installations, hydrodynamics and heat exchange in flows with physico-chemical interactions.

A.I. Trofimov - Dr.Sci. (Engineering), Professor, member of AEPRF Academy. More 300 publications in the field of automatic systems for measurement devices.

M.A. Trofimov – post-graduated student at the automatic, control and diagnostic department, graduated from the OINPE in 1996. Scientific interests: diagnostics of the equipment of nuclear power installations.

M.M. Troyanov – Cand.Sci. (Phis.-Math.), graduated from the Moscow State University in 1976. Scientific interests: physics of atmosphere.

S.A. Vinogradov - Cand.Sci. (Engineering), graduated from the Obninsk INPE in 1989. Scientific interests: design of diagnostic systems for NPPs.

E.A. Yas'ko – graduated from the Leningrad Engineering-Building Institute in 1962. Leading programmer in VNIPIET, Sankt-Petersburg. Scientific interests: systems of automated designing, computational examinations in the field of ecological modelling.