

УДК 621.039.58:519.7

# О ПОКАЗАТЕЛЯХ НАДЕЖНОСТИ КОМПЛЕКСА "ОБЪЕКТ ЗАЩИТЫ - СИСТЕМА БЕЗОПАСНОСТИ"

**А.И. Перегуда**

*Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,  
г. Обнинск*



Предлагается математическая модель надежности автоматизированного технологического комплекса, состоящего из объекта защиты и системы безопасности, являющаяся наложением альтернирующих процессов восстановления. Получены соотношения для вероятности того, что авария наступит на интервале времени  $[0, t]$ , вероятность наступления первой аварии в случаях восстанавливаемых элементов АТК и с временным резервом, коэффициент безостановочности и среднее число остановок комплекса. Изучение асимптотических свойств математической модели позволило записать указанные показатели надежности в простом виде, а именно, через стационарные коэффициенты готовности элементов комплекса. Рассмотрен ряд частных случаев и для них приведены соответствующие соотношения.

## ВВЕДЕНИЕ

Использование опасных технологий потребовало включения в состав оборудования, реализующего эти технологии, систем безопасности (СБ). При нормальном функционировании объекта защиты (ОЗ) системы безопасности не нужны, тогда как при нарушении нормального функционирования ОЗ системы безопасности переводят аварийные ситуации в ранг неопасных. Следовательно, системам безопасности отводится важная роль обеспечения безопасности функционирования, но они не являются средством, обеспечивающим надежную работу ОЗ. Эту особенность функционирования СБ требуется учитывать при оценке показателей надежности и вероятностного анализа безопасности систем.

Однако есть достаточно обширный класс систем, состояние которых зависит от последовательности отказов и восстановлений элементов на промежутке времени от начала функционирования до текущего момента времени (системы с периодическим контролем, профилактическим обслуживанием и т.п.). К таким системам следует отнести и комплекс, состоящий из объекта защиты и системы безопасности. Показатели надежности последовательностных систем в заданный момент времени являются функционалами, а не функциями от распределения наработок элементов до отказа и времени их восстановления.

При разработке математических моделей надежности последовательностных систем необходимо учитывать особенности функционирования их элементов, объекта защиты и системы безопасности, объединяя в комплекс "объект защиты - система безопасности". В [1] для анализа надежности такой системы использовались неодно-

родные марковские процессы. В предложенной математической модели процессы функционирования ОЗ и СБ независимы, и наработки на отказ этих систем предполагались экспоненциально распределенными. Кроме того, в предлагаемой модели для учета последствий отказов компонент комплекса необходимо разделять конечные состояния на два класса, соответствующих состоянию аварии и состоянию остановки. Используемая математическая модель надежности хорошо описывала процесс функционирования комплекса при малых временах, но, к сожалению, не позволяла учитывать конечное время восстановления элементов комплекса, состоящего из объекта защиты и системы безопасности. Из-за приведенных недостатков марковской модели надежности были использованы более сложные, но в то же время и более общие модели, основанные на применении теории восстановления и теории регенерирующих случайных процессов [2,3].

Дальнейшим развитием упомянутых работ, как представляется, является учет реальных особенностей функционирования элементов комплекса, как-то: структуры, многофункциональности системы безопасности, режимов профилактического контроля исправности СБ и др.

В этой работе предметом изучения является совокупность объекта защиты и системы безопасности с их функциональными связями, в дальнейшем называемая автоматизированным технологическим комплексом "объект защиты - система безопасности" (АТК "ОЗ-СБ"). Здесь будут рассмотрены математические модели надежности, позволяющие вычислять показатели надежности АТК, учитывая все траектории процессов функционирования, исходом которых являются как аварии, так и остановка АТК "ОЗ-СБ".

### ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим процесс функционирования системы, состоящей из объекта защиты и системы безопасности. Система безопасности может оказаться в состоянии отказа либо из-за скрытого отказа, либо из-за ложного отказа. Система безопасности выполняет одну единственную функцию – останов ОЗ при выходе его параметров из допустимых пределов. Скрытый отказ СБ приводит к такому нарушению в функционировании автоматизированного технологического комплекса, при котором не вырабатывается защитное воздействие на отказ ОЗ, тогда как ложный отказ СБ приводит к самопроизвольному формированию защитного воздействия при исправном ОЗ. На рис. 1 приведена графическая модель функционирования АТК "ОЗ-СБ", отражающая эволюцию комплекса "объект защиты - система безопасности".

На рис. 1 горизонтальные линии (пунктирные) отражают переходы из состояния в состояние элементов АТК, а переходы, показанные вертикальными и косыми (сплошными) линиями, – переходы АТК.

В соответствии с описанием процесса функционирования состояния диаграммы обозначают следующее: 0 - состояние исправной работы ОЗ; 1 - состояние отказа ОЗ; 2 - состояние скрытого отказа системы безопасности; 3 - исправной работы СБ; 4 - ложного отказа СБ. Если ОЗ окажется в состоянии 1, а СБ в состоянии 3, то АТК перейдет в состояние 5 - состояние аварии АТК. Под аварией будем понимать событие, заключаю-

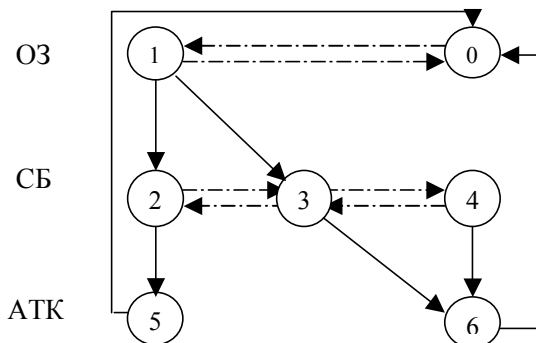


Рис. 1. Диаграмма состояний и переходов АТК "ОЗ-СБ"

щееся в крупном нарушении режимов работы системы, приводящем к созданию опасных условий для жизни человека и окружающей среды. Все остальные возможные ситуации, в чем нетрудно убедиться, рассматривая возможные комбинации составляющих АТК, приводят к состоянию б - состоянию останова объекта защиты. Переходы из состояния б в состояние 0 осуществляются в результате проведения планово-восстановительных мероприятий. Из диаграммы переходов и состояний АТК видно, что состояния 5 и б являются несовместными и конечными состояниями, а это обстоятельство позволяет анализировать траектории процессов функционирования, исходом которых является состояние 5 или б, отдельно. Таким образом, составление диаграммы состояний и переходов комплекса "ОЗ-СБ" позволяет классифицировать отказы элементов комплекса по последствиям, которые они вызывают.

Здесь будем рассматривать математическую модель надежности комплекса и вычислять соответствующие показатели надежности, без каких-либо предположений о законах распределения.

### РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ. ВЕРОЯТНОСТЬ АВАРИИ АТК

Автоматизированный комплекс "объект защиты - система безопасности" будет функционировать безаварийно, если отказы объекта защиты возникают во время исправной работы системы безопасности. Рассмотрим отдельно процессы функционирования системы безопасности и объекта защиты. Пусть система безопасности исправно функционирует время  $\chi_{11}$  и отказывает, а на восстановление ее исправности затрачивается время  $\eta_1$ . После восстановления СБ, т.е. в момент времени  $\chi_{11} + \eta_1$ , система безопасности снова выполняет свои функции. После первого восстановления СБ, исправно проработав время  $\chi_{12}$ , снова отказывает, и опять требуется время  $\eta_2$  на ее восстановление. Третий цикл функционирования начинается в момент  $\chi_{12} + \eta_2$  и т.д.

Обозначим через  $\eta_i$  - время восстановления системы безопасности на  $i$ -м цикле восстановления, через  $G_i(x) = P(\eta_i \leq x) = G_1(x)$  - функцию распределения случайной величины  $\eta_i$ . Пусть  $\chi_{1i}$  - наработка на отказ СБ на  $i$ -ом цикле восстановления, а ее функция распределения  $F_{1i}(t) = P(\chi_{1i} \leq t) = F_1(x)$ . Случайные величины  $\chi_{1i}$ ,  $\eta_i$  взаимно независимы и одинаково распределены для всех  $i \geq 1$ . Таким образом, последовательность  $\{(\chi_{1i}, \eta_i), i=1,2,3,\dots\}$ , образованная независимыми одинаково распределенными случайными величинами  $\{\chi_{1i}, i \geq 1\}$  и  $\{\eta_i, i \geq 1\}$ , образует альтернирующий процесс восстановления.

Теперь рассмотрим процесс функционирования объекта защиты. Объект защиты, исправно проработав время  $\xi_1$ , отказывает, а следовательно, вследствие отказа ОЗ на АТК возникает аварийная ситуация. После этого АТК восстанавливается в продолжение времени  $\gamma_1$ , а затем после восстановления начинается новый цикл функционирования комплекса "ОЗ-СБ". Здесь мы предполагаем, что восстановление ОЗ полное. Продолжительность второго цикла функционирования ОЗ равна  $\xi_2 + \gamma_2$ , а затем следует третий цикл продолжительности  $\xi_3 + \gamma_3$  и т. д. (см. рис.2).

Таким образом, в процессе функционирования объекта защиты генерируются две последовательности  $\{\xi_i, i \geq 1\}$ ,  $\{\gamma_i, i \geq 1\}$  независимых одинаково распределенных случайных величин, которые образуют последовательность  $\{(\xi_i, \gamma_i), i \geq 1\}$ . Функцию распределения случайной величины  $\gamma$  обозначим через  $G(x) = P(\gamma \leq x)$ , а распределе-

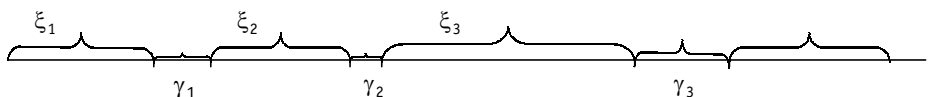


Рис. 2. Альтернирующий процесс восстановления  $\{(\xi_i, \gamma_i), i \geq 1\}$

ние величины  $\xi - F_{\xi}(x) = P(\xi \leq x)$ . Очевидно, что описанный выше процесс полностью характеризуется функциями  $G(x), F_{\xi}(x)$ , которые порождают альтернирующий процесс восстановления.

Если же объект защиты откажет тогда, когда система безопасности будет находиться в неисправном состоянии, то АТК "ОЗ-СБ" окажется в состоянии 5 (см. рис. 1), т.е. в состоянии аварии. Таким образом, процесс функционирования объекта защиты (в этом контексте) является определяющим, т.к. он задает моменты регенерации комплекса "объект защиты – система безопасности", характеризующегося продолжительностью цикла регенерации  $\tau = \xi + \gamma$ . Подобная ситуация рассмотрена в [2,3]. Здесь мы будем предполагать, что возникновение неисправности объекта защиты не всегда приводит к отказу, и неисправность проявляется в виде отказа ОЗ лишь тогда, когда время пребывания в неисправном состоянии объекта защиты превышает некоторую величину  $\alpha$ . В такой ситуации система безопасности может вырабатывать адекватное защитное воздействие в интервале времени  $[\xi, \xi + \alpha]$ . Время устранения отказа составит величину  $\gamma$ , имеющую произвольную функцию распределения  $G_{\gamma}(x) = P(\gamma \leq x)$ . Очевидно, что в сделанном выше предположении нет ничего противоземного, т.к. наличие времени перерастания неисправности в отказ можно объяснить инерционностью технологических процессов, протекающих в объекте защиты. Здесь мы предполагаем, что величина  $\alpha$  - случайная, распределенная с произвольным законом  $A(t) = P(\alpha \leq t)$ . По сути дела величина  $\alpha$  - это резерв времени. Заметим, что часто при проектировании технических систем вводят средства временного резерва и особенно просто это решается в вычислительной технике.

Не останавливаясь более на подробностях описания процесса функционирования системы безопасности, напомним, что он представляется как чередование интервалов "работа" – "восстановление", которым соответствуют независимые одинаково распределенные случайные величины  $\{\chi_{1i}, i \geq 1\}$  и  $\{\eta_i, i \geq 1\}$ , образующие альтернирующий процесс восстановления  $\{(\chi_{1i}, \eta_i), i \geq 1\}$ .

После возникновения неисправности объекта защиты, если она была обнаружена, производится восстановительная работа продолжительности  $\gamma_1$ , а затем после восстановления начинается новый цикл безаварийного функционирования комплекса "ОЗ-СБ". Если неисправность возникнет тогда, когда система безопасности будет восстанавливаться, то она не будет обнаружена и, естественно, не будет восстановлена в течение времени  $\alpha$ , и в таком случае неисправность перерастает в отказ объекта защиты. Следовательно, в этом случае авария на АТК "ОЗ-СБ" возможна лишь только тогда, когда неисправность, а затем и последующий отказ объекта защиты приходится на интервал восстановления СБ. Таким образом, первый цикл регенерации составит время  $\xi_1 + \alpha_1 + \gamma_1$ . За первым циклом следует второй, а затем третий и т.д., образуя регенерирующий процесс восстановления  $\{(\xi_i, \alpha_i + \gamma_i), i \geq 1\}$ .

Если же объект защиты откажет тогда, когда система безопасности будет находиться в неисправном состоянии, то АТК "ОЗ-СБ" окажется в состоянии 5 (см. рис. 1), т.е. в состоянии аварии. Учитывая выше сказанное, критерий аварии комплекса можно записать так:

$$\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi, \quad \xi + \alpha < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i)$$

или

$$\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha.$$

Обозначим вероятность аварии объекта защиты за время  $(0, t)$  через  $P_a(t)$ . Функция  $P_a(t)$  удовлетворяет интегральному уравнению

$$P_a(t) = \varphi_1(t) + \int_0^t P_a(t-z) dF_\tau(z), \tag{1}$$

где  $F_{\tau_1}(x) = P(\tau_1 \leq x) = P(\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 \leq x)$  - функция распределения первого цикла регенерации, впрочем,  $F_{\tau_1}(x) = F_\tau(x)$ ,  $\varphi_1(t) = \sum_{n=1}^{\infty} M J_{\xi \leq t} \prod_{i=0}^{n-1} J_{(\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi \leq \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1}$  - вероятность аварии комплекса на первом цикле восстановления альтернирующего процесса  $\{(\xi_j, \alpha_j + \gamma_j), j \geq 1\}$ . Покажем это. Авария АТК может быть реализована по одному из двух возможных сценариев:

- 1)  $\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1$  при условии  $\xi_1 < t \leq \xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1$ ,
- 2)  $\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1$  при условии  $\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 < t$ ,

где случайные величины  $\xi_1, \gamma_1$  понимаются как первая наработка на отказ и время первого восстановления ОЗ. Тогда вероятность аварии  $P_{an}(t)$  комплекса за время  $(0, t)$  на  $n$ -ом восстановительном цикле системы безопасности будем определять по формуле полного математического ожидания

$$\begin{aligned} P_{an}(t) &= \\ &= M \left( J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 < t \leq \xi_1 + \alpha_1 + \gamma_1} + J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 < t} \right) = \\ &= M \left( J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 \leq t} - J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 \leq t} + \right. \\ &+ \left. J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 \leq t} + J_{\xi_1 + \gamma_1 \leq t} P_{an}(t - \xi_1 - \gamma_1 - \alpha_1) \right) = \\ &= M \left( J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 \leq t} + J_{\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 \leq t} P_{an}(t - \xi_1 - \gamma_1 - \alpha_1) \right). \end{aligned}$$

При выводе соотношения для  $P_{an}(t)$  учитывалось то обстоятельство, что условие  $\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1 < t$  означает, что первый цикл регенерации завершился в момент времени  $\xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1$ , после чего комплекс еще проработал оставшееся время  $t - \xi_1 - \alpha_1 - \gamma_1$ . А условие  $\xi_1 < t \leq \xi_1 + \gamma_1 + \alpha_1$  означает, что первая авария наступила раньше времени  $t$  и устранена была позже этого времени, т.е. комплекс более не функционировал на интервале времени  $(0, t)$ . Суммируя записанное соотношение по  $n$  и обозначая

$$P_a(t) = \sum_{n=1}^{\infty} P_{an}(t), \text{ имеем (1). Функция } \varphi_1(t) \text{ определяется соотношением}$$

$$\varphi_1(t) = \varphi(t) + \int_0^t H_1(x) dF_\xi(x) - \int_0^t H_1(x) dF_{\xi+\alpha}(x),$$

где  $F_{\xi+\alpha}(x) = P(\xi + \alpha \leq x)$  - функция распределения случайной величины  $\xi + \alpha$ .

Вычислим функцию  $\varphi_1(t)$ , для чего будем использовать свойства индикаторов событий, преобразуя функцию  $\varphi_1(t)$  так:

$$\varphi_1(t) = \sum_{n=1}^{\infty} M \left( J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq \xi_1 < \sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1} J_{\xi_1 \leq t} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} M \int_0^t \left( J_{\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq x} - J_{\sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) - \alpha_1 \leq x} \right) dF_\xi(x) =$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t (P(\sum_{i=0}^{n-1} (\chi_{1i} + \eta_i) + \chi_{1n} \leq x) dF_{\xi}(x) - \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t P(\sum_{i=0}^n (\chi_{1i} + \eta_i) \leq x) dF_{\xi+\alpha}(x) = \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t (F_{\chi_1} * (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n-1)})(x) dF_{\xi}(x) - \\
 &\quad - \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi}(x) + \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi}(x) - \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi+\alpha}(x).
 \end{aligned}$$

Нетрудно показать, что первые две суммы – это вероятность первой аварии АТК “03-СБ” при  $\alpha = 0$ , т.е.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t (F_{\chi_1} * (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n-1)})(x) dF_{\xi}(x) - \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi}(x) = \int_0^t \int_0^x \bar{G}_1(x-y) dH_0(y) dF_{\xi}(x),$$

а оставшиеся две суммы следует преобразовать. Легко обнаружить, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi}(x) - \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t (F_{\chi_1} * G_1)^{*(n)}(x) dF_{\xi+\alpha}(x) = \int_0^t H_1(x) dF_{\xi}(x) - \int_0^t H_1(x) dF_{\xi+\alpha}(x)$$

где  $H_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} ((F_{\chi} * G_1)^{*(n-1)} * F_{\chi})(x)$  и  $H_1(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (F_{\chi} * G_1)^{*(n)}(x)$  - функции 0 - восстановления и 1 - восстановления соответствующего альтернирующего процесса восстановления [4]. Тогда свободный член уравнения (1)  $\varphi_1(t)$  запишем так:

$$\varphi_1(t) = \varphi(t) + \int_0^t H_1(x) dF_{\xi}(x) - \int_0^t H_1(x) dF_{\xi+\alpha}(x) = \varphi(t) + \varphi_0(t).$$

На этом и окончен вывод соотношения (2).

Поскольку уравнение (1) является уравнением в свертках, то для его решения будем использовать стандартный метод решения - преобразование Лапласа-Стилтьеса. Используя указанное преобразование, получаем

$$\tilde{P}_a(s) = \tilde{\varphi}_1(s) + \tilde{P}_a(s) \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s),$$

где  $\tilde{P}_a(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} dP_a(t)$ ,  $\tilde{\varphi}_1(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} d\varphi_1(t) = \tilde{\varphi}(s) + \tilde{\varphi}_0(s)$  и

$$\tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} dF_{\xi+\alpha+\gamma}(t) = M e^{-s(\xi+\gamma+\alpha)} - \text{соответствующие преобразования Лапласа-}$$

Стилтьеса функций  $P_a(t)$ ,  $F_{\xi+\alpha+\gamma}(t)$  и  $\varphi_1(t)$ , тогда

$$\tilde{P}_a(s) = \frac{\tilde{\varphi}_1(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} = \frac{\tilde{\varphi}(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} + \frac{\tilde{\varphi}_0(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)},$$

где  $\tilde{\varphi}(s) = K_{Hz}^{CB} \tilde{F}_{\xi}(s)$ , полученная в [3]. Преобразуем функцию  $\tilde{\varphi}_0(s)$  так:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\varphi}_0(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st} d(\int_0^t H_1(x) dF_{\xi}(x) - \int_0^t H_1(x) dF_{\xi+\alpha}(x)) = \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \int_0^{\infty} e^{-st} t dF_{\xi}(t) - \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \int_0^{\infty} e^{-st} t dF_{\xi+\alpha}(t) = \\
 &= \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \frac{d}{ds} \int_0^{\infty} e^{-st} dF_{\xi+\alpha}(t) - \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \frac{d}{ds} \int_0^{\infty} e^{-st} dF_{\xi}(t) = \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \frac{d}{ds} \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) - \frac{1}{M_{\chi_1} + M_{\eta}} \frac{d}{ds} \tilde{F}_{\xi}(s).
 \end{aligned}$$

При вычислении  $\tilde{\varphi}_0(s)$  использовалась элементарная теорема восстановления, отражающая сходимость рассматриваемого процесса восстановления к соответствующему стационарному процессу [5]. Теперь можем переписать второе слагаемое в виде

$$\frac{\tilde{\varphi}_0(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} = \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} \tilde{H}_1^{03}(s) \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) - \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} \tilde{H}_0^{03}(s) \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi}(s).$$

Нетрудно убедиться, что  $\frac{\tilde{F}_{\xi+\alpha}(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} = \tilde{H}_1^{03}(s)$  есть решение следующего уравнения восстановления для объекта защиты

$$H_1^{03}(t) = F_{\xi+\alpha}(t) + \int_0^t H_1^{03}(t-x) dF_{\xi+\alpha+\gamma}(x),$$

а  $\frac{\tilde{F}_{\xi}(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} = \tilde{H}_0^{03}(s)$  - решение уравнения восстановления для объекта защиты

$$H_0^{03}(t) = F_{\xi}(t) + \int_0^t H_0^{03}(t-x) dF_{\xi+\alpha+\gamma}(x).$$

Тогда решение уравнения (1) окончательно запишем

$$\begin{aligned} \tilde{P}_a(s) &= \frac{\tilde{\varphi}_1(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} + \frac{\tilde{\varphi}_0(s)}{1 - \tilde{F}_{\xi+\alpha+\gamma}(s)} = \\ &= K_{H_2}^{CB} \tilde{H}_0^{03}(s) + \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} \tilde{H}_1^{03}(s) \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) - \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} \tilde{H}_0^{03}(s) \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi}(s) \end{aligned}$$

и выполняя обратное преобразование Лапласа, получим

$$\begin{aligned} P_a(t) &= \\ &= K_{H_2}^{CB} H_0^{03}(t) + \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} H_1^{03}(t) L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) \right) - \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} H_0^{03}(t) L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi}(s) \right), \end{aligned}$$

где  $L^{-1}(\tilde{f}(s))$  - прообраз функции  $\tilde{f}(s)$ .

Пусть  $M\xi < \infty$ ,  $M\eta < \infty$ ,  $M\eta < \infty$  и  $M\alpha < \infty$ , тогда при  $t \rightarrow \infty$  имеет место неравенство

$$\frac{t}{M\xi + M\alpha + M\eta} \left( \frac{M\eta}{M\chi_1 + M\eta} - \frac{M\alpha}{M\chi_1 + M\eta} \right) \leq P_a(t) \leq \frac{t}{M\xi + M\eta} \frac{M\eta}{M\chi_1 + M\eta}.$$

Замечая, что  $\lim_{t \rightarrow \infty} H_1^{03}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} H_0^{03}(t) = \frac{t}{M\xi + M\alpha + M\eta}$ , получаем

$$\begin{aligned} P_a(t) &= \\ &= \frac{t}{M\xi + M\alpha + M\eta} \left( K_{H_2}^{CB} + \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) \right) - \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi}(s) \right) \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) = \tilde{F}_{\xi}(s) \tilde{F}_{\alpha}(s)$ .

Соотношение (2) перепишем так:

$$P_a(t) = \frac{t}{M\xi + M\alpha + M\gamma} \left( K_{Hz}^{CB} + \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln Me^{-s(\xi+\alpha)} \right) - \frac{1}{M\chi_1 + M\eta} L^{-1} \left( \frac{d}{ds} \ln Me^{-s\xi} \right) \right).$$

Нетрудно убедиться, что функция  $\ln x = g(x)$  - выпуклая функция, т.к. она лежит всюду под своими хордами или на них, т.е. удовлетворяет неравенству

$g(\beta x_1 + (1-\beta)x_2) \leq \beta g(x_1) + (1-\beta)g(x_2)$  для всех  $x_1 \leq x_2$  и  $0 \leq \beta \leq 1$ . Для такой выпуклой функции и случайной величины  $\xi$  справедливо неравенство Иенсена в следующем виде:  $Mg(\xi) \geq g(M\xi)$ . Используя неравенство Иенсена, перепишем  $\frac{d}{ds} \ln Me^{-s\xi}$  так:

$$\frac{d}{ds} \ln \tilde{F}_{\xi+\alpha}(s) = \frac{d}{ds} \ln Me^{-s(\xi+\alpha)} \leq \frac{d}{ds} M \ln e^{-s(\xi+\alpha)} = -\frac{d}{ds} sM(\xi+\alpha) = -M(\xi+\alpha).$$

Отсюда нижняя оценка для вероятности аварии примет вид

$$P_a(t) \geq \frac{t}{M\xi + M\alpha + M\gamma} \left( K_{Hz}^{CB} - \frac{M\alpha}{M\chi_1 + M\eta} \right) = \frac{t}{M\xi + M\alpha + M\gamma} \left( \frac{M\eta}{M\chi_1 + M\eta} - \frac{M\alpha}{M\chi_1 + M\eta} \right),$$

а верхнюю оценку получаем, полагая  $M\alpha = 0$ :

$$P_a(t) \leq \frac{t}{M\xi + M\gamma} \frac{M\eta}{M\chi_1 + M\eta}.$$

Поскольку при доказательстве использовалась элементарная теорема восстановления, то это означает, что рассмотрено функционирование АТК в установившемся стационарном режиме.

Учитывая, что  $\frac{M\eta}{M\chi_1 + M\eta} = K_{Hz}^{CB}$  - стационарный коэффициент неготовности системы безопасности, а  $\frac{M\xi}{M\xi + M\alpha + M\gamma} = K_{z2}^{O3}$  - стационарный коэффициент готовности и  $\frac{M\xi}{M\xi + M\gamma} = K_{z1}^{O3}$  - стационарный коэффициент готовности объекта защиты с резервом времени и без резерва соответственно, оценки, приведенные выше, можно представить в несколько ином виде:

$$K_{z2}^{O3} K_{Hz}^{CB} \left( 1 - \frac{M\alpha}{M\eta} \right) \frac{t}{M\xi} \leq P_a(t) \leq K_{z1}^{O3} K_{Hz}^{CB} \frac{t}{M\xi}.$$

Таким образом, получена достаточно точная двухсторонняя оценка вероятности аварии АТК "ОЗ-СБ", т.к. для систем энергетики, как правило, всегда выполняется условие  $M\alpha < M\eta$ .

### ПОКАЗАТЕЛИ БЕЗОСТАНОВЧНОСТИ

При изучении показателей безостановочности будем принимать во внимание только те реализации процесса функционирования автоматизированного технологического комплекса "ОЗ-СБ", которые приводят к остановке объекта защиты, т.е. будем рассматривать только те реализации процесса функционирования, исходом которых является состояние номер 6 диаграммы, изображенной на рис. 1. Поэтому необходимо ввести в рассмотрение дополнительные случайные величины, а также рассмотреть реализации процесса функционирования АТК, соответствующие состоянию 6. Остановка системы наступает лишь тогда, когда либо происходит отказ объекта от



защиты при исправной системе безопасности, либо наступил ложный отказ системы безопасности, т.к. и в том и в другом случаях система безопасности сформирует аварийный сигнал, приводящий к остановке объекта защиты. После остановки ОЗ выполняются мероприятия по восстановлению работоспособности системы, причем продолжительность восстановления зависит от вида отказа, а точнее от вида отказавшего оборудования комплекса.

Первоначально будем рассматривать случай, когда СБ более надежна, чем объект защиты, т.е.  $\chi_1 \geq \xi$ . В этом случае время до остановки АТК «ОЗ-СБ» определяется как минимум времени исправной работы до ложного отказа СБ и времени исправной работы ОЗ, т.е. выражением  $\xi \wedge \chi_2$ . Если же  $\xi \geq \chi_1$ , т.е. ложный отказ системы безопасности произошел до отказа объекта защиты, то производится неаварийный ремонт продолжительности  $\gamma_0$ . В случае выполнения условия  $\chi_2 \geq \xi$  производится аварийный ремонт в течение времени  $\gamma$ . Следовательно, в момент времени

$$\xi \wedge \chi_2 + \gamma_0 J_{\xi > \chi_2} + \gamma J_{\xi \leq \chi_2}$$

происходит регенерация АТК. Во втором случае, когда  $\chi_1 < \xi$ , т.е. система безопасности отказывает раньше ОЗ, причиной остановок АТК «ОЗ-СБ» являются только ложные отказы СБ, требующие затрат времени только на аварийный ремонт. Момент регенерации АТК в этом случае наступит в момент  $\chi_2 + \gamma_0$ . Таким образом, процесс функционирования АТК «ОЗ-СБ» будет регенерирующим с периодом регенерации

$$\tau = J_{\chi_1 \geq \xi} (\xi \wedge \chi_2 + \gamma_0 J_{\xi > \chi_2} + \gamma J_{\xi \leq \chi_2}) + J_{\chi_1 < \xi} (\chi_2 + \gamma_0).$$

Используя это математическое описание процесса функционирования АТК «ОЗ-СБ», можно вычислить такие показатели как среднее число остановок и коэффициент безостановочности.

**Коэффициент безостановочности.** Для вычисления коэффициента безостановочности сохраним ранее введенные обозначения и оставим те же предположения относительно законов распределения случайных величин. Среднее время исправной работы до остановки комплекса за время  $t$  обозначим через  $V(t)$ . Если  $\Theta(t)$  - случайное время до остановки комплекса за время  $t$ , то  $V(t)$  будет определяться соотношением  $V(t) = M\Theta(t)$ . Для получения соотношения для  $V(t)$  следует использовать формулу полного условного математического ожидания. Можно показать, что среднее время исправной работы до остановки комплекса за время  $t$  удовлетворяет уравнению

$$V(t) = f(t) + \int_0^t V(t-r) F_\tau(dr), \quad (3)$$

где  $f(t) = M(F_1(\xi \wedge t)M(\xi \wedge \chi_2 \wedge t)) + MF_1(\xi \wedge t)M(\chi_2 \wedge t)$ ,  $F_\tau(r) = P(\tau \leq r)$  - функция распределения случайной величины  $\tau$ .

Здесь не будем приводить вывод уравнения (3), т.к. он аналогичен выводу (1). Записанное уравнение принадлежит также к классическим уравнениям Вольтерра второго рода, поэтому вопрос о существовании и единственности его решения, как ранее указывалось, решен положительно. Можно найти его решение в явном виде, применяя преобразование Лапласа-Стилтьеса. В терминах преобразования Лапласа-Стилтьеса решение уравнения (3) запишем так:

$$\tilde{V}(s) = \frac{\tilde{f}(s)}{1 - \tilde{F}_\tau(s)},$$

здесь  $\tilde{V}(s) = \int_0^\infty e^{-st} dV(t)$ ,  $\tilde{f}(s) = \int_0^\infty e^{-st} df(t)$ ,  $\tilde{F}_\tau(s) = \int_0^\infty e^{-st} dF_\tau(t) = Me^{-s\tau}$ .

Остановимся на поиске решения уравнения (3) при  $t \rightarrow \infty$ , для чего опять воспользуемся тауберовой техникой вычислений. Вычислим  $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t)$  следующим образом:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{s \rightarrow 0} \tilde{f}(s) = M(\bar{F}_1(\xi)M(\xi \wedge \chi_2)) + MF_1(\xi)M\chi_2,$$

тогда

$$\lim_{t \rightarrow \infty} V(t)/t = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} f(t)}{\lim_{s \rightarrow \infty} (1 - \tilde{F}_\tau(s))/s} = \frac{M(\bar{F}_1(\xi)M(\xi \wedge \chi_2)) + MF_1(\xi)M\chi_2}{M\tau}.$$

Обозначим отношение  $\lim_{t \rightarrow \infty} V(t)/t$  через  $K_{60}$ , которое будем в дальнейшем называть коэффициентом безостановочности. Наименование показателя соответствует тому состоянию графа переходов, исходом которого является остановка АТК, тогда

$$K_{60} = \frac{M(\bar{F}_1(\xi)M(\xi \wedge \chi_2)) + MF(\xi)M(\chi_2)}{M(\bar{F}_1(\xi)(M(\xi \wedge \chi_2) + M\gamma_0 F_2(\xi) + M\gamma \bar{F}_2(\xi))) + MF_1(\xi)(M\chi_2 + M\gamma_0)}. \quad (4)$$

Рассмотрим частные случаи.

1). Пусть скрытые отказы системы безопасности отсутствуют. В этом случае есть просто коэффициент готовности системы, состоящей из двух последовательно соединенных элементов, времена исправной работы которых  $\xi$  и  $\chi_2$ , с независимым восстановлением, т.е.

$$K_2 = \frac{M(\xi \wedge \chi_2)}{M(\xi \wedge \chi_2) + M\gamma_0 MF_2(\xi) + M\gamma M\bar{F}_2(\xi)}.$$

2). Второй случай заключается в том, что всегда выполняется условие  $\xi > \chi_1$ , а это означает, что отказы объекта защиты приводят только к аварийным ситуациям.

Следовательно, причиной остановок автоматизированного технологического комплекса «ОЗ-СБ» будут лишь ложные отказы системы безопасности. Тогда соотношение (4) имеет смысл коэффициента готовности системы безопасности  $K_{22}$  относительно ее ложных отказов

$$K_{22} = \frac{M\chi_2}{M\chi_2 + M\gamma_0}.$$

3). Отсутствуют ложные отказы СБ. В этом случае, как нетрудно убедиться, коэффициент безостановочности можно переписать так

$$K_{60} = \frac{M(\xi \bar{F}_1(\xi))}{M(\xi \bar{F}_1(\xi)) + M\gamma M\bar{F}_1(\xi)}.$$

Полученное соотношение есть коэффициент готовности объекта защиты, учитывающий только те отказы, которые парюрует СБ.

Таким образом, коэффициент безостановочности АТК «ОЗ-СБ» позволяет учитывать функциональную связь объекта защиты и системы безопасности и сделать вывод, что эту связь не следует подменять простой схемой соединения элементов последовательного типа.

**Среднее число остановок АТК "ОЗ-СБ".** Этот показатель безостановочности можно получить на траекториях регенерирующего процесса, также соответствующего состоянию б диаграммы, изображенной на рис. 1. Тогда для среднего числа остановок за время  $t$  функционирования автоматизированного технологического комплекса «ОЗ-СБ»  $N(t)$  можно записать интегральное уравнение типа восстановления

$$N(t) = \varphi(t) + \int_0^t N(t-r)F_\tau(dr), \quad (5)$$

где  $\varphi(t) = P(J_{\chi_1 \geq \xi t}(\xi \wedge \chi_2) + J_{\chi_1 < \xi t} \chi_2 \leq t)$ .

Для решения уравнения (5) можно использовать различные методы, но для получения асимптотического решения применяют наиболее простой метод – использование элементарной теоремы восстановления, в соответствии с которой

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{N(t)}{t} = \frac{1}{M(\bar{F}_1(\xi)(M(\xi \wedge \chi_2) + M\gamma_0 F_2(\xi) + M\gamma \bar{F}_2(\xi))) + M F_1(\xi)(M\chi_2 + M\gamma_0)}.$$

Заметим, что приведенные здесь соотношения пригодны лишь для больших  $t$ . Поскольку реально существующие технические системы и созданы для эксплуатации продолжительное время, то для них и имеет смысл оценивать среднее число остановов комплекса.

**Резюме.** Таким образом, предложенная математическая модель надежности позволила без каких-либо предположений о законах распределения случайных величин получить соотношения для вероятности того, что авария наступит на интервале времени  $[0, t]$ , вероятность наступления первой аварии в случаях восстанавливаемых элементов АТК, коэффициент безостановочности и среднее число остановок комплекса. Следует отметить, что полученные результаты легко могут быть использованы в случае, когда система безопасности контролирует объект защиты по нескольким параметрам. Отметим, что первые два показателя характеризуют безопасность объекта защиты, тогда как остальные характеризуют техническую эффективность комплекса в целом. Математическая модель надежности исследовалась без каких-либо предположений кроме независимости случайных величин и именно это позволяет утверждать, что полученные результаты достаточно точны. Простота конечных соотношений делает излишним рассмотрение конкретного примера, иллюстрирующего их применимость.

### Литература

1. Малашинин И.И., Перегуда А.И. Расчет и оптимизация надежности систем аварийной защиты ядерных реакторов. - М.: Энергоатомиздат, 1985. - 112 с.
2. Перегуда А. И. Математическая модель надежности комплекса "объект защиты - система безопасности" // Надежность и контроль качества. - 1999. - №11.
3. Перегуда А.И. Вычисление показателей надежности комплекса "объект защиты – система управления и защиты" // Атомная энергия. - 2001. - Т. 90. - Вып. 6.
4. Байхельт Ф., Франкен П. Надежность и техническое обслуживание. Математический подход. - М.: Радио и связь, 1988. - 385 с.
5. Райншке К. Модели надежности и чувствительности систем. - М.: Мир, 1979. - 452 с.

Поступила в редакцию 17.12.2002

# РАЗВИТИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАМПАНИИ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА И ОЦЕНКИ РЕАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

**Е.А. Иванов**

*ГНЦ РФ-Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



Приведено описание методики для оценки величины неопределенности результатов расчета кампании ядерного реактора. Привлечены методы расчета коэффициентов чувствительности применительно к стационарным задачам переноса нейтронов и эволюционным задачам изотопной кинетики.

## **ВВЕДЕНИЕ**

Общая мировая тенденция в научных исследованиях в области ядерной техники прослеживается в увеличении доли детального расчетно-теоретического моделирования характеристик ядерных систем.

Развиваются математические методы, алгоритмы и программы, позволяющие комплексно представлять исследуемую систему как сложный объект, учитывать влияние вариаций исходных данных и приближений расчетных моделей, проводить детальный анализ разнородных физических процессов с учетом их реальной взаимосвязи, технических условий и ограничений [1, 2].

В статье затрагиваются вопросы комплексного моделирования кампании ядерного реактора. Предлагается схема такого построения модели и алгоритма расчета, который позволяет оценить влияние неопределенности исходных параметров (размеров, концентраций и плотностей материалов) и ядерных данных на рассчитанные параметры реактора в ходе кампании.

Для решения этой задачи предлагается алгоритм прямого расчета вариаций без использования сопряженных функций как на этапе расчета статических характеристик ядерного реактора, так и при моделировании изотопных превращений и связанных с ними функционалов.

## **ПРОБЛЕМЫ ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАМПАНИИ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА**

При разработке эксплуатационных режимов, конструкции или самой концепции энергетической установки необходимо решать сразу две прогнозные задачи. Это, во-первых, предсказание поведения установки с учетом возможных отклонений от основного режима работы и, во-вторых, определение критериев переноса результатов

---

© *Е.А. Иванов, 2003*

модельных исследований и исследований на прототипах установки на характеристики проекта. Решение этих задач требует обоснования точности предсказания состояния ядерного реактора, особенно тех состояний, которые не могут наблюдаться в условиях отработки установки на стендах и в лабораториях.

Кампания ядерного реактора обычно представляется динамической моделью с последовательным расчетом состояний. При этом каждый этап моделирования характеризуется малой, но конечной погрешностью, исследование которой должно составлять заметную часть расчетных работ. Определение качества расчетного кода сравнением с экспериментом также является нетривиальной задачей, т.к. данные и результаты эксперимента должны быть обработаны соответствующим образом, чтобы удовлетворять требованиям к бенчмарк-модели – точность, адекватность, оцененная неопределенность условий эксперимента и управляемая погрешность.

Таким образом, исследования вопросов моделирования кампании ядерных реакторов порождают следующие задачи:

- разработка методов и программных комплексов для оценок неопределенности экспериментальных данных в результате технологических отклонений и упрощения расчетных моделей;
- разработка критериев переносимости данных, полученных на одних системах, на другие либо разработка способов экспериментальных исследований на уменьшенной временной базе;
- оценка влияния погрешностей ядерных данных на результаты моделирования и решение обратной задачи – выработка стандартов данных для расчетов.

## **АЛГОРИТМ ПЕРЕНОСА ОШИБКИ И ОЦЕНКИ ПОГРЕШНОСТИ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ**

Определяющим параметром для любого ядерного реактора (по крайней мере, с точки зрения обоснования безопасности) является запас реактивности. Ошибка критического параметра ядерного реактора в некоторый момент времени определяется двумя составляющими:

- ошибкой непосредственного определения коэффициента размножения;
- ошибкой в концентрациях основных нуклидов.

Зависимость представима в виде суммы вкладов от двух источников ошибки:

$$\delta k_{ef} = \delta k_{st} + \delta k_{tr}, \quad (1)$$

где  $\delta k_{ef}$  - полное отклонение коэффициента размножения;  $\delta k_{st}$  - отклонение в стационарном реакторе;  $\delta k_{tr}$  - отклонение вследствие ошибки концентраций нуклидов. Упрощенно она раскрывается в виде следующей суммы:

$$\delta k_{ef} = \sum_{\varepsilon} \frac{\delta k}{\delta \varepsilon} \cdot \delta \varepsilon + \sum_{\varepsilon} \sum_{\rho} \frac{\delta k}{\delta \rho} \cdot \frac{\delta \rho}{\delta \varepsilon} \cdot \delta \varepsilon, \quad (2)$$

где  $\delta \varepsilon$  - вариация некоторого параметра (сечение в некоторой области или геометрическая характеристика);  $\frac{\delta k}{\delta \varepsilon}$  - функциональная производная коэффициента размножения по параметру;

$\frac{\delta k}{\delta \rho}$  - функциональная производная по изменению концентрации некоторого нуклида;

$\frac{\delta \rho}{\delta \varepsilon}$  - изменение концентрации нуклида от параметра (концентрации нуклидов изменяются в ходе кампании); суммирование проводится по всем нуклидам и всем определяющим параметрам. Для оценки погрешности приведенные

величины определяются расчетом, методика проведения которого представлена в настоящей работе.

**Постановка задачи и основные положения моделей**

В исследованиях ядерных реакторов оцениваются перечисленные ниже функционалы, для которых определяются отклонения, вызванные малыми вариациями плотностей материалов:

- распределение поля энерговыделения;
- спектр нейтронов и распределение отдельных скоростей ядерных реакций;
- изменение нуклидного состава в процессе выгорания;
- критическая загрузка и запас реактивности.

Оценки вариаций осуществляются с помощью коэффициентов чувствительности, и методика их расчета основана на следующих принципах:

- прямое моделирование отклонений основных реакторных функционалов без использования сопряженных функций;
- предполагается, что отклонения малы, т.е. они полагаются некоррелированными на уровне ядерных данных и влияний на реактивность;
- для анализа влияния вышеуказанных отклонений использованы методы малых возмущений в эволюционной задаче моделирования превращений нуклидов в ходе кампании [2].

**Формализм переноса ошибок при анализе превращений нуклидов**

Модель превращений нуклидов описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений (модель в сосредоточенных параметрах):

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \hat{B} \cdot \vec{p} + \hat{A} \cdot \Phi \cdot \vec{p}, \tag{3}$$

где  $\vec{p}(t) = [\rho_1(t), \rho_2(t), \dots, \rho_N(t)]^T$  - вектор - столбец концентраций нуклидов;  $\hat{B}$  - квадратная матрица превращений нуклидов в результате радиоактивных распадов;  $\hat{A}$  - квадратная матрица превращений, вызванных нейтронными реакциями;  $\Phi$  - интегральный поток нейтронов. Относительная вариация решения по изменению  $m$ -го параметра представляется в виде

$$\frac{\partial \vec{p}^{(l)}}{\partial \varepsilon_m} = \hat{p}^{(l-1)} \cdot \frac{\partial \vec{p}^{(l-1)}}{\partial \varepsilon_m} + \frac{\partial \hat{p}^{(l-1)}}{\partial \varepsilon_m} \cdot \vec{p}^{(l-1)}, \tag{4}$$

где  $\frac{\partial \vec{p}^{(l)}}{\partial \varepsilon_m}$  - коэффициент чувствительности к  $m$ -му параметру в  $l$ -м интервале;  $\frac{\partial \hat{p}^{(l)}}{\partial \varepsilon_m}$  - функциональная производная  $\hat{p}^{(l)}$ .

Формализм расчета чувствительности учитывает то, что при каждом изменении параметров системы (средних сечений) изменяется нейтронный поток так, чтобы компенсировать это изменение и сохранить общую тепловую мощность реактора. В случае малых отклонений скоростей процессов в системе, описывающей превращения нуклидов, погрешность определяется вариацией первого порядка.

Производная (частная) концентрации нуклида по изменению параметра определяется в программном комплексе PATRICK [2] с помощью дифференцирования по параметру формул аналитического решения; при этом вычисляются и производные по изменению потока нейтронов. В программном комплексе PATRICK [2] введен не-распадающийся и неисчезающий псевдонуклид, концентрация которого пропорцио-

нальна выделенной в рассматриваемой зоне энергии, т.е. представляет собой интеграл мощности. Каждый нуклид при распаде, захвате нейтрона (и при делении) превращается не только в дочерний нуклид (или, в случае деления ядра, в совокупность продуктов деления), но и вносит вклад в накопление энергии. Отклонения параметров в любой цепочке изотопных превращений сказываются на интегральной мощности.

В ядерном реакторе мощность поддерживается на одном уровне, поэтому необходимо учитывать, что любые возмущения концентраций нуклидов, спектров и сечений компенсируются изменениями нейтронного потока.

В модели, принятой для оценки погрешности это осуществляется введением соответствующего поправочного члена, который связан с вкладом каждого параметра в энерговыделение, необходимой поправкой потока и влиянием изменения потока на концентрацию рассматриваемого нуклида.

Таким образом, вводится вариация концентраций нуклидов, которая представляет собой функциональную производную, но полученную в условиях постоянства коэффициентов в матрице превращений нуклидов:

$$\frac{\delta \rho_k}{\delta \varepsilon_m} = \frac{\partial \rho_k}{\partial \varepsilon_m} - \frac{\partial \rho_k}{\partial \Phi_0} \cdot \left[ \frac{\partial E n}{\partial \Phi_0} \right]^{-1} \cdot \frac{\partial E n}{\partial \varepsilon_m}, \quad (5)$$

где  $\frac{\delta \rho_k}{\delta \varepsilon_m}$  - производная концентрации изотопа  $k$  по изменениям параметра  $m$ -го изо-

топа;  $\frac{\partial \rho_k}{\partial \Phi_0}$  - производная концентрации изотопа  $k$  по изменению амплитуды нейт-

ронного потока;  $\frac{\partial E n}{\partial \Phi_0}$  - производная концентрации псевдонуклида (пропорциональ-

ная общей выделившейся энергии) при вариациях параметра  $m$ -го изотопа;  $\frac{\partial E n}{\partial \varepsilon_m}$  -

производная количества выделившейся энергии по изменениям амплитуды потока

нейтронов;  $\frac{\delta \rho_k}{\delta \varepsilon_m}$  - вариация концентрации  $k$ -го изотопа при изменении параметра

$m$ -го изотопа.

Для оценки погрешности расчета запаса реактивности могут быть использованы коэффициенты чувствительности концентраций нуклидов к отклонениям спектральных индексов (отношений скоростей реакций) и коэффициенты чувствительности коэффициента размножения нейтронов к отклонениям концентраций нуклидов (статистические веса нуклидов):

$$\frac{\delta k_{эф}}{\delta a_{m,l}} = \sum_k \frac{\delta k_{эф}}{\delta \rho_k} \cdot \frac{\delta \rho_k}{\delta a_{m,l}}. \quad (6)$$

Неопределенности в сечениях нуклидов в рамках предлагаемой идеологии могут быть вычислены следующим образом. Воспользовавшись технологией расчета чувствительности к концентрациям нуклидов, вводим наряду с нуклидами, присутствующими в системе, псевдонуклиды, некоторые сечения которых равны дисперсии сечения. Тогда величина вклада ошибки констант в результат будет определяться как коэффициент чувствительности к этому нуклиду, построенный следующим образом:

$$\Delta_m = \rho_m \cdot \frac{\delta k_{эф}}{\delta \rho_{\sigma_m}}, \quad (7)$$

где  $m$  - некоторый индекс нуклида и области изменения сечения;  $\Delta_m$  - искомая ошибка функционала;  $\rho_{\sigma_m}$  - концентрация «нуклида-ошибки сечения»;  $\rho_m$  - концентрация истинного нуклида.

### Способ оценки малых отклонений концентраций нуклидов при моделировании переноса нейтронов

Существуют различные методы анализа малых отклонений по отношению к различным функционалам нейтронного поля [4], однако в настоящей работе использован прямой расчет отклонений с той лишь разницей, что проводилась аппроксимация полученных результатов и рассчитывалась производная полученной функциональной зависимости при стремлении возмущения к нулю. Использование сопряженных функций [4] оправдано тем, что из зависимостей отклонений тех или иных параметров, исходя из условий ортогональности, удается исключить члены второго порядка малости. Однако сопряженное решение (ценность) определено для некоторого заранее заданного функционала (фактически это проекция на фазовое пространство меньшей размерности), но для каждого конкретного случая сопряженный вектор необходимо пересчитывать (и переформулировать уравнение). Необходимо обеспечивать истинную (алгебраическую) сопряженность решения (условия ортогональности для скалярного произведения), что удается далеко не всегда как из-за ограничений численной схемы решения, так и из-за самой постановки задачи. В частности при использовании методов случайных испытаний результатом решения является набор интегральных характеристик, которые по определению не могут иметь сопряженного распределения.

Разработан набор управляющих программ, которые с помощью использования внешних отлаженных высокоточных кодов позволяют рассчитать полиномиальные коэффициенты и соответственно производные по параметру. Для моделирования полей нейтронов и расчета коэффициента размножения использован программный комплекс ММКФК-2<sup>1</sup> [1], который отличается достаточной для оценки погрешностей точностью и высокой производительностью. Полученные данные приближенно описываются полиномом второго порядка

$$k_{ef}(\rho_m) = a_0 + a_1 \cdot (\rho_m - \rho_{m,0}) + a_2 \cdot (\rho_m - \rho_{m,0})^2 + \dots, \quad (8)$$

где  $k_{ef}(\rho_m)$  - зависимость коэффициента размножения от концентрации  $m$ -го нуклида;  $\rho_m - \rho_{m,0}$  - изменение концентраций  $m$ -го нуклида (предположительно малое); набор безразмерных коэффициентов  $\{a_i\}$  определяется численно. Делается это на основе серии расчетов с изменением концентраций того нуклида, по концентрации которого и ищется отклонение:

$$\begin{cases} a_0 \approx k_0 \pm d_0 \\ a_0 + a_1 \cdot (\rho_{m,1} - \rho_{m,0}) + a_2 \cdot (\rho_{m,1} - \rho_{m,0})^2 \approx k_1 \pm d_1 \\ a_0 + a_1 \cdot (\rho_{m,2} - \rho_{m,0}) + a_2 \cdot (\rho_{m,2} - \rho_{m,0})^2 \approx k_2 \pm d_2, \end{cases} \quad (9)$$

где  $\{\rho_{m,0}, \rho_{m,1}, \rho_{m,2}\}$  - набор концентраций  $m$ -го нуклида, для которых необходимо произвести расчет;  $\{k_0 \pm d_0, k_1 \pm d_1, k_2 \pm d_2\}$  - набор рассчитанных коэффициентов

<sup>1</sup> Программный комплекс ММКФК-2, обеспечивающий высокоточные проектные расчеты, был выбран в качестве опорной программы из-за его высокой производительности.



размножения с соответствующими статистическими неопределенностями.

В нашем случае производная по концентрации нуклида определяется следующим образом:

$$\frac{\delta k_{ef}}{\delta \rho_m} = a_1. \quad (10)$$

Коэффициент чувствительности к изменению концентрации того или иного нуклида определяется простым умножением на соответствующую концентрацию:

$$\varepsilon_m = \rho_m \cdot \frac{\delta k}{\delta \rho_m}, \quad (11)$$

где  $\varepsilon_m$  - коэффициент чувствительности к концентрации нуклида;  $\gamma_m$  - ядерная концентрация нуклида;  $m$  - индекс нуклида (с учетом не только имени, но и зоны, где он размещен).

Статистическая неопределенность полученного результата также может быть оценена исходя из того, что искомый коэффициент является функцией от набора рассчитанных коэффициентов размножения и набора пробных концентраций нуклида:

$$\frac{\delta k}{\delta \rho_m} = a_1 = \text{fun}(k_0, k_1, k_2, \rho_{m,0}, \rho_{m,1}, \rho_{m,2}), \quad (12)$$

где  $k_0, k_1, k_2$  - значения коэффициента размножения при вариации концентраций нуклидов;  $\{\rho_{m,0}, \rho_{m,1}, \rho_{m,2}\}$  - вариации концентраций. В соответствии с формализмом переноса ошибки формула для оценки статистической ошибки выглядит следующим образом:

$$\sigma\left(\frac{\delta k}{\delta \rho_m}\right) = \sqrt{\sum_i \left[ \frac{\partial a_1(k_0, k_1, k_2, \rho_{m,0}, \rho_{m,1}, \rho_{m,2})}{\partial k_i} \cdot \sigma(k_i) \right]^2}. \quad (13)$$

Таким образом, с привлечением метода Монте-Карло, реализуется прямой расчет коэффициентов чувствительности и оценивается их неопределенность. Поскольку расчет проводился прямо, то в качестве параметров, для которых определены коэффициенты чувствительности, рассмотрены коэффициент размножения, скорости захватов для отдельных изотопов по выделенным зонам и распределения поля нейтронов.

Представленный алгоритм реализован для изменений концентраций нуклидов, однако он позволяет оценить и влияние малых изменений геометрии. Для этого комбинируются изменения концентраций нуклидов, содержащихся в той или иной зоне, и варьируется концентрация псевдоизотопа, влияющего на блокировку резонансного поглощения.

### Принцип эквивалентности и оценка влияния гетерогенности

Особое место занимает учет малых изменений формы компонент реактора, таких, например, как изменение диаметра твэла и топливного блока или отклонение их от первоначальной формы. С одной стороны, всегда существуют технологические допуски, т.е. есть некоторая статистическая неопределенность формы и размера любого элемента ядерного реактора; с другой стороны, полезно учесть также упрощения расчетных моделей.

В физике реакторов для того, чтобы рассчитывать характеристики гетерогенных реакторов в гомогенном приближении была выдвинута т.н. теорема эквивалентности [3], которая упрощенно гласит, что любой реальной системе всегда можно поста-

вить в соответствие такую гомогенную бесконечную среду, в которой внутригрупповой спектр нейтронов будет совпадать с искомым в конечной гетерогенной среде. Развитие вычислительных средств позволило отказаться от ряда инженерных методов, позволило исследовать ядерные реакторы, детально моделируя все процессы в их взаимосвязи и в реальной геометрии. Однако та же теорема эквивалентности используется в программных средствах [3], применяемых для подготовки нейтронных констант (универсальных нейтронных констант).

Кстати говоря, есть системы, которые в принципе детально не могут быть описаны. К таким системам относятся реакторы со случайным распределением топлива (засыпное топливо) либо с квазисжиженной активной зоной, а также ряд конфигураций, возникающих в аварийных состояниях реактора. Изменение геометрии приводит к условному изменению плотности материала (расчеты проводятся в геометрии среднего состояния), но кроме этого изменяется вероятность нейтрону испытать столкновение в том или ином блоке (топливе, оболочке и т.д.). Длина пробега быстрых нейтронов такова, что все неоднородности среды никак не сказываются на их распределении. Распределение плотности столкновений нейтронов, имеющих энергию, близкую к тепловой, почти изотропное, поэтому формоизменение для этих энергий также не сказывается на результате. Единственная область энергии, для которой есть различие между решетками различной формы при сохранении соотношений объемов, занятых топливом, конструкционными материалами, замедлителем и теплоносителем, – это область замедляющихся нейтронов. И почти весь эффект сказывается на резонансной экранировке сечений.

Поправки в величину резонансного интеграла вносятся с применением сечения разбавления (идеология констант БНАБ [3]). Для учета гетерогенных неоднородностей в библиотеке БНАБ вводится псевдонуclid D-SC [3], так называемый дельта-рассеиватель, который нужен для того, чтобы изменять только «сечение разбавления» [3].

Чувствительность коэффициента размножения к изменению концентрации этого нуклида позволяет оценить вклад такой деформации решетки активной зоны реактора, которая не приводит к изменению масс и объемов в рассматриваемом фрагменте системы. Эта же величина позволяет исследовать распространение нейтронов в системе со случайной неоднородностью.

В приближенных расчетах концентрация этого нуклида выбирается обратно пропорциональной определяющему размеру решетки (шагу и т.п.):

$$\delta_{sc} = \frac{a}{L} \cdot \frac{\Delta L}{L}, \quad (14)$$

где  $\delta_{sc}$  - изменение концентрации псевдонуcliда;  $L$  - характерный размер;  $\Delta L$  - изменение характерного размера;  $a$  - коэффициент пропорциональности, определяемый прямым модельным расчетом.

Тогда, вводя значения линейного отклика на малое изменение его концентрации, получим отклонение коэффициента размножения при малом изменении геометрии:

$$\Delta k_{ef} = \frac{\partial k_{ef}}{\partial \delta_{sc}} \cdot \frac{a}{L} \cdot \frac{\Delta L}{L}, \quad (15)$$

где  $\Delta k_{ef}$  - отклонение (неопределенность) коэффициента размножения;  $\frac{\partial k_{ef}}{\partial \delta_{sc}}$  - линейный отклик на изменение концентрации псевдоизотопа.

Для полного описания изменений коэффициента размножения в зависимости от вариаций геометрических параметров нужно включить вклад в изменение массы нук-

лидов в смежных областях решетки реактора (или критической сборки).

### Информационные потоки в комплексе программ

Для реализации переноса ошибок разработан код PERT2k2, который последовательно производит запуски MMKFK-2, варьируя концентрации нуклидов, в том числе и псевдонуклидов (D-SC и «нуклиды», где сечение заменяется его дисперсией). Результаты обрабатываются кодом и, таким образом, PERT2k2+ MMKFK-2 рассчитывают весь набор функционалов:  $\frac{\delta k}{\delta \rho_m}$  - производную коэффициента размножения от малых изменений концентрации каждого нуклида (включая чувствительность к псевдонуклидам -  $\frac{\delta k}{\delta \rho_{pseudo}}$ ),  $\frac{\delta a_l}{\delta \rho_m}$  - производную скоростей процессов от малых изменений концентрации каждого нуклида (включая чувствительность к псевдонуклидам -  $\frac{\delta a_l}{\delta \rho_{pseudo}}$ ),  $\frac{\delta \varphi_k}{\delta \rho_m}$  - вариацию потоков при изменении концентраций основных и псевдонуклидов ( $\frac{\delta \varphi_k}{\delta \rho_{pseudo}}$ ).

На основе полученных коэффициентов с помощью кода PATRICK производится расчет  $\frac{\delta \rho_k}{\delta \varepsilon_m}$  и т.д., что позволяет затем получить и отклонения коэффициента размножения, и распределения полей излучения, реализуя формулу (1).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методика, предназначенная для анализа неопределенности прогноза состояния ядерного реактора в ходе кампании, позволяет оценивать отклонения коэффициента размножения, распределения полей энерговыделения и скоростей процессов в статичном ядерном реакторе при малом изменении концентраций нуклидов; отклонения тех же параметров при вариации нейтронных сечений; изменения коэффициента размножения и распределения полей при малом изменении геометрических параметров элементов реактора; влияние неопределенности в скоростях процессов на результат моделирования эволюции поля нуклидов.

Для этого прямыми расчетами (без использования сопряженных решений) с помощью программного комплекса MMKFK-2 [1], реализующего в решении уравнения переноса метод Монте-Карло, в реальной геометрии рассчитываются коэффициенты чувствительности интегральных параметров (реактивности и скоростей процессов) к малым изменениям составов и размеров элементов реактора и к неопределенностям нейтронных сечений. Полноценное моделирование влияния неопределенности геометрических характеристик включает в себя использование принципа эквивалентности. Анализ влияния неопределенности ядерных данных проводится с применением псевдо-нуклидов, сечение взаимодействия которых пропорционально дисперсии исследуемых ядерных данных.

Перенос неопределенностей, получаемых в расчете стационарного состояния реактора, на результаты моделирования изотопного состава осуществляется кодом PATRICK [2]. Структурно устойчивый алгоритм аналитического решения позволяет не только оценивать чувствительность результата к малым неопределенностям исходных данных, но и за счет введения дополнительных псевдонуклидов, учитывать компенсацию в ядерном реакторе любых отклонений изменением нейтронного потока.

Рассматриваемая методика может быть использована в обосновании характеристик ядерных реакторов с жидким или газообразным топливом. Также можно использовать методику при анализе систем с топливом, обладающим внутренней случайной гетерогенностью (ВТГР).

Методика применима для оценки реакторного эксперимента. Фактически, на основе существующих программных единиц удалось создать программный комплекс, который в реальной геометрии «проецирует» неопределенность в условиях проведения эксперимента (циклограмма мощности, характеристики начальной загрузки и т.п.) на результаты расчетов и измерений.

Расчетная методика позволяет анализировать влияние неопределенностей ядерных данных на результаты расчета состояния реактора в ходе кампании. Соответственно может быть решена и обратная задача – формулировка требований по уточнению ядерных данных для тех или иных нуклидов.

Не удалось избавиться от некоторых упрощений и приближений. Как перспектива дальнейшего развития просматривается включение вторых производных в алгоритм аналитического моделирования эволюции нуклидного состава.

### **Литература**

1. *Полевой В.Б., Тарасова О.Б.* Комплекс программ ММКФК-2 для решения задач переноса нейтронов и гамма-квантов в физике реакторов: состояние и перспективы развития//»Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчетов ядерных реакторов». Сб. трудов семинара «Нейтроника-98», Обнинск, 28-30 октября 1998г. – Обнинск: ФЭИ, 1999. - С.128-131.
2. *Ivanov E.* Technique of uncertainties estimation in modeling of slow transient processes in nuclear reactors//Proc.M&C 2001 Salt Lake City, Utah, USA, September 2001.
3. *Баранов О.В.* Комплекс программ PRECON: Препринт ФЭИ-1847. - Обнинск, 1987.
4. *Gandini A.* Generalized perturbation Theory. Heuristic approach// Advantages in Nuclear Science and Technology. - V. 19, 1987.

Поступила в редакцию 3.11.2002

УДК 621.039.56

# ДИНАМИКА ПРОТОНА МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР

**Ю.В. Лисичкин\*, А.Г.Новиков\*\***

\* *Обнинский государственный технический университет атомной энергетики, г. Обнинск*

\*\* *ГНЦ РФ-Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



Представлены основные результаты систематических экспериментально-расчетных исследований динамики протона молекулы воды в температурном интервале (300-625)К, охватывающем всю область кривой сосуществования. Экспериментальная часть работы выполнялась с использованием двойных времяпролетных спектрометров ДИН-1М и ДИН-2ПИ, установленных соответственно на импульсных реакторах ИБР-30 и ИБР-2 (лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна). Получены параметры, определяющие механизм диффузии молекул воды, а также обобщенное частотное распределение в области межмолекулярных колебаний, и их температурная зависимость. Последние данные, в частности, могут быть использованы для расчета эффектов термализации нейтронов в соответствующем диапазоне температур. Дается физическая интерпретация результатов.

## ВВЕДЕНИЕ

В данной работе представлены основные результаты систематических экспериментально-расчетных исследований динамики протона молекулы воды в температурном интервале (300-625)К, охватывающем всю область кривой сосуществования.

Существует ряд причин, стимулирующих указанные исследования, начатые нами много лет назад:

- отсутствие систематических измерений рассеяния медленных нейтронов в широком диапазоне термодинамических (температура, давление) и кинематических переменных (передач энергии и импульса нейтрона), выполненных в унифицированных экспериментальных условиях и анализируемых на основе единой методики;
- расхождения между микродинамическими характеристиками молекулы воды, полученными различными авторами из экспериментов по рассеянию нейтронов;
- неудовлетворительное понимание поведения воды на молекулярном уровне вопреки довольно большому объему исследований этой жидкости различными экспериментальными и расчетно-теоретическими методами.

Но непреходящий интерес к изучению свойств воды (при повышенных, особенно околокритических температурах) на микроскопическом уровне диктуется не только задачами физики конденсированного состояния вещества. Многие практические приложения, в частности, задачи ядерной энергетики и других ядерных технологий, где вода используется при термодинамических параметрах, близких к критическим, так-

же стимулируют возрастание объема соответствующих исследований [1,2].

Экспериментальная часть этой работы выполнялась с использованием двойных времяпролетных спектрометров ДИН-1М [3] и ДИН-2ПИ [4], установленных соответственно на импульсных реакторах ИБР-30 и ИБР-2 (лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна). Измерения были проведены для температур 300, 400, 500, 550, 600 и 625 К, охватывающих практически всю область существования ее жидкой фазы. Во всех случаях вода в образцах находилась на линии сосуществования (насыщения). Использовались начальные энергии нейтронов  $E$  в диапазоне от 2 до 25 мэВ и интервал углов рассеяния  $10-120^\circ$ , что обеспечивало область передач волнового вектора  $0,3 - 2 \text{ \AA}^{-1}$ . Разрешение спектрометров в зависимости от энергии составляло примерно 4-5%. Образцы представляли набор наполненных бидистиллятом кварцевых или стальных капилляров, собранных в форме цилиндра высотой 160 и диаметром 120 мм; пропускание образцов по начальной энергии составляло 80%.

В процессе первичной обработки экспериментальные нейтронные спектры последовательно преобразовывались в абсолютные дваждыдифференциальные сечения (ДДС) рассеяния и структурно-динамический фактор (закон рассеяния). Абсолютная нормировка результатов проводилась по ванадию. При дальнейшем анализе экспериментальных данных использовалась модернизированная версия многоцелевого программного комплекса SLOWN [5], который позволяет рассчитывать ДДС (или структурно-динамический фактор) и его отдельные составляющие (квазиупругую, однофононную, многофононную) некогерентно рассеивающих веществ на основе той или иной динамической модели рассеивателя с учетом методических эффектов, главными из которых являются многократное рассеяние (МКР) нейтронов и конечное разрешение спектрометра. Общая схема анализа экспериментальных ДДС рассеяния (структурно-динамического фактора) включала в себя отдельное рассмотрение его квазиупругой и неупругой компонент. Подробности типичного эксперимента и обработки его результатов можно найти в [5,6].

### КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Цель анализа квазиупругого рассеяния состояла в получении информации о процессе самодиффузии, его механизме и температурной зависимости, а также о его корреляциях с другими релаксационными процессами в воде. С использованием комплекса программ SLOWN была разработана методика [6] выделения из полного ДДС рассеяния (структурно-динамического фактора) его квазиупругой составляющей с учетом эффектов многократного и неупругого рассеяния, а также разрешения спектрометра. Предполагая трансляционные и вращательные движения молекул воды некоррелированными, можно представить естественную линию закона квазиупругого рассеяния (ЗКУР) (структурно-динамического фактора) в форме [7, 8]

$$S_q(q, \varepsilon) = \int S_{tr}(q, \varepsilon') S_r(q, \varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon' = j_0(q\rho) S_{tr}(q, \varepsilon) + \sum_{\ell=1}^{\infty} j_{\ell}(q\rho) \int S_{tr}(q, \varepsilon') S_{\ell}(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon', \quad (1)$$

где  $S_{\ell}(\varepsilon) = \int F_{\ell}(t) \exp\left(-i \frac{\varepsilon}{\hbar} t\right) dt$ ;  $F_{\ell} = \langle P_{\ell}[\cos\Theta(t)] P_{\ell}[\cos\Theta(0)] \rangle$ ;  $P_{\ell}[\cos\Theta(t)]$  - полиномы Лежандра;  $j_{\ell}(q\rho)$  - сферические функции Бесселя;  $\Theta(t)$  - угол ориентации молекулы в момент времени  $t$ ;  $\rho$  - расстояние от центра тяжести молекулы до точки рассеяния (протона). Для  $q\rho < 2$  (1) можно представить как сумму двух термов [7]:

$$S_q(q, \varepsilon) = j_0^2(q, \rho) S_{tr}(q, \varepsilon) + j_{\ell}^2(q, \rho) \int S_{tr}(q, \varepsilon') S_{\ell}(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (2)$$

Таким образом, вращательная компонента линии ЗКУР проявляется в эксперименте как свертка с соответствующей трансляционной линией.

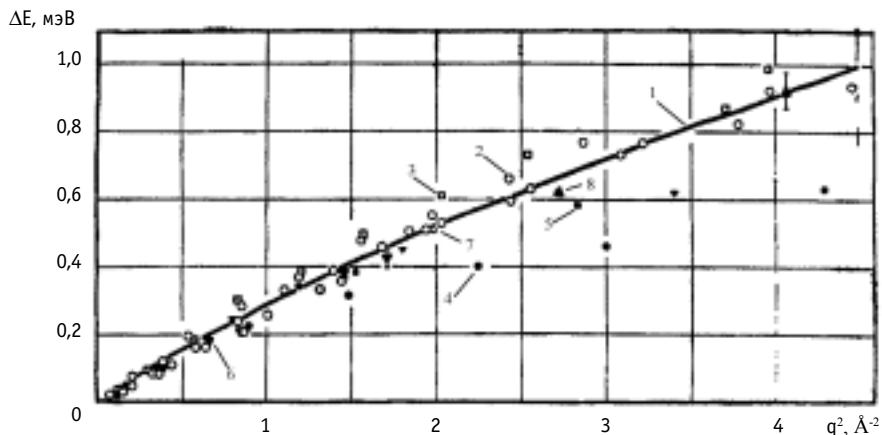


Рис.1. Полуширина естественной линии ЗКУР как функция  $q^2$  для комнатной температуры (300 К): 1 – описание экспериментальных точек моделью Оскотского-Иванова (соотношение (3)); результаты работ: 2 - [10], 3 - [11], 4 - [12], 5 - [13], 6 - [14]; 7 и 8 – [6]

Естественная линия ЗКУР была проанализирована по форме и полуширине. Анализ ее по форме, проведенный с использованием специальной программы, показал, что в интервале температур (300-600)К эта линия близка по форме к лоренциану. Такое поведение характерно для простых жидкостей и означает, что, по крайней мере, в условиях нашего эксперимента эффекты вращательной диффузии молекул воды заметным образом не проявляются.

Молекулярно-динамические расчеты диффузионного движения молекул воды [9] подтверждают, что эффекты их вращательной диффузии в условиях современного нейтронного эксперимента обнаружить весьма сложно.

Полуширина естественной линии ЗКУР как функция квадрата передачи импульса  $q^2$  при различных температурах представлена на рис. 1, 2.

Для описания этих кривых мы воспользовались моделью Оскотского [15]-Иванова [8] (ОИ), предполагающей, что процесс самодиффузии в воде носит сложный характер и представляет собой наложения двух механизмов перемещения молекул: скачкового и непрерывного. Первый характеризуется временем «оседлой» жизни молекулы, второй – коэффициентом непрерывной диффузии. В рамках модели ОИ в квазикристаллическом пределе естественная линия ЗКУР оказывается лоренцианом с полушириной

$$\Delta E(q, T) = \frac{2\hbar}{\tau_0} \left\{ 1 + D_0 q^2 \tau_0 - \frac{\exp[-q^2 \bar{u}^2]}{1 + [D - D_0] q^2 \tau_0} \right\}, \quad (3)$$

где  $D$  – полный коэффициент самодиффузии,  $\bar{u}^2$  – среднеквадратичная амплитуда колебаний молекулы,  $\tau_0$  – время «оседлой» жизни молекулы;  $D_0$  – коэффициент непрерывной диффузии центров колебаний (диффузии молекулы со своим окружением). Описав оптимальным образом набор эксперимен-

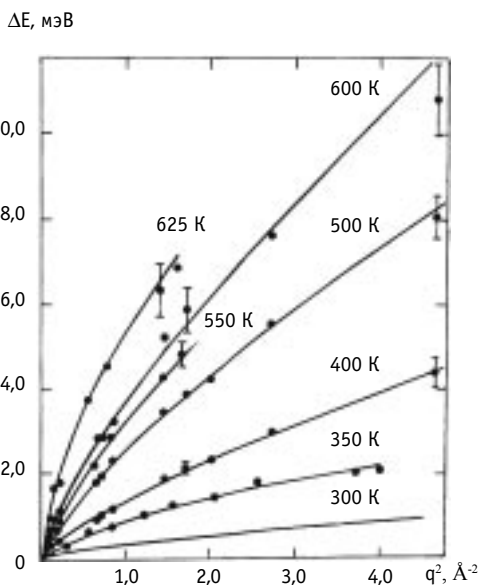


Рис. 2. Полуширина естественной линии ЗКУР как функция  $q^2$  для интервала температур (300-625К). Описание экспериментальных точек моделью Оскотского-Иванова

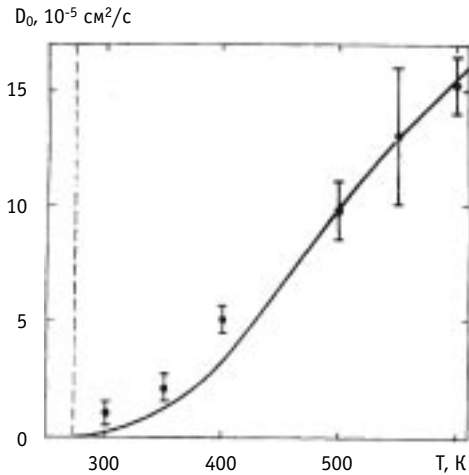


Рис. 3. Коэффициент непрерывной диффузии  $D_0$  как функция температуры: • – экспериментальные результаты; ———— расчет на основе выражения (4) [16]

тальных точек выражением (3), мы получили температурные зависимости входящих в него параметров .

Коэффициент непрерывной диффузии  $D_0(T)$  представлен на рис. 3

При интерпретации его температурной зависимости нами использовалась теория, развитая И.З. Фишером [16], которая дает для  $D_0$  выражение:

$$D_0(T) = \frac{kT}{16\pi\eta^2(T)\sqrt{G_\infty(T)\rho(T)}} \quad (4)$$

где  $\rho(T)$  - плотность вещества,  $\eta$  - сдвиговая вязкость,  $G_\infty$  - высокочастотный модуль сдвига. Из рис. 3 следует, что согласие расчета с экспериментом в целом удовлетворительное за исключением области низких температур, где эта теория может оказаться несправедливой.

Время оседлой жизни молекулы  $\tau_0$  представлено на рис. 4.

Описав набор экспериментальных данных  $\tau_0(T)$  выражением, характерным для активационных процессов

$$\tau_0(T) = \tau'_0 \exp(W_j / kT), \quad (5)$$

получаем энергию активации скачкового механизма, которая в интервале 300-400 К оказывается зависящей от температуры.

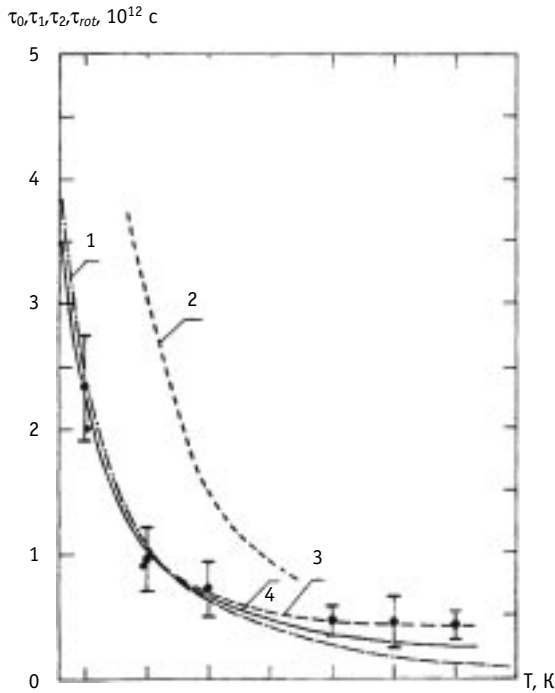


Рис.4. Температурная зависимость времени «оседлой» жизни  $\tau_0$  и ротационных времен корреляции:  $\tau_1$  – диэлектрической релаксации,  $\tau_2$  – ЯМР - релаксации; • -  $\tau_0$  [6], 1 -  $\tau_2$  [17]; 2 -  $\tau_1$  [18]; 3 -  $\tau_0$ , вычисленное из выражения (5), 4 -  $\tau_{rot}$  [6]

Рис. 4 демонстрирует также сравнение  $\tau_0(T)$  с временем вращательной корреляции молекул  $\tau_2(T)$ , полученным из измерений ЯМР-релаксации. Видно, что характерные времена трансляционных и переориентационных движений молекул воды, по крайней мере, в области низких температур близки по величине и по температурной зависимости. Это обстоятельство дает основание предполагать, что переориентация молекул происходит одновременно с их трансляционными перемещениями (т.е. вопреки сделанному выше предположению трансляционные и вращательные движения коррелированы). Если при этом переориентация совершается скачкообразно и на небольшие углы (при комнатной температуре на  $15-20^\circ$ ), то вклад вращательной диффузии в ЗКУР оказывается весьма сложным. Однако важно, что при этом полуширина



трансляционной части ЗКУР намного превышает полуширину вращательной и, следовательно, влияние вращательной диффузии на наблюдаемую естественную линию ЗКУР является слишком слабым, как и следует из (2) и результатов нашего эксперимента.

Представляется интересным сравнить  $\tau_0$  с максвелловским временем релаксации сдвиговых напряжений  $\tau_\mu$ . Последнее находится по выражению [19]:

$$\tau_\mu(T) = \eta(T)/G_\infty(T). \quad (6)$$

Как было найдено [20],  $\tau_\mu$  в интервале (300-600)К оказывается в 3-7 раз меньше  $\tau_0$ . Причина этого состоит, по-видимому, в существовании непрерывного механизма диффузии, усиливающего общую диффузионную подвижность молекул.

Следует отметить, что найденное выше значение  $\tau_\mu$  и среднее время жизни водородных связей  $\tau_b$ , получаемое из анализа экспериментов по деполяризованному релеевскому рассеянию света [21,22], в той области температур, где имеющиеся данные перекрываются, оказываются близки друг другу.

Используя найденные выше параметры ОИ-модели, мы можем оценить размеры диффузионных смещений, соответствующих обоим механизмам трансляционной самодиффузии:

$$\ell_j^2 \approx 6(D - D_0)\tau_0; \quad \ell_c^2 \approx 6D_0\tau_0, \quad (7)$$

где первое соотношение дает средний квадрат смещения за счет скачкообразной диффузии, а второе – непрерывной.

Оказывается, что для каждой из исследованных температур эти смещения близки по величине и, следовательно, оба механизма диффузии дают сравнимый вклад в общую диффузионную подвижность молекул воды. Таким образом, квазикристалличность воды, которая постулируется в целом ряде структурных моделей, даже при низких (близких к комнатной) температурах не является бесспорным фактом, и ее не следует переоценивать. Если в воде и существует льдоподобный квазикаркас, то он подвержен сильным флуктуационным деформациям, приводящим к заметному влиянию непрерывной диффузии даже при низких температурах. По нашим оценкам, основанным на теории Фишера [16], область жидкости, в пределах которой диффузионные движения можно считать скоррелированными, при 300 К охватывает 300-500 молекул, но с ростом температуры быстро уменьшается и при 500-600 К содержит лишь 5-10 молекул (т.е. 1-2 молекулы с их ближайшим окружением).

## НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Целью анализа неупругой составляющей ДДС рассеяния (структурно-динамического фактора) было получение информации о вращательно-колебательных движениях молекул воды в силовом поле соседей и характере межмолекулярных взаимодействий, каковыми в воде являются специальным образом организованные в пространстве водородные связи.

Основная динамическая характеристика, извлекаемая из анализа ДДС неупругого некогерентного рассеяния медленных нейтронов водой (неупругого структурно-динамического фактора) – обобщенное частотное распределение (ОЧР) (частотный спектр автокорреляционной функции скорости) протона. Поскольку диффузионные движения анализировались нами выше (при рассмотрении квазиупругого рассеяния) в данном разделе фактически рассматривается ОЧР, не включающее в себя диффузионную часть. На основе комплекса SLOWN была разработана специальная итерационная процедура получения ОЧР протона из экспериментальных ДДС с учетом эффектов МКР, многофононного и квазиупругого рассеяния [5].

На рис. 5 для примера показаны полученные нами ОЧР протона для температур

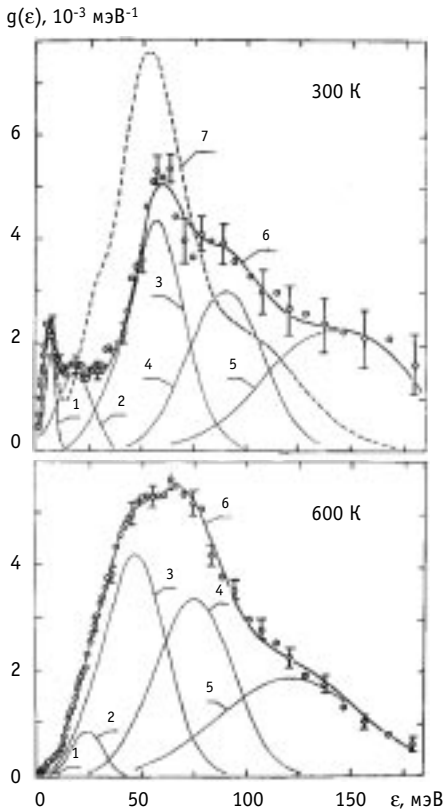


Рис. 5. Описание экспериментальных ОЧР аппроксимационными кривыми [23]: 1, 2 – трансляционные моды; 3, 4, 5 – либрационные моды; 6 – общая аппроксимационная кривая; 7 – априорная аппроксимационная кривая (MD-моделирование [24])

щью специальной программы была выполнена оптимальная подгонка модели к эксперименту на всех четырех температурах [23]. Результаты такой подгонки демонстрируются на рис. 5.

Анализ температурной зависимости параметров отдельных мод, полученной в итоге такого описания, в целом подтвердил заметную температурную деформацию трансляционных мод, наиболее существенную для первой (низкочастотной) (рис. 6), и проявляющуюся с ростом температуры тенденцию к понижению средних частот вращательных мод [23].

Имея в распоряжении ОЧР протона, по известным соотношениям и в определенных приближениях можно

300 и 600 К.

Область ОЧР, соответствующая внутримолекулярным колебаниям, не могла быть определена в условиях нашего эксперимента и поэтому конструировалась по литературным данным. Из рис. 5 видно, что основные температурные изменения ОЧР происходят при низких частотах, соответствующих трансляционным колебаниям молекулы как целого. Пик, соответствующий вращательным (либрационным) движениям, с ростом температуры несколько сдвигается в сторону низких частот. Для того, чтобы провести количественный анализ полученной нами температурной зависимости ОЧР, экспериментальные кривые были описаны аналитически. А именно, на каждой из температур ОЧР (его межмолекулярная область) представлялся суперпозицией пяти гауссианов, два из которых относятся к трансляционной полосе, а 3 - к вращательной полосе. Каждому гауссиану приписывалось три параметра: вес, положение и дисперсия. Столь грубая феноменологическая модель (модель пяти невзаимодействующих мод) находит, однако, определенное оправдание в результатах молекулярно-динамических расчетов [24]. С помо-

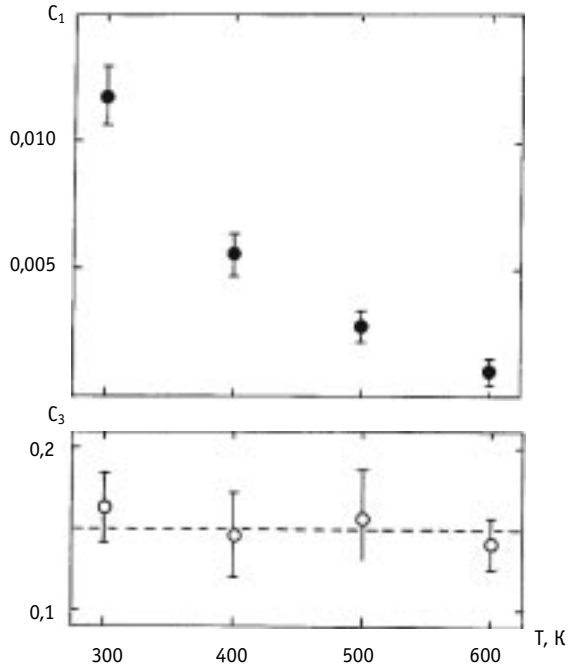


Рис.6. Температурная зависимость весов первой трансляционной и второй либрационной мод ( $C_1$ ) ( $C_3$ ) [23]

получить целый ряд других микродинамических характеристик частицы [25]:

- автокорреляционную скоростную функцию для трансляционного  $\psi_{tr}(t)$  и вращательного  $\psi_{lib}(t)$  движений; время структурной релаксации, оцененное из анализа формы  $\psi_{tr}(t)$  для  $T = 600$  К, около  $\sim 10^{-13}$  с, что близко к величине  $\tau_{\mu}$  для этой температуры;

- средний квадрат перемещения протона в зависимости от времени  $\bar{r}^2(t)$ ;

- среднеквадратичную амплитуду колебаний протона как функцию температуры  $\sqrt{\langle \bar{u}^2(T) \rangle}$ ;

- средний квадрат угла изгиба водородной связи  $\bar{\Theta}^2(T)$  в зависимости от температуры; полученные значения этой величины меньше, чем предсказываемые моделями Райса [26] и Попла [27];

- средние силовые постоянные для трансляционных и вращательных (либрационных) движений.

Кроме того, на основе полученных данных о температурной зависимости ОЧР воды были рассчитаны колебательная и конфигурационная части теплоемкости  $C_v$  воды во всем интервале существования ее жидкой фазы [28]; при этом величина и температурная зависимость конфигурационной части  $C_v^{conf}$  могут быть объяснены разрывом водородных связей при нагревании воды.

В частности, на рис. 7 показана среднеквадратичная амплитуда колебаний протона как функция температуры.

Обращает на себя внимание относительная независимость данной характеристики от температуры. Это связано с взаимной компенсацией двух эффектов: 1) отмеченной выше температурной деформацией (уменьшением веса) низкочастотной (первой трансляционной) области ОЧР (рис. 6), которая вносит основной вклад в величину среднеквадратичной амплитуды колебаний и 2) увеличением вклада либрационных мод в области низких частот, соответствующих трансляционным модам. Во избежание недоразумений, отметим, что средний квадрат смещения протона с учетом диффузионной моды растет с увеличением температуры.

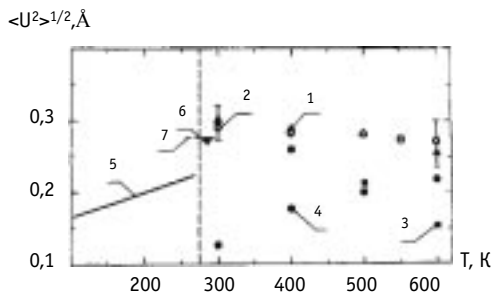


Рис. 7. Среднеквадратичная амплитуда колебаний протона в воде как функция температуры: 1 – расчет на основе полученного ОЧР [29]; 2 – из анализа интегральной интенсивности квазиупругого рассеяния [6]; 3, 4 – трансляционная и либрационная части соответственно; для льда: 5 - [30]; 6 - [31]; 7 - [32]

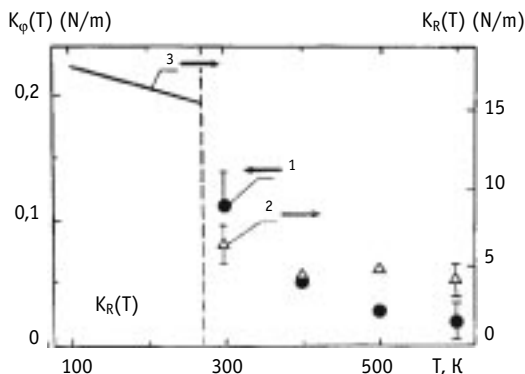


Рис. 8. Средние силовые постоянные для трансляционного движения: 1 – изгиба ( $K_{\phi}$ ); 2 – растяжения ( $K_R$ ); 3 –  $K_R$  для льда [17]

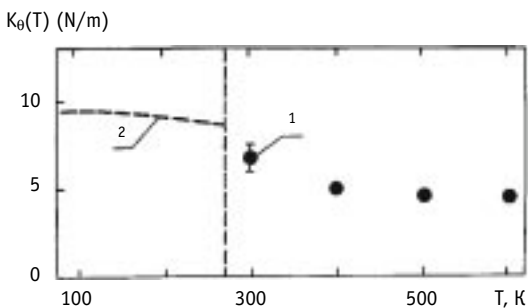


Рис. 9. Средняя силовая постоянная для вращательного движения  $K_{\theta}$ : 1 – вода [29], 2 – лед [17]

На рис. 8 и 9 представлены силовые постоянные для трансляционного и вращательного движения. Здесь предполагается, что трансляционное силовое поле описывается двумя силовыми постоянными  $K_\phi$  и  $K_R$ , соответствующими изгибу и растяжению водородных связей, а для вращательного движения силовая постоянная  $K_\theta$  усреднена по направлениям вращательного силового поля. Температурная зависимость этих силовых постоянных подтверждает заключение об относительно сильном изменении первой трансляционной моды и относительной стабильности вращательных (либрационных) мод при повышении температуры.

Представляется весьма интересным связать изложенные выше результаты с теми структурными изменениями, которые происходят в воде в соответствующем диапазоне температур. С этой целью нами был проведен сравнительный анализ температурных зависимостей полученных здесь динамических характеристик и структурных характеристик воды, взятых из работ [33,34].

Проведенный анализ позволил сделать следующие выводы.

- Температурная нестабильность трансляционной полосы ОЧР, колебания которой носят характер коллективных мод, связана с распадом элементов дальней упорядоченности (или распадом единой сетки водородных связей), имеющих место в воде при низких температурах.

- Относительная температурная стабильность вращательной полосы ОЧР, колебания которой носят характер локальных мод, связана с относительной температурной стабильностью ближней упорядоченности в воде. Однако и для вращательных характеристик при температурах 300-400 К наблюдается их некоторый температурный распад, также связанный с распадом единой сетки водородных связей.

- Отмеченные выше факторы являются следствием того, что в воде в области температур 300-400 К в результате распада единой сетки водородных связей происходит заметное ослабление интенсивности межмолекулярных взаимодействий. После этого межмолекулярные силы демонстрируют относительную температурную стабильность, определяясь, по-видимому, в основном, взаимодействием ближайших соседей.

## Литература

1. Proc. of the First Int. Symp. on Supercritical Water-Cooled Reactors. Design and Technology. Univ. of Tokyo, Japan, November 6-9, 2000.
2. Кириллов П.Л. //Теплоэнергетика. – 2001. - № 12. - С. 6-10.
3. Liforov V.G., Nikolaev M.N., Novikov A.G. et al. Double slow neutron spectrometer at IBR reactor. In: Research Application of Nuclear Pulsed System: Proc. of Panel. Dubna: IAEA, 1976. – P. 196-197.
4. User Guide. Neutron Experimental Facilities at JINR. Ed. Yu. V. Taran. JINR Press, Dubna, 1992.
5. Новиков А.Г., Лисичкин Ю.В., Фомичев Н.К. //Ж. физ. химии. - 1986. - Т. 60. - №9. - С. 1337.
6. Искендеров С.М., Новиков А.Г. //Ж. физ. химии. - 1982. - Т. 56. - № 10. - С. 1469.
7. Sears V. Can. //J. of Phys. - 1966. - V. 44. - №6. - P. 2179.
8. Иванов Г.К. //ЖЭТФ. 1966. - Т. 51. - №4. - С. 1120.
9. Ullо J. //Phys. Rev. - A.1987. - V. 36. - № 2. - P. 816-826.
10. White J. In: Inelastic Scattering of Neutrons: Proc. of Symp. Vienna: IAEA, 1972. - P. 315.
11. Blankenhagen P. Ber. Buns// Phys. Chem. - 1972. - V. 76. - №9. - P. 891.
12. Franks F., Ravenhill J., Egelstaff P., Page D //Proc. Roy. Soc. - 1970. - V. A319. - № 1537. - P. 189-208.
13. Safford G., Leung P., Naumann A., Schaffer P. //J. Chem. Phys. - 1969. - V. 50. - № 10. - P. 4444-4467.
14. Larsson K.-E., Dahlborg U. //Physica. - 1964. - V. 30. - №8. - P. 1561-1599.
15. Оскотский В.С. //Физика тв. тела. - 1963. - Т. 5. - № 3. - С. 1082-1085.
16. Фишер И.З. //ЖЭТФ. - 1971. - Т. 61. - № 4. - С. 1647-1659.

17. *Eisenberg D., Kauzmann W.* The Structure and Properties of Water. - Oxford Univ. Press, 1969.
18. *Nabokov O.A., Lubimov Ju.A.* //Mol. Phys. - 1988. - V. 65. - №6. - P. 1473.
19. *Frenkel J.I.* Kinetic Theory of Liquids. - Dover, New York, 1955.
20. *Новиков А.Г.* //Ж. физ. химии. - 1987. - Т. 61. - №12. - С. 1755.
21. *Montrose C., Litovitz T.* //J. Chem. Phys. - 1974. - V. 60. - №12. - P. 5025-5037.
22. *Conde O., Teixeira J.* //J. Physique. - 1983. - V. 44. - №4. - P. 525-529.
23. *Новиков А.Г., Ваньков А.А., Гостева Л.С.* //Ж. стр. химии. - 1990. - Т. 31. - №1. - С. 77.
24. *Stilinger F., Rahman A.* In: Molecular Motions in Liquids: Proc. of Symp. - Dordrecht: D. Reidel Publ. Company, 1974. - p. 479-493.
25. *Turchin V.F.* Slow Neutrons. - Oldbourne Press, London, 1965.
26. *Sceats M., Rice S.* //J. of Chem. Phys. - 1980. - V. 72. - №6. - P. 7.
27. *Popl J.* //Proc. Roy. Soc. - 1951. - V. 205. - №1081. - P. 163-178.
28. *Лисичкин Ю.В., Новиков А.Г., Фомичев Н.К.* //Ж. физ. химии. - 1989. - Т. 63. - С. 460.
29. *Новиков А.Г., Лисичкин Ю.В., Фомичев Н.К.* //Ж. стр. химии. - 1990. - Т. 31. - №4. - С. 56.
30. *Prask H., Trevino S., Ganlt J., Logan K.* //J. Chem. Phys. - 1972. - V. 56. - №7. - P. 3217.
31. *Yrlish J., Graham W., Egelstaff P. Can.* //J. of Phys. - 1977. - V. 56. - №3. - P. 373.
32. *Teixeira J., Bellissent-Funel M.-C., Chen S., Dianoux A.* //Phys. Rev. - A. 1985. - V. 31. - №3. - P. 1913.
33. *Narten A., Levy H.* //J. of Chem. Phys. - 1971. - V. 55. - №5. - P. 2263-2270.
34. *Gorbaty Ju. E., Demianetz Ju.N.* //Str. Chemistry. - 1983. - V. 24. - №5. - P. 74-8.

Поступила в редакцию 11.12.2002

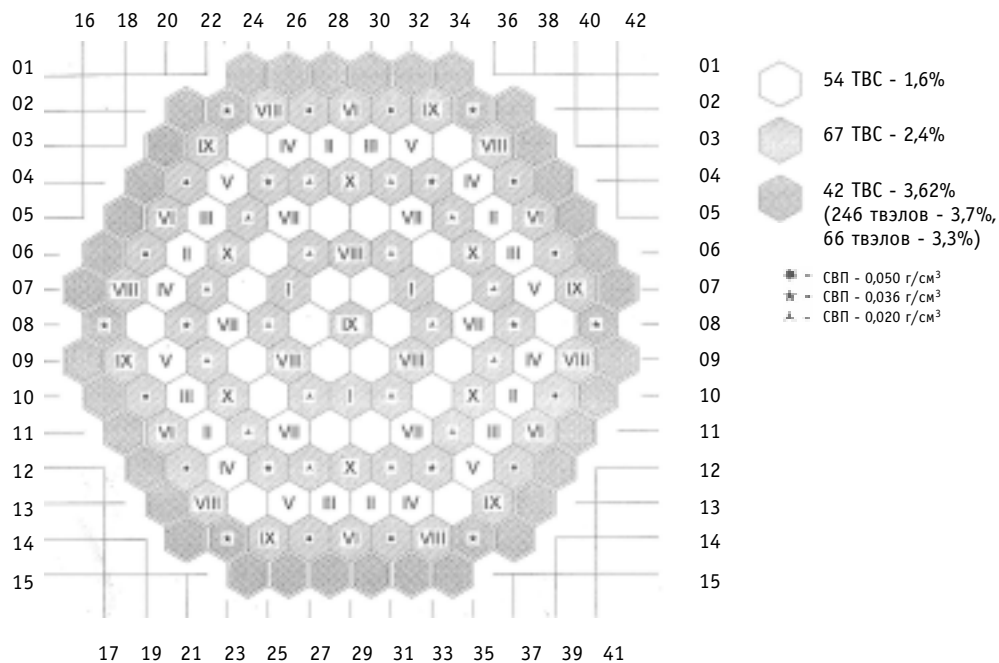


Рис. 1. Картограмма первой топливной загрузки

Поэтому в процессе физического пуска и на этапе освоения мощности первого энергоблока Ростовской АЭС были определены следующие НФХ:

- эффективность отдельных ОР СУЗ, погруженных в практически свободную от поглотителей активную зону;
- эффективность отдельных ОР СУЗ при различных погруженных в активную зону группах ОР СУЗ;
- температурный и барометрический (плотностной) коэффициенты реактивности при критической концентрации борной кислоты в реакторе, соответствующие различным положениям в активной зоне групп ОР СУЗ;
- эффективность аварийной защиты (АЗ) и эффективность наиболее эффективного органа регулирования СУЗ.

Особый интерес представляли исследования

- влияния на величину температурного и барометрического (плотностного) коэффициентов реактивности различных участков активной зоны, в которых размещены кассеты с различным обогащением по урану-235;
- определения эффективности различных органов регулирования при погруженных в активную зону группах ОР СУЗ;
- определения эффективности отдельных ОР СУЗ из погруженных в крайнее нижнее положение одной и более групп ОР СУЗ (реальной эффективности "отстреливаемых" из активной зоны ОР СУЗ при проектной аварии).

В активной зоне реактора ВВЭР-1000 из-за достаточно больших ее размеров возможно возникновение ксеноновых колебаний. Ксеноновые колебания связаны с периодическими отклонениями от равновесного распределения йода, ксенона и плотности потока нейтронов в различных участках активной зоны и могут при достаточно большой их амплитуде привести к нарушению теплотехнической надежности тепловыделяющих элементов. Экспериментальные исследования "свободных" ксеноновых колебаний необходимы для корректировки константного обеспечения программ расчета реактора, для отработки алгоритмов предупреждения и подавления ксено-

# АНАЛИЗ СБОРКИ РЕАКТОРА HPLWR В РАМКАХ КОДА MCNP

**А. Травлеев, К. Бродерс**

*Forschungszentrum Karlsruhe, Германия*



В настоящей работе проведен анализ нейтронно-физических характеристик реактора HPLWR (High Performance Light Water Reactor), исходная конфигурация которого была предложена в рамках 5-ой Европейской программы. Модель сборки, созданная авторами для расчета в коде MCNP, сравнивается с другими независимыми расчетами. Проведен анализ влияния исходных параметров на нейтронно-физические характеристики, который позволил выявить наиболее важные параметры для этой модели. Результаты, полученные на основе описываемой модели, позволили сделать вывод о применимости детерминистских методов расчета к HPLWR, которые могут быть объединены с теплогидравлическими моделями.

## ВВЕДЕНИЕ

В 1998 г. Токийским университетом была предложена концепция высокотемпературного водяного реактора [1], в котором в качестве теплоносителя и замедлителя используется вода сверхкритических параметров. Это позволяет достичь высоких экономических показателей ЯЭУ благодаря повышению КПД до 44%. На основе этой концепции в европейском сообществе была активизирована работа над проектом HPLWR (High Performance Light Water Reactor).

Одной из задач нейтронно-физического расчета является моделирование динамики реактора, которое в настоящее время может быть основано только на быстрых групповых методах (в отличие от стохастических методов, которые, как правило, требуют больших расчетных ресурсов). Предварительный анализ показал, что групповые методы, используемые для расчета реакторов на тепловых нейтронах, могут быть применены и для HPLWR; при этом необходима дополнительная проверка. При отсутствии экспериментальных данных эта проверка может быть выполнена сравнением с методом Монте-Карло. Настоящая работа посвящена созданию модели сборки HPLWR в рамках кода MCNP и анализу этой модели.

Недостатком (по крайней мере, для концепции HPLWR на тепловых нейтронах) сверхкритического состояния воды является низкая плотность воды, что приводит к ухудшению ее замедляющих свойств. Резкое изменение плотности воды вдоль высоты ТВС может ухудшить нейтронный баланс, и для компенсации уменьшения плотности замедлителя предусматриваются дополнительные замедляющие стержни и профилирование обогащения по высоте, что значительно усложняет конструкцию ТВС.

В настоящей работе рассматривается конструкция ТВС, предложенная в [1]. В соответствии с этой конструкцией ТВС включает в себя 258 твэлов, собранных в треугольную решетку и помещенных в чехол (рис. 1а). Для улучшения замедления нейтронов предусмотрены дополнительные полости с водой в виде 30 вертикальных труб,

© А. Травлеев, К. Бродерс, 2003

которые термически изолированы от теплоносителя. Внутри 9 из этих 30 труб предусмотрены направляющие для стержней регулирования. Для уменьшения неравномерности энерговыделения обогащение топлива изменяется по радиусу и высоте ТВС (рис. 1а, б). Исходная конструкция предполагает 3 радиальных и 3 высотных подзоны с различными обогащениями, величины которых указаны в табл. 1. Конструкционным материалом служит сплав на основе никеля, который выдерживает высокие температуры и давления, характерные для HPLWR. На рис. 2 представлены типичные

Таблица 1

**Обогащение топлива в сборке HPLWR**

	Внутренняя зона (96 твэлов)	Средняя зона (48 твэлов)	Внешняя зона (114 твэлов)
Верхняя зона (280–420 см)	4,87	6,04	7,02
Средняя зона (140–280 см)	4,16	5,16	6,00
Нижняя зона (0–140 см)	3,81	4,72	5,49

распределения плотности и температуры теплоносителя и замедлителя. Видно, что эти распределения ведут себя по-разному в различных частях сборки. Теплоноситель, прокачиваемый снизу вверх и омывающий твэлы, может достичь сверхкритических параметров, и его плотность может значительно изменяться по высоте. Эта область

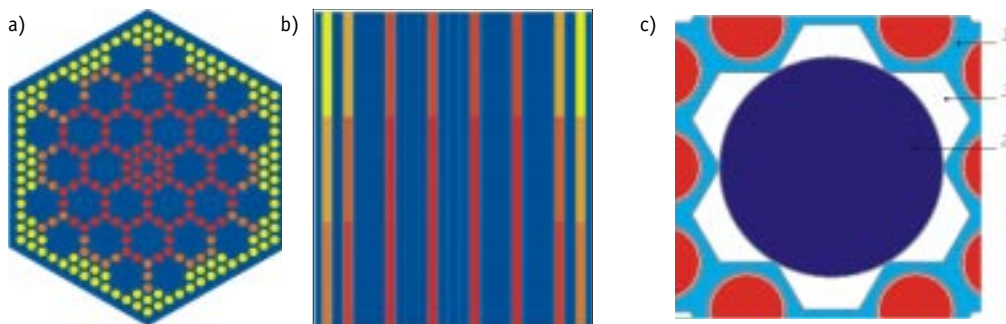


Рис. 1. Конструкция ТВС HPLWR, предложенная в [1]: а) поперечное сечение ТВС; б) продольное сечение ТВС (масштаб не соблюден); в) конструкция водного стержня

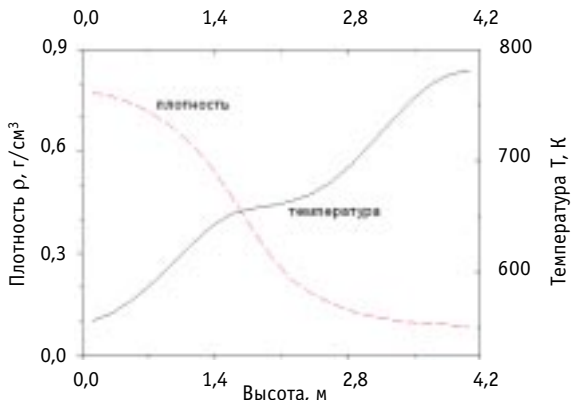


Рис.2. Типичное распределение температуры и плотности воды по высоте ТВС

соответствует зоне 1 на рис. 1с. Вода, находящаяся внутри замедляющих труб, не достигает сверхкритических параметров, т.к. предполагается, что она хорошо изолирована от теплоносителя и твэлов. Эта область (рис. 1с, зона 2) соответствует замедлителю. Вода в зоне 3, которая служит для тепловой изоляции замедлителя от теплоносителя (ниже по тексту – вода-изолятор), должна иметь температуру и плотность, значения которых лежат между параметрами замедлителя и теплоносителя. В настоящее время



детальных теплогидравлических расчетов этой зоны нет, и предполагается, что область 3 заполнена водой со свойствами теплоносителя .

**МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ПО MCNP**

**2d-модель**

На первом этапе работы была разработана двумерная (2d) модель ТВС. Эта модель основана на конструкции, предложенной в [1], но не содержит стержней регулирования, а только их направляющие. Рис. 1а, 1с получены с помощью этой модели.

Чтобы проверить 2d-модель, было рассчитано значение  $k_{\infty}$ , которое мы сравнили с результатами, приведенными в [4]. Свойства воды для данного расчета были взяты из [3]. Полученное нами значение для  $k_{\infty} = 1.1733$  (стандартное отклонение  $5 \cdot 10^{-4}$ ) значительно отличается от значения  $k_{\infty} = 1.1654$ , приведенного в [4], также полученного с помощью MCNP, несмотря на одинаковые файлы данных и конструкцию ТВС. Для того, чтобы определить, может ли это различие быть вызвано разными версиями MCNP, был проведен расчет данных входного файла, взятого из VTT, и получено значение  $k_{\infty} = 1.1666$  (стандартное отклонение  $6 \cdot 10^{-4}$ ), которое совпадает в пределах статистической ошибки со значением из [4]. Последующие расчеты показали, что *разница в  $k_{\infty}$  вызвана разницей в моделировании направляющих стержней регулирования*. Модель из [4] описывает 1/12 часть симметрии и, следовательно, содержит направляющие во всех водных столбах, в то время как исходная конструкция (и соответственно наша модель) содержит направляющие только в 9 из 30 водных столбов. Для проверки этого предположения мы добавили в нашу модель дополнительно 21 направляющую; при этом  $k_{\infty}$  составил 1.1673, что совпадает с результатом [4] в пределах статистической погрешности (см. табл. 2).

Таблица 2

**Значение  $k_{\infty}$ , полученное для различных 2d-моделей**

Модель	$k_{\infty}$	Стандартное отклонение
VTT (30 направляющих)	1,1733	$5 \cdot 10^{-4}$
FZK (9 направляющих)	1,1666	$6 \cdot 10^{-4}$
FZK (30 направляющих)	1,1673	$6 \cdot 10^{-4}$

Из результатов, представленных выше, можно сделать следующие выводы. Во-первых, обе модели, созданные не зависимо друг от друга, показали совпадающие результаты. Во-вторых, как показали расчеты, даже небольшое изменение в количестве конструкционного материала (толщина стенки направляющей трубы составляет всего 0.1 мм) приводит к значительному изменению  $k_{\infty}$ , что вызвано большим сечением поглощения нейтронов в никеле, т.е. *сплав на основе никеля является не самым лучшим конструкционным материалом с нейтронно-физической точки зрения*. Тем не менее, этот материал выбран с учетом прочностных характеристик, и другие варианты здесь не рассматриваются.

**3d-модель**

Для детального представления в модели распределения плотности воды по высоте ее необходимо разбить по высоте на подзоны; и чем больше подзон, тем точнее будет представлено распределение плотности, но т.к. исходные данные для плотности воды представляют собой гистограмму с 20 значениями [6], разбивать модель на

более чем 20 подзон по высоте не имеет смысла. Тем не менее, генерация входного файла для MCNP автоматизирована таким образом, что количество подзон по высоте может быть выбрано произвольно для каждой области ТВС: для топлива, теплоносителя, замедлителя. На рис. 1 показана 3d-модель с 20 подзонами для теплоносителя и замедлителя и тремя подзонами для топлива.

## АНАЛИЗ МОДЕЛИ

Значительная зависимость  $k_{\infty}$  от количества направляющих (или от количества конструкционного материала в ТВС) для 2d-модели уже была отмечена выше. В этом разделе определяются другие исходные параметры, которые влияют на значения  $k_{\infty}$  для 2d-модели и на распределение энерговыделения по высоте для 3d-модели.

### Влияние исходных параметров на $k_{\infty}$ в 2d-модели

Прежде всего необходимо выделить исходные параметры, которые могут иметь погрешность, и определить величину этой погрешности. Геометрические размеры и состав материалов заданы исходной конструкцией, и мы предполагаем, что они заданы с какой угодно малой погрешностью (термическое расширение конструкций здесь во внимание не принимается). Тем не менее поле температур в ТВС рассчитано с определенными приближениями и имеет определенные погрешности, которые могут влиять на результат нейтронно-физического расчета. Более того, температура топлива для учета доплеровского уширения резонансов не может быть задана точно в MCNP, а может быть только представлена ближайшим значением температуры, для которой есть библиотека данных.

На взаимодействие нейтрона с атомом влияет тепловое движение атома, а также его связь с соседними атомами. В MCNP для учета теплового движения атома используется приближение свободного газа (Free Gas Thermal treatment), в котором предполагается, что атомы среды двигаются как атомы свободного газа при определенной заданной температуре среды (именно эта температура и обсуждается здесь как температура в приближении свободного газа). Суть приближения свободного газа состоит в корректировке сечения упругого рассеяния и учете движения атома при расчете кинематики столкновения непосредственно при моделировании транспорта

Таблица 3

### Оценка погрешности входных параметров 2d-модели

Входной параметр	Относительная погрешность, %	Абсолютная погрешность
Плотность, г/см <sup>3</sup>		
Теплоноситель	1	$5,4 \cdot 10^{-3}$
Замедлитель	1	$6,3 \cdot 10^{-3}$
Температура доплеровского уширения резонансов, К		
Вода	23	150
Сплав на основе никеля	25	150
Топливо	13	150
Таблица S(a,b) для воды	17	100
Температура в приближении свободного газа, К		
Теплоноситель	1	6,4
Замедлитель	1	6,2
Сплав на основе никеля	1	6,0
Топливо	1	12

нейтронов. При этом предполагается, что доплеровское уширение резонансов неупругих процессов уже «подогнано» на этапе создания файла данных. Причем MCNP не запрещает использовать различные значения температур для доплеровского уширения и для приближения свободного газа при описании одного и того же материала. Приближение свободного газа влияет только на сечение упругого рассеяния.

Эта температура точно так же, как и плотность материала, входит в число параметров, описывающих ячейку в модели MCNP. С этой точки зрения все параметры, рассматриваемые в табл. 3, – температура в приближении свободного газа (более точно говоря, значение температуры, используемое в приближении свободного газа), плотность материала, температура доплеровского уширения резонансов (т.е. значение температуры, соответствующее доплеровскому уширению в использованной в расчете библиотеке данных), – являются входными параметрами, описывающими модель.

Плотности и температуры материалов в 2d-модели, полученные в теплогидравлическом расчете, имеют относительную погрешность 1% [7]. Плотности могут быть заданы точно во входном файле MCNP, но температура топлива принимается равной одному из следующих значений: 300, 400, 500, 600, 800, 900, 1200 или 1500 К. Поэтому в области температур 600 – 1500 К ошибка в температуре топлива может составлять 50–150 К (половина шага между ближайшими значениями). Аналогичные рассуждения справедливы и для температур воды, и для конструкционных материалов. Ошибки входных параметров для 2d-модели представлены в табл. 3.

Для того, чтобы упростить анализ влияния ошибок входных параметров на значение  $k_{\infty}$ , мы предполагаем, что все входные параметры независимы. Это предположение достаточно грубо (например, температура и плотность воды взаимосвязаны). Тем не менее они могут рассматриваться как независимые параметры и задаваться во входном файле MCNP не зависимо друг от друга, соответственно в модели можно изменять плотность воды, оставляя температуру неизменной. Более того, для одного и того же материала можно задать различные значения температур для учета доплеровского уширения резонансов (заданием соответствующей библиотеки данных) и для приближения к модели свободного газа (параметр TMR во входном файле MCNP). Поэтому предположение о независимости исходных параметров модели имеет смысл, и на его основе можно оценить влияние неопределенности значений исходных параметров на рассчитываемое  $k_{\infty}$ .

Если  $k_{\infty}$  – функция независимых параметров  $x_1, \dots, x_n$ , то изменение параметра  $x_i$  приводит к изменению  $k_{\infty}$ , которое для малых  $\Delta x_i$  можно представить в виде

$$\Delta k_{\infty i} = \frac{\partial k_{\infty}}{\partial x_i} \cdot \Delta x_i, \quad (1)$$

где  $\Delta k_{\infty i}$  – изменение  $k_{\infty}$ , вызванное изменением  $i$ -го входного параметра  $\Delta x_i$  при неизменных остальных параметрах. Для определения производных  $\partial k_{\infty} / \partial x_i$  были рассчитаны значения  $k_{\infty}$  для нескольких значений параметра  $x_i$ :

$$k_{\infty i}^1 = k_{\infty}(x_{i1}), \quad k_{\infty i}^2 = k_{\infty}(x_{i2}), \quad k_{\infty i}^3 = k_{\infty}(x_{i3}), \quad \dots, \quad (2)$$

где значения  $x_{ij}$  лежат рядом или совпадают с  $x_i$ . Для таких параметров как плотность материала и температура, используемая для приближения свободного газа, применялись три значения  $x_{ij}$ , лежащие в интервале  $\pm 10\%$  около  $x_i$ . В случае температуры доплеровского уширения использовались два (или более) доступных значения, ближайших к  $x_i$ . Оказалось, что для всех параметров, указанных в табл. 3, зависимость  $k_{\infty}(x_i)$  может быть интерполирована прямой линией (примеры зависимостей  $k_{\infty}(x_i)$  от

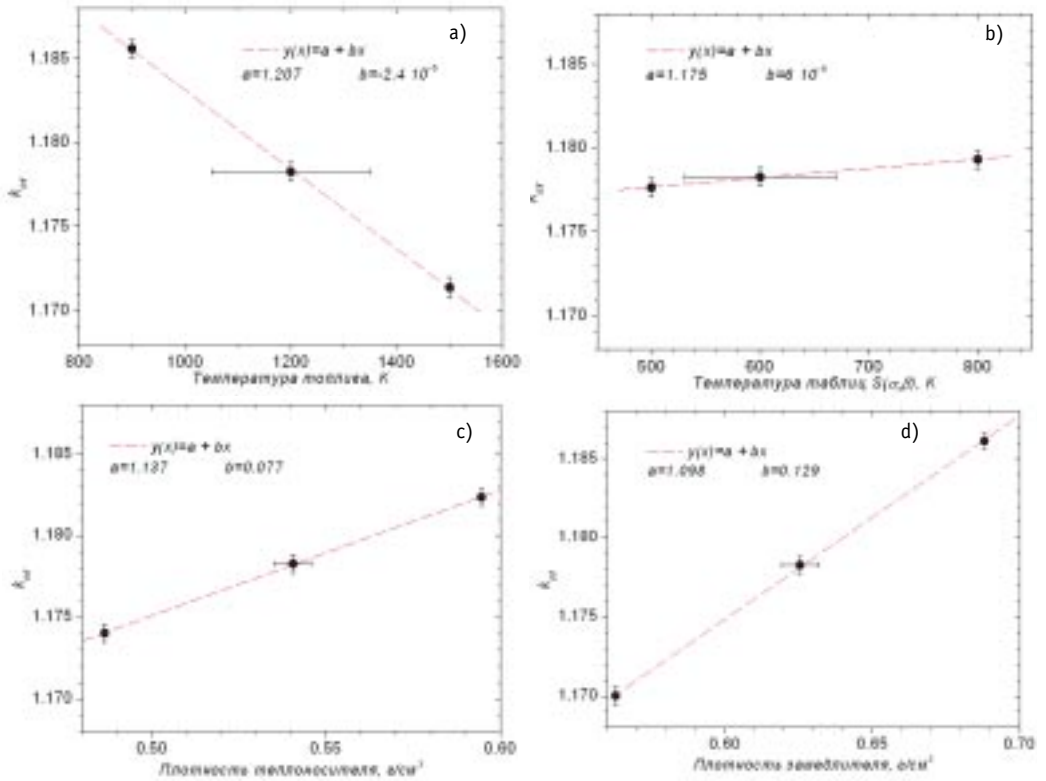


Рис. 3. Зависимость  $k_{\infty}$  в 2d-модели от исходных параметров: а) температура доплеровского уширения; б) температура таблиц S( $\alpha, \beta$ ) для воды; в) плотность теплоносителя; д) плотность замедлителя

Таблица 4

**Производная по входному параметру и соответствующие изменения коэффициента размножения k**

Входной параметр	Производная	Изменение k
Плотность		
Теплоноситель	$7,71 \cdot 10^{-2} \text{ см}^3/\text{г}$	$4,16 \cdot 10^{-4}$
Замедлитель	$1,29 \cdot 10^{-1} \text{ см}^3/\text{г}$	$8,13 \cdot 10^{-4}$
Температура доплеровского уширения резонансов		
Вода	$-2,37 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$	$3,56 \cdot 10^{-4}$
Сплав на основе Ni	$-6,68 \cdot 10^{-7} \text{ 1/K}$	$1,01 \cdot 10^{-4}$
Топливо	$-2,37 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$	$3,56 \cdot 10^{-3}$
Таблица S(a,b) для воды	$5,56 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$	$5,56 \cdot 10^{-4}$
Температура в приближении свободного газа		
Теплоноситель	$3,23 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$	$2,07 \cdot 10^{-5}$
Замедлитель	$-6,88 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$	$4,27 \cdot 10^{-5}$
Сплав на основе Ni	$-1,68 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$	$1,01 \cdot 10^{-5}$
Топливо	$-4,68 \cdot 10^{-7} \text{ 1/K}$	$5,62 \cdot 10^{-6}$

Рассмотрим два способа снижения нагрузки - плавное и ступенчатое.

При плавном снижении нагрузки баланс реактивности при выгорании на пониженных параметрах в любой момент времени имеет вид

$$\Delta\rho_t + \Delta\rho_W + \Delta\rho_B = 0, \quad (1)$$

где  $\Delta\rho_t$  - изменение реактивности за счет изменения средней температуры теплоносителя в активной зоне;  $\Delta\rho_W$  - изменение реактивности за счет изменения тепловой мощности (доплер-эффект и эффект отравления Xe);  $\Delta\rho_B$  - изменение реактивности за счет выгорания топлива.

При ступенчатом снижении нагрузки соотношение (1) выполняется только для конца выгорания на пониженных параметрах. Слагаемые в уравнении (1) определяются через соответствующие коэффициенты реактивности, а сами коэффициенты - определяются по формулам теории возмущений первого порядка. Для расчета коэффициентов реактивности используются производные материального параметра из аппроксимаций программного комплекса КАСКАД [2].

Для режима плавного снижения нагрузки из соотношения (1) и определений коэффициентов реактивности можно получить дифференциальное уравнение, описывающее изменение тепловой мощности реактора во времени. Интегрируя его, получим

$$W(\delta T_{\text{кал}}) = W_0 \exp(-A \cdot \delta T_{\text{кал}}), \quad (2)$$

где постоянная  $A$  определяется из соотношения

$$A = \frac{1}{W_0} \cdot \frac{(\partial\rho/\partial T)}{(\partial\rho/\partial W) + \alpha(\partial\rho/\partial t_{\text{H}_2\text{O}})}, \quad (3)$$

где  $W(\delta T_{\text{кал}})$  - тепловая мощность в конце работы на пониженных параметрах;  $W_0$  - тепловая мощность реактора в начальный момент времени работы на пониженных параметрах;  $\delta T_{\text{кал}}$  - календарное время работы на пониженных параметрах;  $\alpha$  - коэффициент пропорциональности между приращениями мощности и температуры  $\Delta t_{\text{H}_2\text{O}} = \alpha \Delta W$ .

Значение параметра  $A$  определяется средними по активной зоне значениями коэффициентов реактивности в конце «борной» кампании.

Таким образом, при плавном снижении нагрузки соотношение (2) определяет закон изменения мощности при работе на пониженных параметрах.

Выполнив усреднение, получим средние за время работы на пониженных параметрах значения тепловой мощности и температуры теплоносителя:

$$\bar{W}_M = W_0 \cdot (1 - \exp(-A\delta T_{\text{кал}})) / (A\delta T_{\text{кал}}) \quad (4a)$$

$$\bar{t}_{\text{H}_2\text{O}}^M = t_0 + \frac{\alpha}{2} \cdot W_0 (\exp(-A\delta T_{\text{кал}}) - 1), \quad (4b)$$

где  $t_0$  - средняя температура теплоносителя в начальный момент времени работы на пониженных параметрах.

Эффективное время работы реактора на пониженных параметрах определяется из соотношения

$$\delta T_{\text{эфф}} = \frac{1}{A} (1 - \exp(-A\delta T_{\text{кал}})) \quad (5)$$

и наоборот, если задано эффективное время работы реактора  $\delta T_{\text{эфф}}$ , то календарное время работы на пониженных параметрах определяется по формуле

$$\delta T_{\text{кал}} = - \frac{1}{A} \ln(1 - A\delta T_{\text{эфф}}). \quad (6)$$

При заданной конечной мощности  $W(\delta T_{\text{кал}})$  работы на пониженных параметрах получаем

$$\delta T_{\text{кал}} = - \frac{1}{A} \ln \left( \frac{W(\delta T_{\text{кал}})}{W_0} \right), \quad (7a)$$

$$T_{\text{эфф}} = \frac{1}{A} \left( 1 - \frac{W(\delta T_{\text{кал}})}{W_0} \right). \quad (7b)$$

В случае ступенчатого снижения нагрузки из баланса реактивности (1) для конца работы на пониженных параметрах

$$\frac{W(\delta T_{\text{кал}}) - W_0}{W(\delta T_{\text{кал}})} = - A \cdot \delta T_{\text{кал}}. \quad (8)$$

Эффективное время работы реактора на пониженных параметрах определяется из соотношения

$$\delta T_{\text{эфф}} = \frac{W(\delta T_{\text{кал}})}{W_0} \cdot \delta T_{\text{кал}} = \frac{\delta T_{\text{кал}}}{1 + A \cdot \delta T_{\text{кал}}}. \quad (9)$$

Если задано  $\delta T_{\text{эфф}}$ , то  $\delta T_{\text{кал}}$  определяется следующим образом:

$$\delta T_{\text{кал}} = \frac{W_0}{W(\delta T_{\text{кал}})} \cdot \delta T_{\text{эфф}} = \frac{\delta T_{\text{эфф}}}{1 - A \cdot \delta T_{\text{эфф}}}. \quad (10)$$

Таким образом, приведенные выше формулы полностью описывают различные режимы работы реактора в конце кампании на номинальных параметрах.

В настоящее время реакторы ВВЭР работают в конце кампании только на мощностном эффекте реактивности, поэтому экономическое обоснование снижения мощности приведено для данного режима.

## КРИТЕРИИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИ РАБОТЕ РЕАКТОРА НА Пониженных параметрах

В [3,4] приведен анализ эффективности топливоиспользования для различных стационарных топливных циклов реакторов ВВЭР-1000 на основе таких критериев как глубина выгорания выгружаемого топлива, удельный расход природного урана, топливная составляющая себестоимости электроэнергии (ТСС), себестоимость электроэнергии и совокупная экономическая прибыль. Было показано, как увеличение длительности кампании и коэффициента использования установленной мощности (КИУМ) соотносится с указанными критериями топливоиспользования. Изменение указанных характеристик производится изменением обогащения и количества загружаемых ТВС по отдельности либо тем и другим вместе. В [3, 4] рассматривалась работа энергоблока только на номинальной мощности.

В случае работы энергоблока на пониженных параметрах на мощностном эффекте реактивности формулы из [3,4] изменяются и приобретают следующий вид (рассматриваются стационарные топливные циклы).

Для  $k$ -го топливного цикла КИУМ рассчитывается по формуле

$$\text{КИУМ} = \frac{T_{\text{эфф}k}^m \cdot 100}{T_{\text{кал}k}^m + T_n^k} + 0.5, \quad \%, \quad (11)$$

где верхний индекс «м» означает, что используется режим работы на пониженных

# АНАЛИЗ ФАКТОРОВ ЭКОЛОГО-ЭКОНОМИЧЕСКОГО РИСКА РАЙОНОВ РАЗМЕЩЕНИЯ АЭС

**Д.Ю. Кремленков**

*НПО "Тайфун", г. Обнинск*



Проведен сравнительный анализ факторов эколого-экономического риска для населения и природной среды районов АЭС на территории России. Возможные масштабы эколого-экономического ущерба определяются взаимодействием различных групп факторов риска: технологических, природных, экономических, социально-демографических. Районы атомных электростанций на территории России отличаются значительной контрастностью по климатическим, почвенно-растительным условиям, характеру рельефа, условиям труда и жизнедеятельности людей, структуре и размещению населения, стоимостным характеристикам природных ресурсов и другим параметрам, что обуславливает различный вероятный ущерб от возможных воздействий радиационно опасных объектов. Анализ факторов риска позволит дифференцированно подойти к расчету сумм компенсационных выплат при страховании ядерных и радиационных рисков.

Многолетний опыт эксплуатации АЭС в технологически нормальном режиме свидетельствует об определенных экологических преимуществах ядерной энергетики перед энергетикой на органическом топливе. Однако тяжелые радиационные аварии на АЭС могут оказать существенное воздействие на население и окружающую среду [1]. Масштабы вероятного эколого-экономического ущерба, нанесенного окружающей среде и человеку радиационно опасными объектами, определяются фактическими и возможными убытками народному хозяйству, связанными с изъятием и потерей природных ресурсов, их загрязнением, а также затратами на ликвидацию последствий аварий. Последние включают в себя затраты на экстренные защитные мероприятия в аварийный период, обеспечение длительного проживания людей на загрязненных территориях и в дальнейшем безопасного сельскохозяйственного использования этих территорий. Районы размещения атомных станций на территории России неодинаковы в природном и экономико-географическом отношении, отличаются условиями жизни и труда людей, состояния их здоровья. Поэтому величина возможного ущерба, зависящая от комплекса технологических, природных, экономических, социально-демографических факторов риска, будет различной. В настоящей работе сделана попытка оценить пространственную дифференциацию факторов эколого-экономического риска районов АЭС на территории России.

Существенные различия климатических характеристик районов, прилегающих к атомным станциям, на территории России обуславливают неодинаковые условия переноса и рассеяния радионуклидов, их выпадения на подстилающую поверхность, формирования различных дозовых нагрузок на экосистемы и население. Анализ по-

© Д.Ю. Кремленков, 2003

тенциала загрязнения атмосферы (ПЗА) [2] районов размещения АЭС позволяет дать сравнительную характеристику условий самоочищения атмосферы от вредных примесей, выбрасываемых атомными станциями (табл.1). Наилучшими условиями самоочищения атмосферы с низкими значениями ПЗА характеризуются районы Кольской и Ленинградской АЭС, расположенные согласно районированию по потенциалу загрязнения атмосферы в зоне I. Повторяемость слабых ветров со скоростью менее 1 м/с здесь не превышает 20%, застоев воздуха - 10%, а приземных температурных инверсий, имеющих весенний и осенний максимумы, - 30%. Инверсии редко сопровождаются ослаблением скорости ветра. Мощность и интенсивность инверсий невелики - в январе они достигают максимальных значений, соответственно 0,8 км и 3-8°. Количество осадков в рассматриваемых районах составляет 400-600 мм в год. Максимум отмечается в сентябре, в период увеличения повторяемости температурных инверсий, что способствует очищению атмосферы.

Районы Смоленской, Калининской, Курской, Нововоронежской АЭС по потенциалу загрязнения атмосферы расположены в зоне II с умеренными значениями ПЗА, отличающейся менее благоприятными условиями рассеяния примесей в атмосфере. Повторяемость слабых ветров со скоростью менее 1 м/с достигает 30%, застоев воздуха - 12%, приземных инверсий температур - 40%. Мощность и интенсивность температурных инверсий несколько выше, чем в зоне I. Максимум повторяемости слабых ветров и температурных инверсий приходится на летний период. Примерно третья часть инверсий наблюдается при низкой скорости ветра. Накоплению примесей от высоких источников выбросов способствуют также приподнятые инверсии. Летний минимум осадков обуславливает повышение уровня загрязнения атмосферы летом. В зимний период увеличению загрязнения атмосферы способствует увеличение мощности и интенсивности инверсий и повторяемости туманов.

Балаковская, Ростовская и Белоярская АЭС по рассеивающей способности атмосферы относятся к континентальному району III зоны с повышенными значениями ПЗА. Повторяемость слабых ветров в этой зоне с максимумом в августе-сентябре, а также повторяемость застоев воздуха в среднем в два раза выше, чем в I зоне. Значения повторяемости, мощности и интенсивности приземных инверсий в 1,5-2 раза превышают значения зоны I. Количество осадков (400 - 600 мм) распределено неравномерно, с летним максимумом. Для района Поволжья, где расположена Балаковская АЭС, отмечена наиболее высокая повторяемость условий застоя воздуха и слабых ветров, а также возможны низкие приподнятые инверсии, что способствует накоп-

Таблица 1

**Условия самоочищения атмосферы районов АЭС [2]**

АЭС	Повторяемость слабых ветров, %	Повторяемость застоев воздуха, %	Повторяемость приземных инверсий, %	Мощность инверсий, км	Интенсивность инверсий, °	Зона ПЗА
Балаковская	20-40	7-12	30-45	0,3-0,6	2-6	III
Белоярская	20-40	7-12	30-45	0,3-0,6	2-6	III
Билибинская	30-60	10-25	40-50			IV
Калининская	20-30	7-12	30-40	0,4-0,5	3-5	II
Кольская	10-20	5-10	20-30	0,3-0,4	2-3	I
Курская	20-30	7-12	30-40	0,4-0,5	3-4	II
Ленинградская	10-20	5-10	20-30	0,3-0,4	2-3	I
Нововоронежская	20-30	7-12	30-40	0,4-0,5	3-5	II
Ростовская	20-40	7-12	30-45	0,3-0,6	2-6	III
Смоленская	20-30	7-12	30-40	0,4-0,5	3-5	II



лению примесей в приземном слое атмосферы. Максимальные уровни загрязнения возможны летом и зимой.

Район Билибинской АЭС по потенциалу загрязнения атмосферы относится к IV зоне с высоким ПЗА, характеризующейся низкой рассеивающей способностью атмосферы, преобладанием слабых ветров с повторяемостью до 60%, распространяющихся до больших высот, и высокой повторяемостью атмосферных инверсий (до 50%). Максимум атмосферных инверсий приходится на зимний период. Повторяемость застоев воздуха в среднем в семь раз выше, чем в I зоне. Осадки (200-400 мм в год) имеют максимумы весной и осенью, минимум – в летний период. Вследствие малой рассеивающей способности атмосферы при низких выбросах происходит значительное загрязнение атмосферы. При высоких источниках выбросов наблюдается слабое их перемешивание с атмосферным воздухом и перенос в высокой концентрации на значительные расстояния.

Таким образом, районы АЭС по рассеивающей способности атмосферы в порядке ее убывания располагаются в следующий ряд: Кольская, Ленинградская – Смоленская, Калининская, Курская, Нововоронежская – Белоярская, Ростовская, Балаковская – Билибинская.

Различия ландшафтных и почвенно-геохимических условий районов АЭС определяют неодинаковую вероятность накопления радионуклидов в почвенно-растительном покрове этих территорий; поступления в продукты питания, источники водоснабжения; формирования поглощенных доз и, следовательно, возможного экологического ущерба. Вероятная интенсивность самоочищения территории от радионуклидов в районах АЭС путем рассеяния водными потоками зависит от величины годового стока, соотношения осадков и испаряемости (индекса влажности), степени расчлененности рельефа, гранулометрического состава почв, почвообразующих пород и др. Наиболее высокими значениями величины годового стока характеризуются районы Кольской (300-400 мм) и Белоярской (300-800 мм) АЭС, а наименьшими (менее 100 мм) – районы Балаковской, Нововоронежской, Курской, Ростовской, Ленинградской АЭС [3]. Минимальные значения индекса влажности (0.28-0.45) отмечены для районов Ростовской, Нововоронежской, Балаковской АЭС. Для районов Белоярской, Курской АЭС они составляют 0.45-0.68, Кольской – 0.68-1.0, Билибинской и Калининской – 1.0-1.5, Смоленской и Ленинградской – 1.5-2.2. Наибольшую степень расчлененности рельефа имеют районы Кольской, Белоярской, Билибинской АЭС, рельеф которых имеет горный и предгорный характер. Фактором ограничения миграции радионуклидов служит криогенез почв и грунтов, имеющий распространение в районе Билибинской АЭС.

По сорбционной способности верхних горизонтов почв, определяемых комплексом свойств, таких как состав органоминеральных коллоидов почв, содержание тонкодисперсных фракций, pH почв и др., районы АЭС располагаются в следующий ряд в порядке убывания: Курская, Нововоронежская – Ростовская – Балаковская – Белоярская – Смоленская – Калининская – Ленинградская – Кольская – Билибинская. Известно, что вклад внешнего облучения в годовую эквивалентную дозу облучения населения, проживающего на загрязненных цезием-137 территориях, в районах распространения почв тяжелого гранулометрического состава, богатых органическим веществом, таких как серые лесные почвы и черноземы, примерно в 2-2,5 раза выше, чем в районах распространения легких супесчаных дерново-подзолистых почв [4]. В то же время легкие супесчаные дерново-подзолистые почвы обеспечивают в 2-3 раза больший по сравнению с черноземами вклад внутреннего облучения за счет поступления радионуклидов с продуктами питания. Значение свойств почв достаточно велико при оценке оправданности применения защитных мероприятий в сельском

хозяйстве в отдаленный период после аварии. Исследования С.В. Фесенко и др. [5] показали, что стоимость снижения дозы на 1 чел.-Зв. в год в отдаленный период после аварии на Чернобыльской АЭС для тяжелосуглинистых и глинистых почв примерно в 30 раз больше, чем для торфяных, и в 4 раза больше, чем для песчаных, поэтому с учетом сорбционных свойств почв вероятные затраты на реабилитацию сельскохозяйственных территорий районов АЭС будут распределяться согласно вышеуказанному ряду.

Вероятный ущерб экосистемам районов АЭС при аварийных выбросах зависит, прежде всего, от структуры растительного покрова, преобладания растительных ассоциаций, уязвимых к действию радиации, участия агроценозов, степени покрытия территории лесами, соотношения в них хвойных и лиственных пород. Показателем степени покрытия территории района АЭС хвойными лесами, отличающимися наибольшей чувствительностью к радиационному воздействию, может служить их доля в площади покрытия спелыми лесами [6]. По этому показателю районы АЭС располагаются в следующий ряд: Кольская (80%) – Белоярская (65%) – Ленинградская (50%) – Калининская (34%) – Билибинская (33%) – Смоленская (17%) – Нововоронежская (4%) – Ростовская (0,6%) – Курская, Балаковская – около нуля. Вероятный эколого-экономический ущерб от гибели лесов в случае аварийных выбросов меняется в пространстве аналогично этому ряду.

Для оценки вероятного эколого-экономического ущерба, нанесенного земельным и лесным ресурсам, целесообразно использовать кадастровые цены [6-8]. В районах размещения АЭС на территории России кадастровые цены сельскохозяйственных земель и земель лесного фонда значительно варьируют, что, в первую очередь, зависит от природных особенностей территорий, определяющих условия произрастания растений, естественного плодородия почв, их технологических свойств, местоположения. Первая кадастровая оценка сельскохозяйственных земель для субъектов Российской Федерации [7] проведена, что позволяет использовать их значения для оценки экономического ущерба от техногенных воздействий. Методика определения кадастровых цен на лесные земли в настоящее время разработана [8], но сами цены находятся в стадии разработки, поэтому возможно лишь ориентировочно оценить стоимость лесных земель. При экономической оценке лесных земель учитывается их многофункциональная роль. Кадастровая стоимость участка лесных земель численно равна капитализированной ренте, которая может быть получена при выращивании на нем эталонных лесных насаждений, начиная с момента проведения кадастровой оценки и в продолжение бесконечно длительного периода времени. Она определяется как разница между суммарным валовым капитализированным доходом от всех видов лесопользования и капитализированными расходами лесного хозяйства по лесовосстановлению одного гектара леса. Для сравнительной экономической оценки земель лесного фонда различных групп и категорий защищенности используются коэффициенты, предложенные в методике определения кадастровых цен лесных земель. В соответствии с ними рассчитывается стоимость одного гектара лесных угодий. Учитывается также состав древесных пород, степень удаленности участка леса и другие факторы.

В табл. 2 дана экономическая оценка сельскохозяйственных и лесных земель для районов АЭС в ценах 1999 г., а также их доля в структуре земельного фонда. Вероятный экономический ущерб, нанесенный лесным землям, будет зависеть, с одной стороны, от стоимости земель, а с другой - от структуры лесного фонда района размещения АЭС, доли лесных земель различных групп и категорий защищенности. Степень покрытия лесной растительностью наиболее высока (40-50%) в таежно-лесных районах Белоярской и Ленинградской АЭС. Несколько меньшими показателями лесисто-

Таблица 2

**Кадастровая стоимость сельскохозяйственных и лесных земель и их доля в структуре земельного фонда районов АЭС [6-8]**

АЭС	Доля сельскохозяйственных земель, %	Цена сельскохозяйственных земель, руб./га	Доля лесных земель, %	Цена (средневзвешенная) лесных земель, руб./га
Балаковская	45-66	8120	Менее 10	33776
Белоярская	6-12	9740	40-50	18884
Билибинская	-	-	Менее 10	9457
Калининская	12-20	9540	30-40	23445
Кольская	Менее 2	400	20-30	24716
Курская	45-66	18940	Менее 10	33776
Ленинградская	2-6		40-50	24318
Нововоронежская	45-66	21650	Менее 10	33776
Ростовская	45-66	19110	Менее 10	33776
Смоленская	20-30	9830	30-40	22292

сти (30-40%) характеризуются южно-таежные районы Смоленской и Калининской АЭС, для северо-таежного района Кольской АЭС она снижается до 20 – 30%. Значительно меньшая доля лесов в структуре земельного фонда характерна для лесостепных и степных районов Курской и Нововоронежской АЭС, а также тундры и притундровых лесов района Билибинской АЭС (5-10%), а самая минимальная – для сухостепных районов Балаковской и Ростовской АЭС (менее 5%). Если, согласно ориентировочным оценкам [8], кадастровая стоимость земель резервных лесов третьей группы составляет 8444 руб./га, то лесные земли второй группы стоят 16888 руб./га, а первой – от 25332 руб./га до 84440 руб./га в зависимости от категории защищенности. К последним относятся ленточные боры, широко распространенные в районах Ленинградской АЭС, защитные полосы вдоль автомобильных и железных дорог, защитные лесные полосы, леса лесостепных и степных районов (Курская, Нововоронежская, Балаковская АЭС), малолесные горные территории и притундровые леса (Билибинская АЭС), а также заповедные леса, прилегающие к районам Нововоронежской, Курской и Кольской АЭС, имеющие максимальную кадастровую цену 84440 руб./га. По данным, представленным в государственном докладе о состоянии и использовании лесов Российской Федерации за 1999 г. [6], в районах Курской, Нововоронежской, Ростовской, Балаковской АЭС преобладают леса первой группы, в районе Билибинской АЭС – леса третьей группы. В районе Белоярской АЭС площади лесов первой группы в структуре лесных земель не превышают 25%, а более 50% приходится на леса второй группы. В районе Кольской АЭС леса первой группы произрастают примерно на половине лесных территорий, а другая половина занята малоценными лесами третьей группы. Более 50% лесных земель в районах Ленинградской, Калининской и Смоленской АЭС покрыта лесами второй группы.

Сравнительный анализ и расчет стоимости лесных ресурсов с учетом степени покрытия территории лесной растительностью, структуры лесных земель (табл. 2) как факторов эколого-экономического риска районов АЭС позволяет ранжировать районы АЭС по вероятным ориентировочным масштабам экономического ущерба, нанесенного лесным ресурсам, выраженного в рублях на один гектар общей площади района, в следующий ряд: Ленинградской (10941) – Белоярской (9119) – Калининской (7580) – Смоленской (7171) – Кольской (3715) – Курской, Нововоронежской (1520) – Балаковской, Ростовской, Билибинской (506) АЭС.

Кадастровая стоимость сельскохозяйственных земель (табл. 2) имеет наиболее

Таблица 3

**Социально- и медико-демографические характеристики районов АЭС (1995 – 2000 гг.) [9, 10]**

АЭС	Плотность населения, чел./км <sup>2</sup>	Естественный прирост населения, %	Смертность, %	Доля населения с низким уровнем доходов, %	Коэффициент суммарной оценки здоровья населения (КСЗОИ)
Балаковская	27	-8,2	16,3	24	6
Белоярская	24	-7,1	16,0	20	15
Билибинская	Менее 1	+0,2	10,2	24	22
Калининская	20	-14,3	21,9	20	13
Кольская	7	-2,9	11,5	20	14
Курская	45	-10	18,1	27	2
Ленинградская	20	-12,8	20,1	24	14
Нововоронежская	48	-10,5	18,1	22	2
Ростовская	44	-7,5	15,9	20	8
Смоленская	23	-12,5	19,8	22	13

высокие значения в районах Ленинградской, Воронежской, Ростовской и Курской атомных станций, а наиболее низкие – в районе Кольской АЭС. Для оценки вероятного ущерба сельскохозяйственным землям необходимо учитывать их долю в земельном фонде исследуемого региона. Сопряженный анализ этих двух показателей позволяет расположить районы АЭС по вероятной ориентировочной величине экономического ущерба за счет причинения вреда сельскохозяйственным угодьям, выраженного в рублях на один гектар общей площади, в следующий ряд: Воронежская (10825) – Ростовская (9585) – Курская (9470) – Балаковская (8120) – Смоленская (2949) – Ленинградская (1840) – Калининская (1431) – Свердловская (779) – Кольская (16) – Билибинская (незначителен).

Вероятность эколого-экономического ущерба в значительной степени будет определяться исходными демографическими и социально-экономическими параметрами, характеризующими размещение, структуру, занятость, уровень жизни и состояние здоровья населения районов АЭС. В табл. 3 представлены некоторые характеристики социально-демографической ситуации районов АЭС. Согласно медико-экологическому районированию [10], основанному на комплексном анализе статистических данных (коэффициентов смертности, средней ожидаемой продолжительности жизни, комфортности природных условий жизни и труда людей, особенностей их питания, развитости социально-бытовой инфраструктуры, занятости населения, и др.), районы АЭС относятся к различным группам, каждая из которых характеризуется определенным значением коэффициента суммарной оценки здоровья населения (КСЗОИ). Степень неблагоприятности условий формирования общественного здоровья возрастает с увеличением значения КСЗОИ. Значения коэффициента суммарной оценки здоровья населения позволяют косвенно оценить степень подверженности населения районов АЭС радиационному и ядерному риску. Величина КСЗОИ районов АЭС уменьшается в следующем порядке: Билибинская – Белоярская – Кольская и Ленинградская – Калининская и Смоленская – Ростовская – Балаковская – Курская и Нововоронежская. В таком же ряду снижается величина вероятного эколого-экономического ущерба, нанесенного возможным действием радиационных и ядерных факторов населению районов АЭС.

Таким образом, анализ факторов эколого-экономического риска позволяет оценить их значимость в каждом конкретном районе АЭС. Учет этих факторов необхо-

дим для дифференцированного подхода к расчету сумм страховых взносов и компенсационных выплат при страховании ядерных и радиационных рисков.

### **Литература**

1. *Крышев И.И., Рязанцев Е.П.* Экологическая безопасность ядерно-энергетического комплекса России. - М.: ИздАТ, 2000. - 384 с.
2. Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере: Справочное пособие/ *Под ред. Э.Ю. Безуглой и М.Е. Берлянда.* - Л.: Гидрометеиздат, 1983. - 328 с.
3. Климатический атлас СССР. Ч. 1,2. - М., 1960, 1962.
4. *Спирин Е.В.* Зонирование радиоактивно загрязненных территорий/ Материалы межд. научно-практической конф. по теме: «Проблемы ведения агропромышленного производства на радиоактивно загрязненных сельскохозяйственных землях в отдаленный после Чернобыльской катастрофы период» (25-26 февраля 1999г., п. Мичуринский). - М.: Информагротех, 1999. - С. 58-60.
5. *Фесенко С.В., Панов А.В., Пахомов А.В.* Оценка оправданности применения защитных мероприятий в сельском хозяйстве в отдаленный период после аварии на Чернобыльской АЭС/ Материалы межд. научно-практической конф. по теме: «Проблемы ведения агропромышленного производства на радиоактивно загрязненных сельскохозяйственных землях в отдаленный после Чернобыльской катастрофы период» (25-26 февраля 1999г., п. Мичуринский). - М.: Информагротех, 1999. - С. 46-49.
6. Государственный доклад о состоянии и использовании лесов Российской Федерации за 1999 г. - М.: Открытые системы, 2000.
7. Государственный (национальный) доклад о состоянии и использовании земель Российской Федерации за 1999 г. - М.: Открытые системы, 2000.
8. Об утверждении методики экономической оценки лесов. Приказ Россельхоза от 10.03.2000г. №43.
9. Демографический ежегодник России. Статистический сборник. - М.: Госкомстат России, 1999. - 386 с.
10. *Прохоров Б.Б.* Медико-экологическое районирование и региональный прогноз здоровья населения России. - М.: Издательство МНЭПУ, 1996. - 71 с.

Поступила в редакцию 4.09.2002

ные неравномерности, характерные для зоны гладких стержней (рис. 9). Более высокая скорость имеет место в зоне периметра  $\Delta\varphi = 180 - 270^\circ$ , как и при  $H = 620$  мм (максимум расположен после точки с  $\varphi = 180^\circ$ ).

### Сборка с двумя дистанционирующими решетками

Имеют место следующие особенности в распределении скоростей.

- До первой дистанционирующей решетки распределение скоростей мало чем отличается от распределения скоростей в модельной сборке с чисто гладкими имитаторами твэлов.

- Непосредственно после первой решетки распределения не столь аномальны (распределения не иллюстрируются), чем это было при использовании одной решетки. Более того, закономерности в общем соответствуют закономерностям, характерным для сборки с гладкими имитаторами твэлов: большая скорость имеет место в открытой зоне сборки ( $s/d = 1,34$ ), меньшая – в тесной зоне сборки ( $s/d = 1,25$ ), чего не наблюдалось в сборке с одной дистанционирующей решеткой. По-видимому, увеличение сопротивления в сборке за счет второй дистанционирующей решетки способствует упорядочению течения за первой дистанционирующей решеткой. Амплитуда в распределении скорости ( $\Delta W = 1,16 - 0,71 = 0,45$ ) заметно больше, чем в ранее рассмотренных случаях для сборки без дистанционирующих решеток (рис. 5).

- Амплитуда увеличивается при удалении от второй решетки на расстояние 32 мм

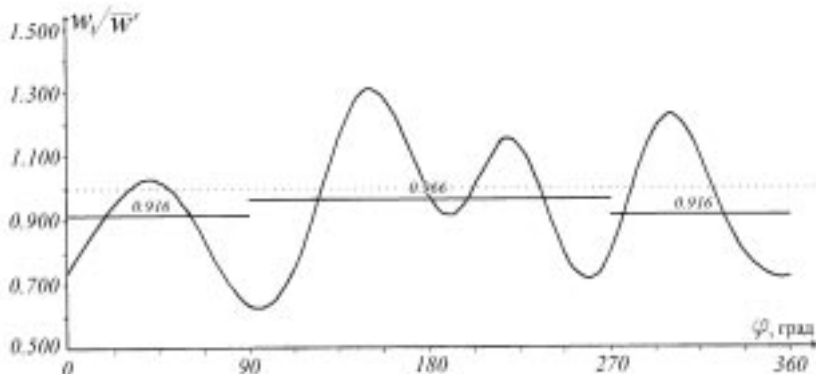


Рис. 10. Распределение относительных скоростей по периметру измерительного имитатора в модели с двумя дистанционирующими решетками ( $H = 770$  мм, расстояние после второй решетки - 32 мм)

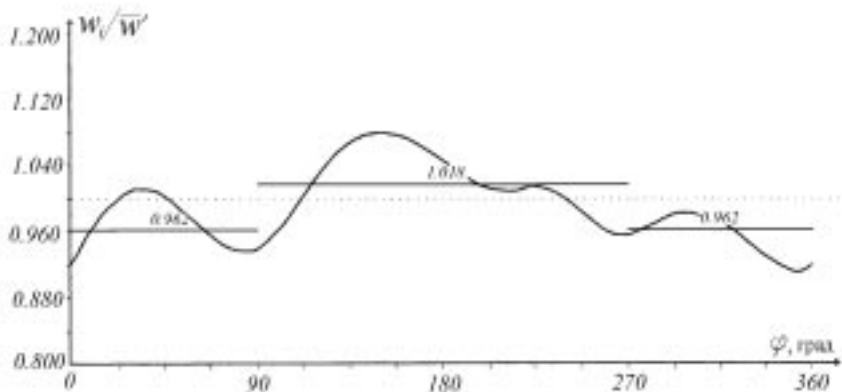


Рис. 11. Распределение относительных скоростей по периметру измерительного имитатора в модели с двумя дистанционирующими решетками ( $H = 920$  мм)

# ДВУМЕРНОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ ПОТОКОВ ПУЗЫРЬКОВОЙ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ОДНОЖИДКОСТНОГО ОПИСАНИЯ. МЕТОДИКА И АЛГОРИТМ\*

**В.К. Артемьев, Ю.Н. Корниенко**

*ГНЦ РФ - Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



В работе предложены двумерная одножидкостная модель и метод численного решения для исследования влияния немонотонного профиля газо-(паро-)содержания на процессы переноса импульса и тепла в двухфазном пузырьковом потоке. Уравнения записаны с учетом переменных свойств теплофизических параметров. Турбулентная структура жидкой фазы учитывает дополнительную турбулентность, наведенную движением пузырьков. Для решения уравнений гидродинамики и тепломассообмена в естественных переменных развит неявный численный метод установления, который позволяет проводить расчет на сильно неравномерных сетках во всей области, устраняя необходимость использования пристеночных функций.

## **ВВЕДЕНИЕ**

Наибольший интерес к исследованиям двухфазных потоков в последние годы диктуется проблемами, связанными с анализом безопасности и аварийных режимов [1] в ЯЭУ с ВВЭР (в частности, при потере теплоносителя). Используемые в таких анализах расчетные комплексы RELAP-5 (США), ATHLET (Германия), ТРАП-97 (Россия) в силу ограниченности исходных одномерных математических моделей и замыкающих соотношений не позволяют адекватно предсказать теплогидравлические характеристики турбулентных двухфазных потоков для всего спектра аварийных ситуаций, например, при низких скоростях вынужденного движения теплоносителя пузырьковой структуры [2]. По традиции считается, что двухжидкостная модель [1] является наиболее полной и строгой при описании поведения двухфазного потока. Однако при этом кроме знания механизмов турбулентного переноса в пределах каждой из фаз необходимы дополнительная труднодоступная информация о механизмах переноса субстанций на поверхности раздела фаз, а также развитие соответствующих численных методов решения с учетом тонкой структуры течения вблизи интерфейса. Поэтому в практических реализациях целесообразно использовать более простые описания [1]- модель потока дрейфа или ее

*\* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 02-01-96022).*

© В.К. Артемьев, Ю.Н. Корниенко, 2003

одножидкостную модификацию, вполне допустимую для описания пузырьковых потоков при малых объемных долях дисперсной фазы и низких давлениях. Вместе с тем в этих условиях большое значение приобретают пространственные эффекты распределений переменных в поперечном сечении канала, в частности, именно для низких массовых скоростей в потоках пузырьковой структуры характерны немонотонные распределения истинного объемного паро-(или газо-)содержания и ряд других нелинейных явлений гидродинамики и теплообмена, не имеющих до настоящего времени адекватного аналитического описания.

Ярким примером, подтверждающим необходимость и важность учета профилей газосодержания, является экспериментально открытый в восьмидесятые годы эффект аномального влияния повышенной пристенной концентрации газосодержания [3] на вязкие напряжения при подъемном течении с низкой массовой скоростью теплоносителя.

Предложенная в [4] аналитическая квазиодномерная модель связывает такое аномальное поведение вязких напряжений с действием возмущающих (архимедовых) сил плавучести пузырьковой фазы. Однако из-за сложности и нелинейности процессов переноса субстанций в таких течениях только двух- и трехмерное численное моделирование позволяет ответить на вопрос о характере и глубине необходимых для адекватного описания этого явления расчетных моделей и, в частности, какой из механизмов преобладает: архимедово всплытие или турбулентный перенос. Это требует проведения численных экспериментов со все более усложняющимися физико-математическими моделями механики сплошных сред, иерархию которых логичнее строить на основе принципа «от простого – к сложному».

В частности требуется улучшение описания гидродинамики и теплообмена в пристенной области, не ограниченное приближениями модели стабилизированного пограничного слоя [5, 6], что особенно важно для исследований в области низких массовых скоростей, где свойство эллиптичности давления требует рассмотрения всей расчетной области включая предвключенный и выходной участки. Именно решению поставленных задач служат модель и метод, представленные в данной работе.

## **ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ОДНОЖИДКОСТНАЯ МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ С ПЕРЕМЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ**

Привлекательность многомерных одножидкостных моделей (ОЖМ) заключается, прежде всего, в возможности использовать отработанный и обоснованный аппарат численного моделирования однофазных турбулентных течений и имеющиеся рекомендации для замыкающих соотношений; кроме того, весьма важным является тестирование алгоритмов расчета для предельных случаев с нулевым паро-(газо-)содержанием.

В простейшей ОЖМ учет влияния второй фазы осуществляется на основе переменной плотности и модифицированных коэффициентов турбулентного переноса импульса и тепла. Основную качественную и количественную нагрузку в ОЖМ несет корректное моделирование процессов переноса субстанций в несущей жидкой фазе. Несмотря на трудности «замыкания» исходной системы уравнений и сложность их численной реализации, решение неодномерных задач привлекает к себе исследователей возможностью работы на более строгом теоретическом и эмпирическом уровне, что, в свою очередь, позволяет более обоснованно и последовательно уточнять и развивать одномерные аналоги таких задач. Кроме того, при разработке упрощенных моделей каких-либо частных эффектов (например, механизмов поперечного переноса субстанций) становятся более отчетливыми



принимаемые допущения, а также их место и ограничения в общей картине модели и пути их улучшения.

При выводе системы осредненных уравнений Рейнольдса будем использовать гипотезу Буссинеска о связи турбулентных напряжений и тензора скоростей деформаций через коэффициент турбулентной вязкости с учетом переменных свойств плотности

$$p^{ij} = pg^{ij} + 2\mu \varepsilon^{ij} - 2/3g^{ij}(\mu \operatorname{div} \bar{u}), \quad (1)$$

где  $p^{ij}$  - компоненты тензора напряжений;  $g^{ij}$  - компоненты метрического тензора;  $p$  - давление;  $\varepsilon^{ij}$  - компоненты тензора скоростей деформаций;  $\mu = \mu_m + \mu_t$  - молекулярная и турбулентная вязкость. Тогда систему уравнений, включающую в себя уравнение неразрывности, уравнения количества движения и уравнение энергии, можно записать в следующем виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \bar{u} = 0, \quad \bar{u} = (u^1, u^2, u^3), \quad (2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} \right) = \rho \bar{g} - \nabla p + 2 \operatorname{div} \mu \bar{Y} - \frac{2}{3} \nabla (\mu \operatorname{div} \bar{u}), \quad (3)$$

где  $\bar{Y}$  есть тензор скоростей деформаций;

$$\rho \left( \frac{\partial h}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla h \right) = \operatorname{div} \operatorname{grad} \lambda T + Q_v, \quad (4)$$

где  $h$  - энтальпия,  $T$  - температура,  $Q_v$  - внутренние источники тепла.

В отличие от однофазной модели система уравнений (2)-(4) содержит дополнительные члены, связанные с переменными свойствами плотности жидкости.

### Покомпонентная форма записи законов сохранения

В покомпонентной форме записи в осесимметричном приближении для вертикальной круглой трубы система уравнений (2)-(4) примет вид ( $u^1 \equiv u_r$  и  $u^3 \equiv u_z$ ), и мы получаем следующую покомпонентную форму уравнений (3) и (4):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho r u_r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} = 0, \quad (5)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{4}{3} \mu r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{4}{3} \mu \frac{u_r}{r^2} \left( 1 + 0.5r \frac{\partial \mu}{\partial r} \right), \quad (6)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = - \rho g - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right), \quad (7)$$

$$\rho \left( \frac{\partial h}{\partial t} + u_r \frac{\partial h}{\partial r} + u_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_v. \quad (8)$$

Уравнения (6) и (7) содержат градиенты от полных давлений, а уравнение (7) еще и массовую архимедову силу. При расчете полных давлений существенно воз-

растает вычислительная работа, поэтому целесообразно в ряде случаев, например, при изотермическом течении или при небольшом подогреве, упростить модель, используя методологию приближения Обербека-Буссинеска для тепловой конвекции (см. [7]). Представим  $p = p_d + p_{st}$ , где  $p_d(r, z)$  - динамическое давление,  $p_{st}(z)$  - статическое давление, и запишем

$$-\rho g - \frac{\partial p}{\partial z} = -(\rho - \bar{\rho})g - \frac{\partial p_d}{\partial z} - \left( \frac{\partial p_{st}}{\partial z} + \bar{\rho} g \right),$$

где  $\bar{\rho} = const$  - средняя по сечению плотность жидкости. Полагая при статическом равновесии  $\frac{\partial p_{st}}{\partial z} + \bar{\rho} g = 0$ , получим

$$-\rho g - \frac{\partial p}{\partial z} = -(\rho - \bar{\rho})g - \frac{\partial p_d}{\partial z}. \quad (9)$$

Формула (9) позволяет учесть плотностные эффекты, связанные с немонотонным поведением газосодержания, и при этом упростить расчет поля давления.

Плотность газо-(или паро-)жидкостного потока запишем в виде

$$\rho = (1 - \alpha)\rho_f + \alpha\rho_g, \quad (10)$$

где  $\rho_f$  - плотность жидкости,  $\rho_g$  - плотность газа. Здесь  $\alpha \equiv \alpha(r)$  - истинное объемное паро-(газо-)содержание. Теплоемкость вычисляется по формуле, аналогичной (10). Для вязкости и теплопроводности при одножидкостном описании используются значения этих свойств для жидкой фазы.

### Модель турбулентности

В [5] представлено одно из первых одножидкостных двумерных описаний пузырькового двухфазного потока, удачно сочетающее в себе простоту и универсальность общего подхода, основанного на идее представления турбулентных вязких напряжений в пузырьковом потоке в виде суперпозиции двух компонент, связанных со сдвиговой турбулентностью и турбулентностью, вызванной относительным движением пузырей.

Исходной гипотезой является представление актуального значения скорости жидкой фазы в следующем виде:  $u_r = u_r + u'_r + u''_r$ ,  $u_z = u_z + u'_z + u''_z$ , где  $u'_r$  и  $u'_z$ , как и в однофазном течении, связаны с представлением мгновенных значений скорости в виде суммы осредненного и пульсационного значений;  $u''_r$  и  $u''_z$  - дополнительные пульсации, вносимые движением пузырей. Процедура осреднения этих пульсаций по Рейнольдсу приводит к соответствующим добавочным вязким напряжениям, которые можно также трактовать как независимые и зависимые от пузырьковых возмущений. Это, в свою очередь, приводит к представлению турбулентной вязкости  $m_t$  в виде двух слагаемых  $\mu_t = \mu' + \mu''$ , где  $\mu'$  обусловлено турбулентностью, независимой от относительного движения пузырьков, а  $\mu''$  определяется дополнительной турбулентностью, вызванной возмущающим действием пузырьковой фазы.

Для сдвиговой турбулентности применим соотношение Рейхардта [8], описывающее поведение коэффициента турбулентной вязкости по всему сечению круглой трубы,

$$\mu' = \rho_f(1 - \alpha(r))\mu_f \begin{cases} 0.4 (y^+ - 11 \operatorname{th}(y^+/11)), & y^+ \leq 50 \\ 0.133y^+ (0.5 + (r/R)^2)(1 + r/R), & y^+ > 50 \end{cases}, \quad (11)$$

где  $y = R - r$ ,  $y^+ = yu_\tau/\nu_m$  - безразмерная координата;  $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$  - скорость трения;

$\tau_w = \mu_m \partial u_z / \partial y$  - касательное напряжение;  $u^+ = u_z / u_\tau$  - масштаб скорости трения. Для дополнительной турбулентной вязкости, обусловленной движением пузырей, запишем следующее соотношение, аналогичное корреляции из [5]:

$$\mu'' = A_1 \rho_f (1 - \alpha(r)) (1 - \exp(-y^+ / A_2))^2 \alpha(r) u_b d_b, \quad (12)$$

где  $u_b$  - скорость всплытия пузырьков;  $d_b$  - диаметр пузырьков. Эмпирические константы  $A_1$ ,  $A_2$  по физическому смыслу являются аналогами постоянной Кармана и константы демпфирования Ван Дрифта в однофазных моделях турбулентности. Для величин  $A_1$ ,  $A_2$  были выбраны значения  $A_1=0.6$ ,  $A_2=32$  с учетом экспериментальных данных по профилю скорости и аномальному изменению касательного напряжения в двухфазном потоке с седлообразным профилем газосодержания для одного из опытов [3].

Совершенствование полуэмпирической модели (12) связано с учетом размеров и формы пузырьков, локальной скорости всплытия, что требует отдельного исследования и выходит за рамки данной публикации.

### НЕЯВНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ И ТЕПЛООБМЕНА

Математические модели и численные методы, использованные в [5,6], оказались не способными в полной мере описать эффекты аномального поведения параметров в двухфазных потоках. Трудности связаны с сильной нелинейностью системы (5)-(8), необходимостью разрешения тонких пограничных слоев, особенностями расчета поля давления.

Для получения физически реалистических решений необходимо сохранение при аппроксимации уравнений гидродинамики и тепломассообмена важнейших свойств дифференциальных операторов, таких как монотонность, балансность (или консервативность), нейтральность. Монотонность отражает свойство переноса возмущения за счет конвекции вниз по потоку. Немонотонные разностные схемы ведут к потере устойчивости, возникновению так называемых «пилообразных» решений.

Свойство консервативности выражается теоремой Остроградского-Гаусса. В разностных схемах, не сохраняющих свойство балансности, возникают дополнительные источники (стоки), искажающие решение задачи.

Важнейшим свойством членов уравнений (6)-(8), описывающих конвективный перенос, является их нейтральный или нулевой вклад в энергетическое интегральное соотношение. Разностные схемы, не сохраняющие свойство нейтральности, обладают меньшим запасом устойчивости, искажают решение особенно при длительных нестационарных расчетах. В частности, методика [6], не обладая свойствами консервативности и нейтральности, приводила в ряде режимов к возникновению неустойчивости численного алгоритма, к физически неоправданным решениям.

Приведем вид монотонной балансности разностной схемы для уравнения переноса некоторой субстанции  $\phi$  в декартовой системе координат ( $q^1 q^2 q^3$ ). Рассмотрим его совместно с уравнением неразрывности. Система имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^1}{\partial q^1} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial q^2} + \frac{\partial \rho u^3}{\partial q^3} = 0, \quad (13)$$

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \Lambda(\phi) = f, \quad \Lambda(\phi) \equiv \rho u^i \frac{\partial \phi}{\partial q^i} - \frac{\partial}{\partial q^i} \eta^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial q^j}, \quad (14)$$

где под  $\phi$  могут подразумеваться компоненты скорости, энтальпия или концент-

рация.

Узловые точки определим в регулярной области  $\Pi(\Omega \in \Pi)$ :

$$q_b \leq q_{1/2}^i < q_{3/2}^i < \dots < q_{k_i-1/2}^i < \dots < q_{N_i}^i \leq q_e, \quad k_i = \overline{1, N_i + 1}, i = \overline{1, n};$$

$$q_{k_i}^i = 0.5(q_{k_i-1/2}^i + q_{k_i+1/2}^i), \quad k_i = \overline{1, N_i}, \quad i = \overline{1, n};$$

$$\Delta q_{k_i-1/2}^i = q_{k_i}^i - q_{k_i-1}^i, \quad k_i = \overline{1, N_i + 1}, \quad i = \overline{1, n} \quad \text{и} \quad \Delta q_{k_i}^i = q_{k_i+1/2}^i - q_{k_i-1/2}^i, \quad k_i = \overline{1, N_i}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Давление, температура и концентрации рассчитываются в центрах ячеек, имеющих координаты  $(q_{k_1}^1, \dots, q_{k_n}^n)$ , компоненты вектора скорости – в центрах граней с координатами  $(q_{k_1-1/2}^1, \dots, q_{k_n-1/2}^n)$ . Свойства монотонных балансных нейтральных разностных схем и разнесение (или смещение) аргументов сеточных функций позволяют получать физически реалистичные поля вычисляемых величин.

В нижеследующих формулах для сокращения записи сеточных функций использованы укороченные обозначения:

$$\Phi_{k_1, \dots, k_n} \equiv \Phi_k, \quad \Phi_{k_1, \dots, k_i \pm 1, \dots, k_n} \equiv \Phi_{k \pm i}, \quad \Phi_{k_1, \dots, k_i \pm 1/2, \dots, k_n} \equiv \Phi_{k \pm i/2},$$

где  $k = (k_1, \dots, k_n)$  - мультииндекс;  $i = (0, \dots, 1, \dots, 0)$  - мультииндекс, имеющий единицу в координате  $-i$ .

Разностное уравнение неразрывности будет иметь вид

$$\xi_k^{m+1} \equiv \frac{\rho_k^{m+1} - \rho_k^m}{\Delta t_m} + \sum_{j=1}^n \frac{(\rho u^j)_{k+j/2}^{m+1} - (\rho u^j)_{k-j/2}^{m+1}}{h_{k_j}^j} = 0, \quad (15)$$

где  $m$  - номер временного шага,  $\Delta t_m$  - шаг временной дискретизации. Уравнение (15) непосредственно не участвует в вычислениях, а используется при выводе разностного уравнения для вычисления давления.

Используя подходы к построению монотонных балансных нейтральных аппроксимаций [9], получим

$$\prod_{\beta=1}^n \Delta q_{k_\beta + \delta^{\beta i} / 2}^\beta \rho_{k+i/2}^m \frac{\Phi_{k+i/2}^{m+1} - \Phi_{k+i/2}^m}{\Delta t_m} + A(\Phi_{k+i/2}^{m+1}) = \prod_{\beta=1}^n \Delta q_{k_\beta + \delta^{\beta i} / 2}^\beta f_{k+i/2}^{m+1}, \quad (16)$$

$$A(\Phi_{k+i/2}^{m+1}) = c_{k+i/2} \Phi_{k+i/2}^{m+1} - \sum_{j=1}^n a_{k+i/2}^j \Phi_{k-j+i/2}^{m+1} + b_{k+i/2}^j \Phi_{k+j+i/2}^{m+1}. \quad (17)$$

Разностная схема (16)-(17) обладает вторым порядком аппроксимации по пространственным переменным и первым порядком по времени. Все коэффициенты  $a_{k+i/2}^j \geq 0$ ,  $b_{k+i/2}^j \geq 0$ , а центральный  $c_{k+i/2}$  не меньше суммы периферийных. После линеаризации соответствующая матрица оператора  $A$  получается несимметричной, но с диагональным преобладанием.

Рассмотрим уравнение (14) для компоненты скорости, тогда правая часть будет содержать градиент давления, а разностная схема (16) - соответствующую аппроксимацию. Выразив компоненты скоростей из уравнений вида (16) и подставив в (15), получим разностное уравнение для вычисления давления

$$\left( \prod_{\beta=1}^n \Delta q_{k_\beta}^\beta \right) \frac{\rho_k^{m+1} - \rho_k^m}{\Delta t_m} + P_h(p_k) = \bar{f}_k, \quad (18)$$

$$P_h(p_k) = \bar{c}_k p_k - \sum_{j=1}^n \bar{a}_k^j p_{k-j} + \bar{b}_k^j p_{k+j}. \quad (19)$$

Разностные уравнения для компонент скорости, давления, температуры и т.д.

образуют нелинейную систему уравнений, решение которой является сложной задачей. Для ее решения был предложен неявный метод установления [9,10].

**НЕЯВНЫЙ МЕТОД УСТАНОВЛЕНИЯ**

Неявную численную процедуру метода установления запишем следующим образом ( $1 \leq i \leq n$ ):

$$\prod_{\beta=1}^n \Delta q_{k_{\beta} + \delta^{\beta i} / 2} \rho_{k+i/2}^m \left( \frac{u_{k+i/2}^{i^{m+1,L+1}} - u_{k+i/2}^{i^{m+1,L}}}{\tau_L} + \rho_{k+i/2}^m \frac{u_{k+i/2}^{i^{m+1,L+1}} - u_{k+i/2}^{i^m}}{\Delta t_m} \right) + A u_{k+i/2}^{i^{m+1,L+1}} =$$

$$= - \frac{p_{k+i}^{m+1,L+1} - p_k^{m+1,L+1}}{h_{k_i}^i} + f_{k+i/2}^{m+1,L}, \tag{20}$$

$$\prod_{\beta=1}^n \Delta q_{k_{\beta}}^{\beta} \left( \frac{p_k^{m+1,L+1} - p_k^{m+1,L}}{\tau_L} + \rho_k^{m+1,L+1} - \rho_k^m \right) + P_h \rho_k^{L+1} = \bar{f}_k, \tag{21}$$

где индекс “L” означает номер итерации или номер шага стабилизации,  $\tau_L$  есть шаг установления. Линеаризация выполняется таким образом, чтобы оператор A становился линейным относительно  $u_{k+i/2}^{i^{m+1,L+1}}$  при значениях  $u_{k+i/2}^{i^{m+1,L}}$  найденных на предыдущей итерации. Отметим, что линеаризованный оператор  $P_h$  является самосопряженным, т.к.  $\bar{a}_{k+j}^j = \bar{b}_k^j$ .

Для решения линейных разностных уравнений был использован метод неполной факторизации, относящийся к классу методов, предложенных Н.И. Булеевым [11]. Для повышения эффективности вычислений при решении плохо обусловленного уравнения давления (21) был использован метод неполной факторизации с чебышевским ускорением сходимости [12].

На шаге по времени реализована следующая последовательность вычислений. Сначала рассчитываются коэффициенты разностных уравнений с использованием известных с предыдущей итерации  $u^{j^m}$ ,  $u^{j^{m+1,L}}$   $1 \leq j \leq n$ . Затем методом неполной факторизации с чебышевским ускорением решается уравнение давления и далее, используя обычный вариант метода, рассчитываются компоненты скорости. Затем с найденными полями скорости и давления вычисляются поля температуры, концентрации и т.д. Итерации на текущем временном слое завершаются по достижении заданной точности  $\zeta$  - точности выполнения разностного уравнения неразрывности:

$$\max_{\Omega_h} \left| \zeta_k^{m+1,L+1} \right| < \zeta. \tag{22}$$

Соотношение (22) является основным критерием сходимости. После этого проверяются другие критерии сходимости и точности, и, либо итерации закачиваются, и происходит переход на следующий временной шаг, либо осуществляется новый цикл внешних итераций по нелинейности.

В целом неявный численный метод обладает хорошим запасом устойчивости, эффективен, позволяет увеличивать шаг интегрирования по времени по мере стабилизации физического процесса, оптимизировать объем вычислений за счет выбора шага установления.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны двумерная одножидкостная модель с переменной плотностью, теплофизическими свойствами и метод численного решения для исследования влияния немонотонного профиля газо-(паро-)содержания на процессы переноса импульса и тепла в двухфазном пузырьковом потоке.

Турбулентная структура жидкой фазы представлена двумя компонентами: первая связана с пристенной турбулентностью, вторая обусловлена дополнительной турбулентностью, наведенной движением пузырьков.

Для решения уравнений гидродинамики и тепломассообмена в естественных переменных разработан неявный численный метод установления. Отличительными особенностями являются а) монотонные балансные нейтральные разностные схемы, сохраняющие важнейшие интегральные свойства дифференциальных операторов; б) неявная итерационная процедура решения системы нелинейных разностных уравнений; в) метод неполной факторизации для решения линейаризованных уравнений.

Неявный метод установления обладает хорошей устойчивостью и сходимостью, позволяет проводить расчет на сильно неравномерных сетках во всей области, устраняя необходимость использования пристеночных функций при постановке граничных условий.

## СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$g$	ускорение силы тяжести		<i>Греческие символы</i>
$g^{ki}$	компоненты метрического тензора	$\alpha$	истинное объемное паро-(газо)-содержание
$h$	энтальпия	$\beta$	расходное объемное газосодержание
$p$	давление	$\varepsilon^{ki}$	компоненты тензора скорости деформации
$p_d$	динамическое давление	$\mu$	эффективная динамическая вязкость
$p_{st}$	статическое давление	$\mu_m$	молекулярная динамическая вязкость
$p^{ki}$	компоненты тензора напряжения	$\mu_t$	турбулентная динамическая вязкость
$q_v$	источник внутренних энерговыделений	$\rho$	плотность
$\bar{q}$	плотность теплового потока	$\tau_w$	касательное напряжение на стенке
$r$	радиальная координата		<i>Индексы</i>
$R$	радиус	$d$	динамический
$t$	время	$f$	жидкость
$U_{in}$	скорость на входе	$g$	газ (пар)
$u_r$	радиальная компонента скорости	$in$	вход
$u_z$	аксиальная компонента скорости	$m$	молекулярный
$u_t$	динамическая скорость	$r$	радиальный
$\vec{u}$	вектор скорости	$st$	статический
$y=R-r$	координата от стенки	$t$	турбулентный
$y^+$	безразмерная координата	$z$	аксиальный
$Y$	тензор скоростей деформации		
$z$	аксиальная координата		

## Благодарности

Авторы выражают благодарность Е.В. Корниенко за помощь при подготовке рукописи.

**Литература**

1. Делайе Дж., Гюо М., Ритмюллер М. Теплообмен и гидродинамика в атомной и тепловой энергетике. – М.: Энергоатомиздат, 1981.
2. Balakin P.P., Kornienko Yu.N. Improvement and Verification of RELAP5/MOD3.2 Wall Friction and Heat Transfer Models for Low Mass Flux Bubble Flow: Proc. 6<sup>th</sup> Int. Conf. on Nuclear Engineering. - ICONE-6. – San Diego - USA. - May 1998. - Paper 6195. - Trac 1.
3. Nakoryakov V.E., Kashinsky O.N., Burdukov A. P., Odnoral V.P. Local Characteristics of Upward Gas-Liquid Flows // Int. J. Multiphase Flow. – 1981. - V. 7, - P. 63-81.
4. Kornienko Yu.N. Effect of Saddle-Shape Transversal Void Fraction on Low Reynolds Number Wall Friction and Heat Transfer in Bubble Flows: Proc. 5<sup>th</sup> Int. Conf. on Nuclear Engineering. - ICONE-5. - Nice. - France. - May 1997. - Paper 2433, - Trac 1.
5. Sato Y., Sadatomi M., Sekoguchi K. Momentum and Heat Transfer in Two-Phase Bubble Flow-I. Theory // Int. J. Multiphase Flow. - 1981. – V. 7. – P. 167-177.
6. Кузеванов В.С., Иваненко И.Ю., Гинкин В.П., Корниенко Ю.Н. Численное исследование профилей параметров неравновесного двухфазного потока на основе двумерной модели. Часть 1. Физическая модель и математическая формулировка // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 1994. – № 4-5. - С. 80-88.
7. Джалурия Й. Естественная конвекция. - М.: Мир, 1983. - 400 с.
8. Петухов Б.С., Генин Л.Г., Ковалев С.А. Теплообмен в ядерных энергетических установках. - М.: Энергоатомиздат, 1986. - 472 с.
9. Артемьев В.К. Развитие численных методов решения задач динамики вязкой жидкости. - Обнинск, ГНЦ РФ ФЭИ, 1997, диссертация канд. физ.- мат. наук.
10. Artemyev V.K. Implicit Numerical Method for Solving of Fluid Mechanics, Heat and Mass Transfer Equations: Proc. 11th Int. Heat Transfer Conf. – Kyongju. – Korea. 1998. – V. 4. - P. 307-312.
11. Булеев Н.И. Численный метод решения двух- и трехмерных уравнений диффузии // Математический сборник. – 1960. – Т. 51. - № 2. - С. 227-238.
12. Артемьев В.К. Явный метод неполной факторизации с чебышевским адаптируемым ускорением сходимости: Препринт ФЭИ - 2095. - Обнинск: ГНЦ РФ-ФЭИ, 1990. - 18 с.

Поступила в редакцию 25.11.2002

УДК 541.15

# РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ, ОБЛАДАЮЩИХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

**С.В. Кобяшева\*, Н.И. Коваленко\*\*, Г.К. Глушонок\*\*, Е.П. Петряев\*\***

*\*Международный государственный экологический университет, г. Минск*

*\*\*Белорусский государственный университет, г. Минск*



В статье изложены результаты исследований более сорока жидкокристаллических материалов (ЖКМ), принадлежащих восьми различным классам органических соединений. Исследовалось влияние структуры и строения ЖКМ на их радиационную стойкость: изменения температур плавления ( $T_{пл}$ ) и температур просветления ( $T_{пр}$ ), температурного интервала существования мезофазы (ТИМ) в зависимости от дозы облучения, начальный радиационно-химический выход стабилизированных радикалов при температуре 77 К ( $G(R)_{77}$ ). Стойкость ЖКМ зависит от их структуры и строения – присоединение циклических фрагментов, различных атомов и групп атомов к ароматическим фрагментам приводит к значительному изменению исследованных параметров при увеличении дозы облучения.

## ВВЕДЕНИЕ

Жидкокристаллическое состояние вещества с физической точки зрения есть самостоятельное фазовое состояние, не менее важное и интересное, чем хорошо известные твердое, жидкое и газообразное. К настоящему времени синтезировано огромное количество ЖКМ в связи с их широким практическим применением. Чаще всего ЖКМ используются в средствах отображения информации: ЖК-дисплеях, ЖК-индикаторах.

Синтезируются и разрабатываются все новые ЖКМ различного назначения с новыми свойствами. Использование жидких кристаллов в приборах аппаратов, летающих на околоземных орбитах, вызывает необходимость изучения механизмов процессов, происходящих в ЖКМ под действием ионизирующего излучения, направленного синтеза ЖКМ с заранее заданными свойствами и структурой. Изучение радиационной стойкости ЖКМ представляется важным и с точки зрения материаловедения. Приборы на основе ЖКМ во время эксплуатации в условиях космоса подвергаются суммарному воздействию различных факторов и видов излучения (электрического поля, электромагнитного солнечного излучения, различных видов заряженных и нейтральных частиц). При этом возможно ухудшение или полное исчезновение важных функциональных параметров, что может привести к невозможности их дальнейшего использования из-за разрушения [1].



Основной отличительной характеристикой ЖКМ является ТИМ (разность температур  $T_{np}$  и  $T_{nl}$ ).  $T_{np}$  считается наиболее информативным параметром термической устойчивости ЖКМ [2].

Проведение в условиях космоса полного обследования устойчивости ЖКМ с материаловедческой точки зрения является достаточно дорогостоящим, поэтому в лабораторных условиях было смоделировано радиационное воздействие с целью исследования наиболее важных для ЖКМ физических параметров  $T_{nl}$ ,  $T_{np}$ , ТИМ и  $G_{77}(R)$ .

ЖКМ в индикаторных приборах защищены стеклом от влияния многих факторов: молекул, атомов, ионов, низкоэнергетических тяжелых заряженных частиц, атомарного кислорода. Как известно из литературы [3], основным типом воздействия на вещество в этих условиях является тормозное излучение. И хотя невозможно [3] заменить воздействие одного вида излучений другим при материаловедческих исследованиях, тем не менее сравнительный анализ для одного вида излучения, но для различных соединений, используемых в одинаковых условиях, на наш взгляд, несет полезную информацию об их радиационной устойчивости. Поэтому  $\gamma$ -излучение может с достаточной степенью достоверности смоделировать действие излучения на ЖКМ в условиях эксплуатации на космических станциях.

Целью исследования было изучение закономерностей радиационно-химического поведения ЖКМ, их индивидуальной устойчивости в зависимости от структуры и строения.

## ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для испытаний были взяты ЖКМ, представленные для исследований НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко (г. Минск). Соединения принадлежат к следующим классам:

- I - алкоксибензойные кислоты (АБК);
- II - бензонитрилы и их производные (БН);
- III - бутилциклогексанкарбоновая кислота и ее эфиры (БЦГКК);
- IV - анизолциклогексанкарбоновая кислота и ее эфиры (АЦГКК);
- V - 1, 3 - алкилдиоксанкарбоновые кислоты (ДОКК);
- VI - диоксаборинаны (ДОБ);
- VII - алкоксиазоксипроизводные (ААБ);
- VIII - циклогексеноны и их производные (ЦГ).

## ПАРАМЕТРЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Температура плавления  $T_{nl}$ ; температура просветления  $T_{np}$ ; температурный интервал существования мезофазы ТИМ (ТИМ =  $T_{np} - T_{nl}$ ); радиационно-химический выход стабилизированных при 77 К радикалов ( $G_{77}(R)$ ).

## МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

**Измерение температур плавления, просветления, ТИМ.** Для определения фазовых превращений ЖКМ использовали капиллярный метод [4]. Изменение температуры происходит со скоростью 1 град/с. Образцы вакуумировали до  $10^{-4}$  мм.рт.ст., чередуя циклы плавления и кристаллизации. Облучение проводили на установке ЛМБ- $\gamma$ -1М с цезиевым источником  $Cs^{137}$ . Мощность дозы составляла 0.378 Гр/с [5]. Проводили облучение в интервале доз 0,3 - 600 кГр при комнатной температуре и 77 К.

**Измерение радиационно-химического выхода стабилизированных радикалов.** Спектры ЭПР регистрировались на радиоспектрометре ERS-220 производства ГДР в виде первой и второй производной кривой поглощения с длиной волны клистрона 3.2 см и с прямоугольным резонатором типа Н<sub>102</sub>. Амплитуда 100-килогерцевой модуляции и мощность СВЧ-излучения варьировались в пределах 0.01 - 0.5 мТл и 0.35

- 70 мВт. Расчет количества радикалов проводился на основании [6]. Погрешность метода измерения относительных концентраций парамагнитных центров в образце составила 10 -15%.

### ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ ЖКМ ПРИ ДЕЙСТВИИ $\gamma$ -ИЗЛУЧЕНИЯ

В данном разделе приводятся результаты испытаний влияния ионизирующего излучения различной дозы на физико-химические характеристики ЖКМ.

В таблицах и на рисунках приведены идентификационные номера для исследованных органических соединений (формулы и названия указаны в таблицах; при обсуждении с целью сокращения названий будем употреблять аббревиатуру, предложенную выше). На рис.1 приведены кривые изменения  $T_{пл\gamma}$  и  $T_{пр\gamma}$  ЖКМ, облученных при различных дозах, относительно необлученных. Как видно из рисунка, при общем увеличении дозы  $\gamma$ -излучения происходит симбатное уменьшение значений фазовых переходов для большинства соединений. Предложенный набор ЖКМ входит в состав смесей STN-311 и STN-312, используемых в ЖК-индикаторах [7]. Данные табл. 1 подтверждают тенденцию сохранения ТИМ для ЖКМ данной смеси.

На рис. 2 приведены кривые изменения  $T_{пл\gamma}$  и  $T_{пр\gamma}$  ЖКМ, облученных при различных дозах, относительно необлученных для соединений класса ДОБ. Для соединения 31 происходит сужение ТИМ из-за увеличения  $T_{пл}$  и уменьшения  $T_{пр}$  при облучении.

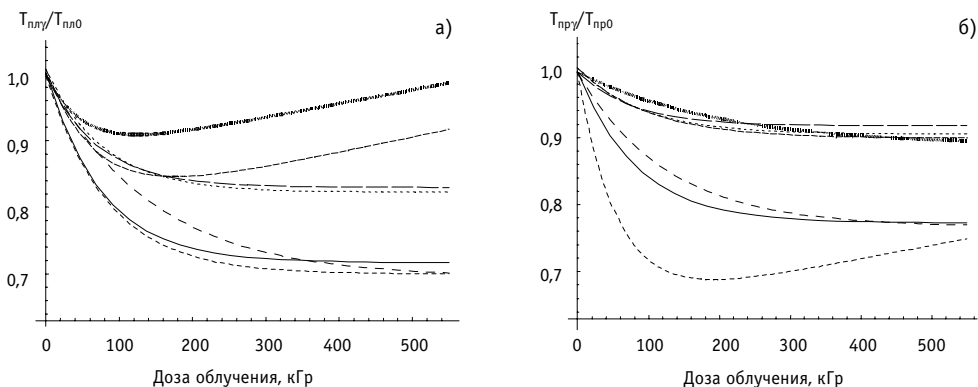


Рис.1. Изменение  $T_{пл\gamma}$  относительно  $T_{пл0}$  (а) и изменение  $T_{пр\gamma}$  относительно  $T_{пр0}$  (б) при различных дозах облучения. Обозначения соединений: ----- 16; ..... 17; ..... 19; ..... 20; ———— 40; ----- 44; - - - - 48

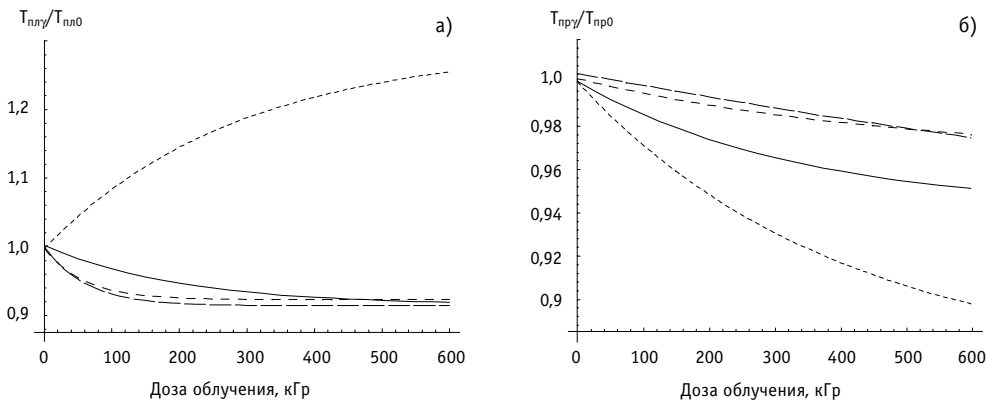


Рис.2. Изменение  $T_{пл\gamma}$  относительно  $T_{пл0}$  (а) и  $T_{пр\gamma}$  относительно  $T_{пр0}$  (б) ДОБ при различных дозах облучения. Обозначения соединений: ———— 31; ..... 32; ----- 33; - - - - 34

Таблица 1

**Структурные формулы, значения ТИМ ЖКМ, облученных при дозах 0, 100 и 500 кГр, выходы стабилизированных при 77 К радикалов  $G_{77}(R)$** 

№	Формула ЖКМ	Название	ТИМ, °C 0/100/500	$G_{77}(R)$ мол/100эВ
16		4-бутил-1-циклогексанкарбоновая кислота	25/14/25	$3.7 \pm 0.8$
17		4-(4-цианофенил)фенил-4-пропил-1-циклогексанкарбоксилат	167/ 161/ 142	$0.2 \pm 0.1$
19		2,3-дициано-4-гексилокси-1-(4-бутилциклогексилкарбо-нилокси)бензен	107/105/94	$3.1 \pm 1.4$
20		4-(4-пропилциклогексил)фенил 4-бутил-1-циклогексанкарбоксилат	107/104/102	$2.6 \pm 0.7$
40		4-(4-пропилциклогексил) бензонитрил	16/14/13	$1,1 \pm 0,2$
44		4-(4-пентилциклогексил)бензонитрил	26/23/20	$3,4 \pm 1,0$
48		4-[5-(4-пентил-фенил)-2-пиридил] бензонитрил	173/169/163	$0,29 \pm 0,05$

Таблица 2

**Структурные формулы, значения ТИМ исходных ЖКМ класса ДОБ, облученных при дозах 0, 100 и 500 кГр, выходы стабилизированных при 77 К радикалов  $G_{77}(R)$** 

№	Структурная формула	Название ЖКМ	ТИМ, °C 0/100/500	$G_{77}(R)$ мол/100эВ
31		4-цианофенил 4-(5-бутил-1,3,2-диоксаборинан-2-ил)-бензоат	119/120/116	$0,09 \pm 0,01$
32		4-бутилфенил 4-(5-бутил-1,3,2-диоксаборинан-2-ил)-бензоат	67/53/27	$0,13 \pm 0,02$
33		4-циано-3-фторо-1-[4-(5-пентил-1,3,2-диоксаборинан-2-л)фенилкарбонилокси]бензен	92/96/96	$0,05 \pm 0,01$
34		4-циано-3-фторфенил-2фторо-4-(5-пентил-1,3,2-диоксаборинан-2-ил) бензоат	86/90/89	$0,20 \pm 0,05$

В табл. 2 приведены структурные формулы ДОБ, значения ТИМ и  $G_{77}(R)$ .

На рис. 3 на примере класса ДОКК показаны примеры изменения  $T_{пл}\gamma$  и  $T_{пр}\gamma$  относительно необлученных  $T_{пл}$  и  $T_{пр}$  при увеличении дозы облучения.

Наибольшее падение температур фазовых переходов (до 20%) происходит на начальных стадиях облучения (при дозах до 100 кГр). При дальнейшем облучении значения температур остаются практически постоянными.

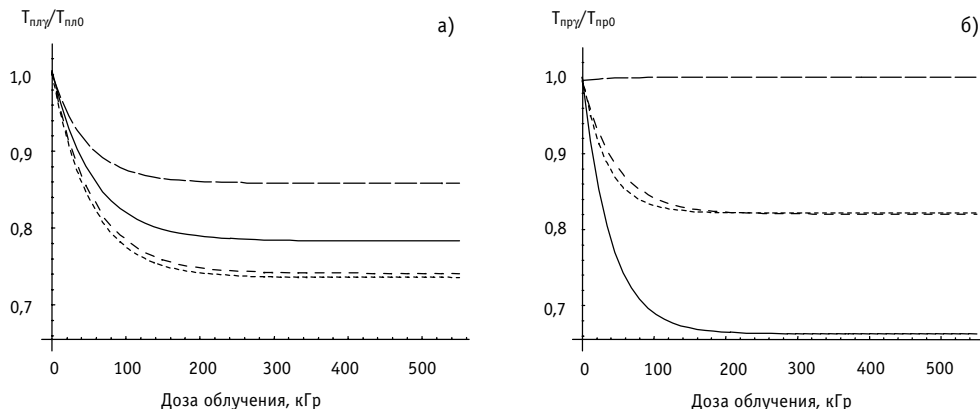


Рис.3. Изменение  $T_{пл\gamma}$  относительно  $T_{пл0}$  (а) и  $T_{пр\gamma}$  относительно  $T_{пр0}$  (б) ДОКК при различных дозах облучения. Обозначения соединений: — 31; - - - - 32; - - - - - 33; - - - - - 34

В табл. 3 приведены структурные формулы ДОКК, значения ТИМ и  $G_{77}(R)$ .

Для сравнения влияния структуры и строения ЖКМ на их физико-химические и радиационно-химические свойства в табл. 4 приведены значения температур фазовых переходов, ТИМ и выходы стабилизированных при 77 К радикалов для ЖКМ, структура которых усложняется, но содержащих в качестве алкильных фрагментов радикалы пропил-пентил.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Изменение физико-химических свойств и радиационно-химического поведения ЖКМ существенно зависит от их строения и структуры.

Радиационно-химическое поведение исследованных органических соединений, обладающих ЖК-свойствами, в основном, подчиняются фундаментальным принципам радиационной химии. В структуре ЖКМ имеются сопряженные связи, ароматические фрагменты. Из-за высокосопряженной  $\pi$ -электронной системы энергия возбуждения в таких фрагментах при облучении сильно делокализована. Значения  $G_{77}(R)$  иссле-

Таблица 3

#### Структурные формулы, значения ТИМ исходных ЖКМ класса ДОКК, облученных при дозах 0, 100 и 500 кГр, выходы стабилизированных при 77К радикалов $G_{77}(R)$

№	Формула ЖКМ	Название	ТИМ, °С 0/100/500	$G_{77}(R)$ мол/100эВ
27		Транс—2-пропил-1,3-диоксан-5 карбоновая кислота	4/0/0	0,8±0,2
28		5-метилцис-2-пентил-1,3-диоксан-5 карбоновая кислота	31/28/31	1,2±0,2
29		5-метилцис-2-пентил-1,3-диоксан-5 карбоновая кислота	76/71/75	0,8±0,2
30		Транс-2-нонил-1,3-диоксан-5 карбоновая кислота	36/39/40	1,2±0,1

**Радиационно-химические выходы стабилизированных при 77 К радикалов, температуры плавления и просветления, структурные формулы для ЖКМ, содержащих 3-5 атомов углерода в алкильном радикале при дозах облучения 0, 100, 500 кГр**

№	Структурная формула	Название ЖКМ	$T_{пл}, ^\circ\text{C}$ исх/100/ 500	$T_{пр}, ^\circ\text{C}$ исх/100/ 500	$G_{77}(R)$ мол/100В
16		4-бутил-1-циклогексанкарбоновая кислота	38/31/27	63/45/52	5,4±1,5
20		4-(4-пропилциклогексил)фенил 4-бутил-1-циклогексанкарбоксилат	78/72/63	185/176/ 165	4,8±1,0
38		Цис-2-метил-4-пропил-1-циклогексанкарбоновая кислота	55/52/	62/72	1,6±0,7
40		4-(4-пропилциклогексил)бензонитрил	32/27/27	48/41/42	1,7±0,2
46		6-пентил-3-(4-пентилоксифенил)-2-циклогексен-1-он	94/94/91	130/127/ 129	0,44±0,06
4		4-пентилоксибензойная кислота	98/96/	145/136/	0,35±0,04
14		4-(4-пентилоксифенил)бензонитрил	45/45/	72/70/	0,31±0,04
29		5-метил-цис-2-пентил-1,3-диоксан-5-карбоновая кислота	44/40/40	48/39/40	0,8±0,2
32		4-бутилфенил 4-(5-бутил-1,3,2-диоксаборинан-2-ил)-бензоат	98/107/ 123	165/160/ 150	0,13±0,02
48		4-[5-(4-пентилфенил)-2-пиридил]-бензонитрил	66/58/54	239/229/ 217	0,29±0,04

дованных ЖКМ коррелируют с литературными [8] и позволяют соотносить влияние строения молекул ЖКМ и их радиационно-химическое поведение. Выход радикалов при облучении ЖК-соединений при 77 К тем меньше, чем более ненасыщенна молекула. Наибольшие выходы характерны для ЖКМ, молекулы которых имеют насыщенные циклические фрагменты. С увеличением числа ароматических фрагментов происходит падение  $G(R)_{77}$  за счет диссипации энергии по  $\pi$ -связям бензольных колец и сопряженных с ними связей. На основании полученных данных по выходам стабилизированных радикалов при 77 К можно с уверенностью предполагать, что и значения выходов конечных продуктов радиолиза должны соответствовать  $G_{77}(R)$ , а их накопление будет влиять на кристаллическую структуру ЖКМ и, следовательно, на изменение физических характеристик ЖКМ.

При увеличении дозы облучения происходит понижение температур плавления и просветления для соединений 48, 20, 44, 40, 16, 27, 28, 29, 30 (рис. 1, 3). Это связано с накоплением продуктов радиолиза в кристаллической матрице ЖКМ. Однако при этом значения ТИМ могут оставаться относительно постоянными или изменяться, уменьшаясь либо увеличиваясь:

- в случае постоянства ТИМ - продукты радиолиза одинаково влияют на структуру ЖКМ как в твердом состоянии, так и в мезофазе (рис. 3, соединения 27-30);

- увеличение ТИМ (рис. 2, соединение 30) за счет повышения  $T_{np}$  и понижения  $T_{пл}$  – можно объяснить накоплением рекомбинационных продуктов, структурно подобных ЖКМ, которые «ужесточают» матрицу в мезофазе;

- уменьшение ТИМ (рис. 1, соединение 16 и рис. 2, соединение 32) можно объяснить накоплением фрагментарных продуктов радиолиза, которые повышают температуру плавления, но понижают температуру просветления, т.к. «разжижают» структуру ЖКМ. Возрастание  $T_{пл}$  (рис. 2, соединение 32) может быть объяснено следующим образом. Продукты радиолиза образуют дополнительные связи с молекулами ЖКМ, т.е. «скрепляют» кристаллическую матрицу. Понижение  $T_{np}$  можно объяснить обратным процессом, а именно, продукты радиолиза «разжижают» ЖКМ, т.к. не имеют одинаковой молекулярной структуры, подобной ЖКМ, в момент его перехода в изотропную жидкость. Увеличение  $T_{np}$  (рис. 1, соединения 16, 17 и 19) может быть связано с тем, что продукты радиолиза, находясь между слоями либо молекулами ЖКМ, участвуют в межмолекулярном взаимодействии, укрепляя тем самым матрицу при переходе ЖКМ из мезофазы в изотропную жидкость.

Наибольшая деструкция ЖКМ происходит на начальных этапах облучения, когда дозы не превышают 100 кГр (рис. 1-3). При дальнейшем увеличении дозы  $\gamma$ -излучения  $T_{пл}$  и  $T_{np}$ , в основном, остаются постоянными. Вероятно, при увеличении дозы облучения на несколько порядков выше предложенной в эксперименте может произойти полная деструкция ЖКМ с потерей их жидкокристаллических свойств.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе приводятся предварительные результаты исследований радиационной устойчивости ЖКМ, используемых в смесях для дисплеев и индикаторов, позволяющие сделать следующие выводы об устойчивости органических соединений, обладающих жидкокристаллическими свойствами:

- значения радиационно-химических выходов стабилизированных при 77 К радикалов зависят от строения молекул ЖКМ; увеличить устойчивость ЖКМ к действию ионизирующего излучения можно за счет усложнения структуры молекул ароматическими фрагментами;
- ионизирующее излучение, в основном, понижает температуры фазовых переходов ЖКМ;
- для большинства ЖКМ при увеличении дозы облучения ТИМ не претерпевает кардинальных изменений, что говорит о продолжительном сохранении мезофазы;
- изменение ТИМ обуславливается накоплением продуктов радиолиза, по-разному влияющих на термостабильность ЖКМ;
- при небольших дозах облучения (до 100 кГр) происходит наибольшее падение температур фазовых переходов (от 10 до 25%);
- увеличение дозы ионизирующего излучения приводит к различным изменениям температур фазовых переходов (увеличению  $T_{пл}$ ,  $T_{np}$ ) в ЖКМ определенного строения;
- полученные экспериментальные данные позволяют осуществлять целенаправленный подбор ЖКМ с заданными свойствами для создания смесей жидких кристаллов для дисплеев и индикаторов.

**Литература**

1. Радиационная стойкость органических материалов. Справочник/*Под ред. В.К. Милинчука, В.И. Тупикова.* - М.: Энергоатомиздат, 1986. – 270 с.
2. *Америк Ю.Б., Кренцель Б.А.* Химия жидких кристаллов и мезоморфных систем. -М.: Наука, 1981. - 288 с.
3. *Брикман Б.А., Милинчук В.К.* //Химия высоких энергий. - 1989. - Т. 23. - №3. - С. 195.
4. Справочник химика. – М.: Химия, 1976. - Т.3. - С. 197.
5. *Лицаев А.К.* Современная радиационная химия. – М.:Наука, 1986. -Т. 1. – 440 с.
6. *Своллоу А.* Радиационная химия органических соединений. –М., 1963. – 136 с.
7. Исследование спецстойкости жидкокристаллических материалов: Отчет о НИР/БГУ/; Руководитель Н.И. Коваленко.- № ГР 0189.007103. Инв. № 029.00011004.-Мн., 1992. – 54 с.
8. *Уанье Ю., Гейман Т.* Углеводороды. Аспекты радиоллиза. – М., 1971. - 292 с.

Поступила в редакцию 25.01.2003

УДК 621.039.51:57.089

# ФИЗИКО-ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИМПУЛЬСНОГО НЕЙТРОННОГО ГЕНЕРАТОРА В ПРИЛОЖЕНИИ К МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИМ ИССЛЕДОВАНИЯМ\*

С.Е.Ульяненко\*, В.А.Самарин\*\*, С.П. Капчигашев\*,  
Ю.В. Землянская\*, А.А. Артеменко\*

\* *Медицинский радиологический научный центр РАМН, г. Обнинск*

\*\* *ВНИИАвтоматики Минатома им. Н.Л.Духова, г. Москва*



В работе представлены результаты экспериментально-расчетных исследований физико-дозиметрических характеристик импульсного нейтронного излучения установки ИНГ, планируемой в качестве базового источника быстрых нейтронов для перспективного развития сочетанной лучевой терапии злокачественных новообразований.

С 1985 г. после длительного периода физико-дозиметрических и радиобиологических исследований началось применение пучка быстрых нейтронов реактора БР-10 в сочетанной гамма-нейтронной терапии. Пучок Б-3 реактора характеризуется высокой плотностью и стабильностью потока нейтронов, а также малой примесью гамма-излучения (5-10%). На этом пучке проведено лечение более, чем 350 больных [1]. Аналогичная методика лучевой терапии развита в Германии на базе пучка RENT ядерного реактора FRM Технического университета Мюнхена. Единственным недостатком пучков ядерных реакторов в нейтроноударной (или часто так называемой дистанционной) терапии является быстрый спад поглощенной дозы с глубиной в ткани. Так, глубина половинной дозы для пучков, используемых в терапии, составляет 5-6 см в тканезквивалентном фантоме [2], в то время как для пучков нейтронов из бериллиевых мишеней даже малых циклотронов это значение равно 7-8 см.

В плане расширения внедрения нейтронов в практику медико-биологических исследований нами рассматривается возможность использования портативных нейтронных генераторов серии ИНГ, разрабатываемых и производимых ВНИИ автоматики им Н.Л. Духова (г. Москва). С использованием экспериментального образца такого генератора нами проведен ряд физико-дозиметрических исследований в воздухе и в тканезквивалентном фантоме в зависимости от частоты следования импульсов и величины зарядного напряжения с использованием разных экспериментальных методов: ионизационных камер, твердотельных (кремниевых) и химических дозиметров, активационных детекторов, а также расчетных методов.

\* *Работа поддержана грантом РФФИ № 01-04-96005*

© *С.Е.Ульяненко, В.А.Самарин, С.П. Капчигашев, Ю.В. Землянская, А.А. Артеменко, 2003*



Рассматривается нами также возможность использования нейтронов с энергией 14 МэВ для проведения фундаментальных радиобиологических исследований с точки зрения получения данных о биологическом действии тяжелых ядер отдачи.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Генератор ИНГ-03 предназначен для генерирования импульсного потока нейтронов с энергией  $14 \pm 0,5$  МэВ и частотой следования импульсов от одиночного до 100 Гц. ИНГ состоит из двух отдельных систем: устройства управления и излучателя нейтронов, связь между которыми осуществляется двумя жгутами - для подачи зарядного напряжения и подачи импульса запуска (см. рис. 1). Излучатель нейтронов состоит из двух соединенных между собой блоков (блока коммутации и блока трубки), выполненных в цилиндрических металлических корпусах диаметром 140 мм. Нейтроны с энергией 14 МэВ образуются в результате ядерной реакции синтеза дейтона и ядра трития, которая происходит в мишени отпаянной нейтронной трубки.

Длина излучателя нейтронов составляет 860 мм, масса его 11 кг. Устройство управления является прибором настольного типа с массой 16,5 кг и размещено в металлический корпус прямоугольной формы (размеры его составляют  $160 \times 450 \times 400$  см<sup>3</sup>). Устройство управления задает зарядное напряжение до 5 кВ и частоту следования импульсов. Генератор может работать в трех режимах:

- режим одиночных импульсов нейтронов;
- частотный режим – с фиксированным значением частоты следования импульсов нейтронов;
- частотный режим – при запуске от внешнего источника сигналов с произвольным значением частоты запуска, но не более 100 Гц.

Длительность каждого импульса нейтронов на уровне 0,1 амплитуды импульса составляет 0,8-1 мкс.

На рис. 1 представлена схема установки ИНГ-03. Источником нейтронов является мишень диаметром 6,7 см, которая напылена тритием и из которой практически изотропно испускаются нейтроны за счет ядерной реакции  $T(d,n)He$ . Дозиметрические исследования проводились как в воздухе, так и в стандартном фантоме из ПММА размером  $16 \times 16 \times 16$  см [3]. Дозиметрами служили система ионизационных камер Exradin (Illinois, США) - Unidos (PTW, Германия), кремниевые диоды (ИППРИ, Чехия), химический дозиметр ФБК (ферросульфат-бензол-ксиленол-оранж).

Проведены также расчетные исследования с модификацией стандартных формул [4] и по программе КАСКАД. Для расчета энергетического спектра ядер отдачи использовался метод ММК ФК. Оценки по полному числу смещенных атомов вторичны-

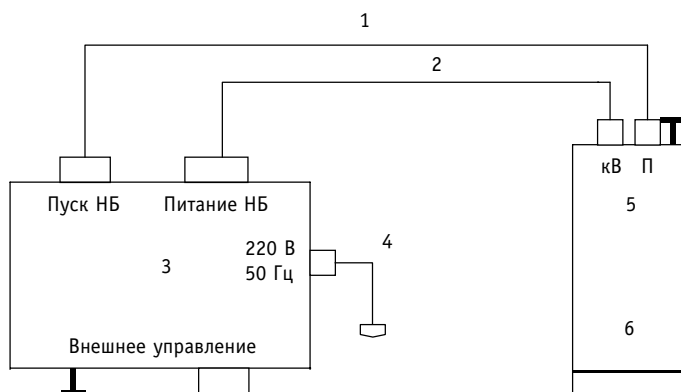


Рис. 1. Состав генератора и схема соединений: 1 – жгут подачи импульсов запуска, 2 – жгут подачи зарядного напряжения, 3 – устройство управления, 4 – сетевой кабель, 5 – излучатель нейтронов, 6- мишень

ми тяжелыми ядрами отдачи проведены на основе теории Линдзарда-Шарфа, которая широко используется в радиационной физике твердого тела.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлены данные по распределению мощности дозы нейтронов в воздухе в зависимости от расстояния «мишень-дозиметр» под углом, равным нулю градусов к направлению движения пучка дейтронов (по центру мишени). Из полученных данных видно, что с увеличением расстояния «мишень-дозиметр» существенным образом падает мощность дозы излучения. В масштабе  $\ln D = -k \ln R$  наблюдается линейная зависимость при расстояниях, превышающих диаметр мишени ( $d = 3-6$  см), а при  $R$  меньше этого значения линейная зависимость нарушается. Следует отметить, что по абсолютным значениям результаты экспериментальных исследований удов-

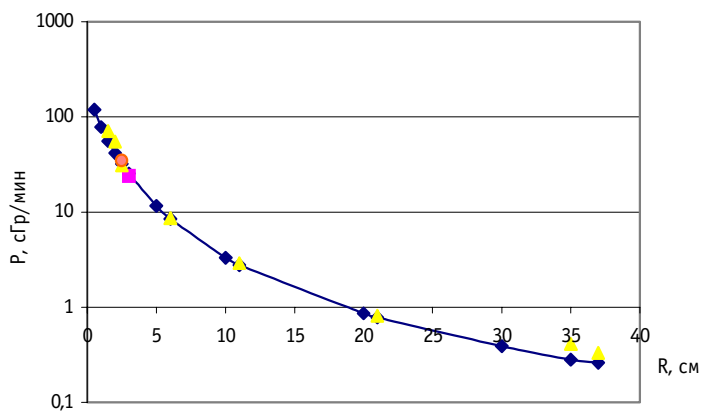


Рис. 2. Мощность дозы нейтронов в зависимости от расстояния «мишень- дозиметр»:  $\blacklozenge$  - расчет,  $\blacksquare$  - крем. дет.,  $\blacktriangle$  - ион. кам.,  $\bullet$  - FBX-дет.

летворительно согласуются с расчетными данными.

Из расчетных данных следует, что по направлению, перпендикулярному направлению движения пучка дейтронов, имеет место крутой спад интенсивности нейтронов с расстоянием от центра мишени. Этот спад существенно снижается по мере увеличения расстояния «мишень- дозиметр» ( $R$ ).

На рис. 3 представлены данные по глубинному распределению поглощенной дозы

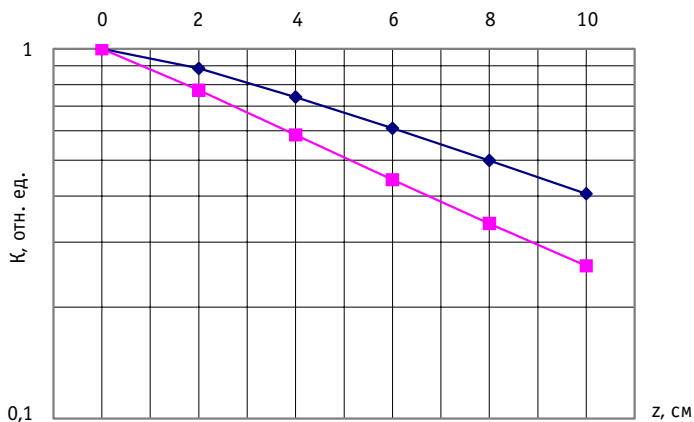


Рис. 3. Изменение керма (в отн. ед.) по глубине фантома для обеих моделей:  $\blacklozenge$  - для G1,  $\blacksquare$  - для G2

и керма при облучении нейтронами ИНГ-03 фантома из ПММА, расположенного на расстояниях от мишени 15 (модель 1) и 50 см (модель 2). Из представленных данных видно, что с увеличением  $R$  (модели 1 и 2) заметно увеличивается глубина расположения половинной дозы (от 5-6 см при  $R=15$  см до 7-8 см при  $R=50$  см). Полученные данные по внутрифантомным исследованиям удовлетворительно согласуются с данными, полученными Броерс и др. для нейтронов с энергией 14,5 МэВ [5]. С глубиной в фантоме изменяется не только поглощенная доза, но и действующий спектр, т.е. возрастает вклад в дозу рассеянных нейтронов.

Согласно данным работы [5] вклад тяжелых ядер отдачи в керма-фактор промежуточных и реакторных нейтронов составляет 5-10%, а для нейтронов с энергией 14,5 МэВ - 18-20%. Это обстоятельство позволяет использовать вышеуказанные нейтроны для изучения биологического действия тяжелых ядер отдачи, механизм которых в повреждении субклеточных структур обусловлен в значительной мере упругими смещениями атомов в макромолекулах. Нами проведены расчеты по спектрам тяжелых ядер отдачи (O, C, N) с учетом анизотропного рассеяния нейтронов с энергией 14 МэВ. На рис. 4 представлены эти данные, из которых следует, что спектр тяжелых ядер отдачи в ткани в значительной мере обогащен относительно низкоэнергетическими ядрами отдачи по сравнению с их вкладом в приближении изотропного рассеяния в системе центра масс. При облучении стандартной мягкой биологической ткани нейтронами с энергией 14,5 МэВ в ней образуется около десяти миллиардов смещенных атомов на 1 Гр тканевой кермы. На основании существенной разницы в пробегах протонов (миллиметры) и тяжелых ядер (доли микрометра) отдачи возможна постановка радиобиологических исследований с моноклеточными слоями дрожжей или других культур клеток с целью определения особенностей биологического действия тяжелых ядер отдачи, образованных в клетках под действием нейтронов разных энергий. Кроме того, имеется возможность исследования роли частоты импульсного воздействия нейтронов в конечном биологическом эффекте.

Из представленных данных можно сделать следующие выводы:

- портативный генератор нейтронов с энергией 14-14,7 МэВ серии ИНГ, в принципе, может быть удобным источником для терапии злокачественных новообразований, на базе которого возможно развитие нейтронной терапии практически в любом онкологическом центре;
- на современном этапе эти источники требуют доработки с целью увеличения и стабилизации выхода нейтронов;
- ИНГ вполне могут служить источниками тяжелых ядер отдачи для изучения осо-

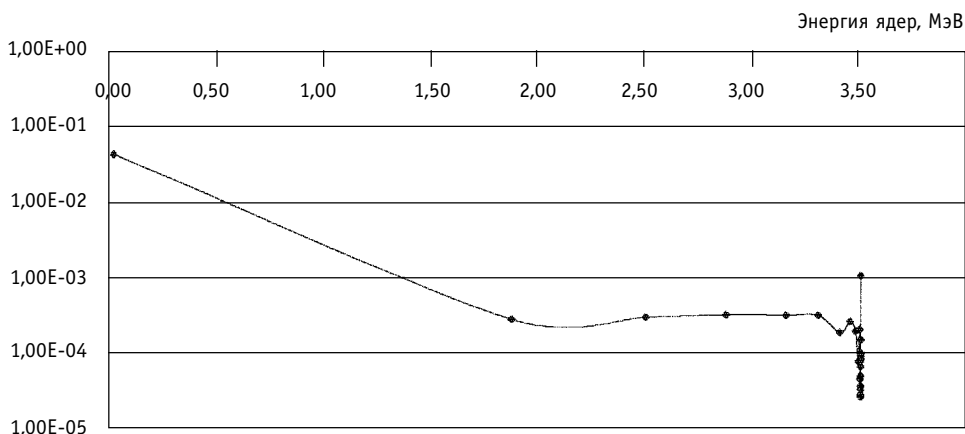


Рис. 4. Спектр тяжелых ядер отдачи от пучка нейтронов с энергией 14 МэВ

бенностей их биологического действия.

Авторы выражают благодарность руководству ВНИИА в лице Н.П. Боголюбова, В.И. Рыжкова за предоставленную возможность проведения экспериментальных исследований на установке ИНГ-03, О.Т. Грудзевичу, Ю.А. Кураченко, В.В. Коробейникову за консультативную помощь в постановке и проведении расчетно-теоретических исследований, а также В.А. Соколову и В.И. Потетне за помощь в проведении дозиметрических исследований.

### **Литература**

1. Гулидов И.А., Мардынский Ю.С., Цыб А.Ф., Сысов А.С. Нейтроны ядерных реакторов в лечении злокачественных новообразований. - Обнинск: МРНЦ РАМН, 2001. - 132 с.
2. Капчигашев С.П. Физико-дозиметрические исследования при использовании быстрых нейтронов реактора БР-10 в терапии злокачественных новообразований // Мед. радиология – 1992. - №9. – 10 - С.59-61.
3. Машкович В.П., Кудрявцева А.В. Защита от ионизирующих излучений. Справочник. - М.: Энергоатомиздат, 1995.
4. Caswell R.S., Coyne J.J. and Randolph V.L. Kerma Factors for Neutron Energies below 30 MeV // Radiation Research. – 1983. - P. 217-254.
5. Broerse J.J. et al. Dosimetry intercomparisons and protocols for therapeutic applications of fast neutron beams. In: High-LET Radiations in Clinical Radiotherapy, Suppl. Eur. J Cancer. - 1979. - P.117.

Поступила в редакцию 2.12.2002