

<https://vestnikmephi.elpub.ru>

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»



ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»

Том 14 № 2 2025 МАРТ – АПРЕЛЬ

Основан в июле 2012 г.

Выходит 6 раз в год

ISSN: 2304-487X

ПИ № ФС 77-41948

Главный редактор

Михаил Николаевич Стриханов, д. ф.-м. наук, профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Заместитель главного редактора

Николай Алексеевич Кудряшов, д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Выпускающий редактор

Наталья Вячеславовна Ермолаева, к.т.н., НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Ответственный секретарь

Михаил Александрович Чмыхов, к.ф.-м.н., доцент, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Редакционная коллегия:

Аксёнов Александр Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва (Россия)

Бедриковetsкий Павел – д.ф.-м.н., профессор, Университет Аделаиды, Аделаида, (Австралия)

Гаранин Сергей Григорьевич – чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор,

Институт лазерно-физических исследований РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров (Россия)

Евтихий Николай Николаевич – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Калашников Николай Павлович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Каргин Николай Иванович – д.т.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Кашенко Сергей Александрович – д.ф.-м.н., профессор,

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, г. Ярославль (Россия)

Лазаров Райчо – доктор наук, профессор математики, Техасский университет А&М,
г. Колледж-Стейшен (США)

Нагорнов Олег Викторович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Полянин Андрей Дмитриевич – д.ф.-м.н., профессор,

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва (Россия)

Цегельник Владимир Владимирович – д.ф.-м.н., профессор,

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск (Белорусь)

Четверушкин Борис Николаевич – член РАН, д.ф.-м.н., профессор, Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва (Россия)

Эфендиев Ялчин – д.ф.-м.н., профессор, Техасский университет А&М, г. Колледж-Стейшен (США)

Компьютерная верстка: Девятилова Светлана Константиновна

Учредитель и издатель: Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Адрес редакции: 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31, Вестник НИЯУ МИФИ

Сайт: <https://vestnikmephi.elpub.ru>

Электронная почта: vestnik@mephi.ru

**Москва
НИЯУ МИФИ**

СОДЕРЖАНИЕ

Том 14, № 2, 2025

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

Методика исследования выхода ГПД из твэлов

А. Л. Ижutow, М. С. Каплина, Н. К. Калинина, Н. Ю. Марихин, В. С. Моисеев, О. И. Дреганов 93

Описания межмолекулярных взаимодействий в димерах $(\text{CH}_4)_2$, CH_4Ne , Ne_2

Б. В. Руцкой 103

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Многомерные нелинейные уравнения Шредингера с потенциалом и дисперсией общего вида: точные решения и редукции

А. Д. Полянин, Н. А. Кудряшов 116

Численное моделирование раскрытия мембраны легкогазовой пушки

М. В. Никульшин, И. В. Минаев, И. В. Смирнова, Д. Т. Юсупов, А. И. Кленов 131

Приближенное решение параметрического уравнения пятой степени

К. Я. Кудрявцев 141

Математическое моделирование и стратегия использования остаточного ресурса расходомеров остановленных энергоблоков РБМК в процессе вывода АЭС из эксплуатации

А. М. Загребаев, Е. В. Евстюхина, А. С. Ястребов, М. Г. Андреев 149

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Алгоритм автоматического управления нейтронными параметрами и теплотехническим оборудованием реакторной установки со свинцовым теплоносителем в пусковых режимах

С. В. Епифанов, А. О. Толоконский 157

Система информационной поддержки для реакторных установок, выводимых из эксплуатации

Г. В. Колибас, А. О. Толоконский 163

ИННОВАЦИИ В ИНЖЕНЕРНОМ ОБРАЗОВАНИИ

Начальные этапы формирования системного мышления у школьников

Е. Г. Врублевская, С. В. Генисаретская, А. А. Соловьев 173

CONTENTS

Volume 14, Number 2, 2025

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL PHYSICS

A technique to investigate the fission gas release from fuel rods

A. L. Izhutov, M. C. Kaplina, N. K. Kalinina, N. Yu. Marikhin, V. S. Moiseev, O. I. Dreganov

93

Describing intermolecular interaction of $(\text{CH}_4)_2$, CH_4Ne , Ne_2 dimers

B. V. Rutskey

103

MATHEMATICAL MODELS AND NUMERICAL METHODS

Multidimensional nonlinear Schrödinger equations with potential and dispersion of the general form: exact solutions and reductions

A. D. Polyanin, N. A. Kudryashov

116

Numerical simulation of light-gas gun membrane opening

M. V. Nikulshin, I. V. Minaev, I. V. Smirnova, D. T. Yusupov, A. I. Klenov

131

Approximate solution of a parametric equation of the fifth degree

K. Ya. Kudryavtsev

141

Mathematical modeling and strategy for utilizing the remaining resource of flow meters in shutdown RBMK power units during the decommissioning of nuclear power plants

A. M. Zagrebaev, E. V. Evstyukhina, A. S. Yastrebov, M. G. Andreev

149

APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTER SCIENCE

Algorithm for automatic control of neutron parameters and nuclear power plant equipment of a nuclear power plant with lead coolant in start-up modes

S. V. Epifanov, A. O. Tolokonskiy

157

Information support system for reactor installations decommissioned

G. V. Kolibas, A. O. Tolokonskiy

163

INNOVATIONS IN ENGINEERING EDUCATION

Initial stages of formation of systems thinking among schoolchildren

E. G. Vrublevskaya, S. V. Genisaretskaya, A. A. Solovyov

173

УДК 621.039.553

Методика исследования выхода ГПД из твэлов

© 2025 г. А. Л. Ижугтов², М. С. Каплина^{1,2}, Н. К. Калинина², Н. Ю. Марихин², В. С. Моисеев², О. И. Дреганов²

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (Московский инженерно-физический институт), г. Димитровград, Ульяновская область, 433511, Россия

² АО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов», г. Димитровград, Ульяновская область, 433510, Россия

Высокопоточный исследовательский реактор СМ создан в 1961 г. Он относится к классу корпусных высокопоточных реакторов ловушечного типа с промежуточным спектром нейтронов, с охлаждением активной зоны водой под давлением, что позволяет получать высокие плотности потока тепловых нейтронов в замедляющей ловушке в центре активной зоны с жестким спектром нейтронов при максимальном сокращении объема активной зоны. Приоритетным направлением деятельности реактора СМ являются энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика. Развивающими данные направления критическими технологиями являются физика и техника высокопоточных исследовательских реакторов, технологии эксплуатации и ядерного топливного цикла исследовательских реакторов, безопасного обращения с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом. В экспериментальных ячейках и каналах реактора СМ проводятся работы по облучению образцов реакторных материалов в заданных условиях, изучению свойств различных материалов под облучением, получению широкого спектра радиоактивных нуклидов, а также исследования в области ядерной физики. Иногда, в обоснование надежности эксплуатации новых топливных компонентов, требуется определить долю выхода газовых продуктов деления, выходящих за пределы их защитных оболочек во время облучения. В работе представлен методический подход, используемый в АО «ГНЦ НИИАР» для получения данных об активности и нуклидном составе газовых продуктов деления при отборах проб газа непосредственно из герметичной полости с твэлами во время испытаний.

Ключевые слова: твэл, реактор СМ, термоэлектрический преобразователь (ТЭП), температура, сосуд Маринелли, газовые продукты деления (ГПД), реакторы IV поколения, нуклиды, изотопы.

1. Введение

Для промышленного внедрения новых ядерных энергетических установок (ЯЭУ) и топливных компонентов для них, в частности твэлов, необходимо подтверждать их герметичность в обоснование их безопасности и надежности эксплуатации. При эксплуатации ЯЭУ основными компонентами газообразных радиоактивных отходов (РАО) являются: инертные радиоактивные газы (Ar-41, изотопы Xe и Kr), радиоактивные аэрозоли и газообразный йод [1].

Применение радиометрических методов для непрерывного контроля газоаэрозольных выбросов ЯЭУ позволяет определять лишь интегральную активность газа, выбрасываемого в атмосферу. В условиях переменного нуклидного состава газоаэрозольных выбросов радиометрический метод не позволяет оценивать вклад отдельных радионуклидов в общую активность [2, 3]. Определение вклада отдельных

✉ М.С. Каплина: marabond21@mail.ru

Поступила в редакцию: 06.02.2025

После доработки: 14.03.2025

Принята к публикации: 08.04.2025

радионуклидов необходимо для оценки последствий выброса и отчетности перед контролирующими организациями. Радиоизотопный состав выброса может быть проанализирован с помощью полупроводниковых гамма-спектрометров [4].

Особенностью использования лабораторных спектрометров для контроля выбросов является то, что измерения проводятся не непосредственно на газовых магистралях, а путем отбора проб. Отбор газоаэрозольной пробы производится в течение длительного периода времени (как правило, одних суток). После этого проба (аэрозольный фильтр, газовая емкость, угольная колонка и т. д.) оператором снимается с линии пробоотбора и помещается на полупроводниковый детектор гамма-спектрометра для измерения. Гамма-спектрометрический анализ позволяет установить активность и нуклидный состав пробы, а также интегральные количественные характеристики газоаэрозольного выброса в целом [3].

Целью эксперимента является получение данных по радиационной стойкости оболочечных покрытий твэлов, подтверждающих принятые конструктивные и технологические решения, необходимые для обоснования работоспособности твэлов при эксплуатации. Для этого требуется провести реакторные испытания образцов твэлов с возможностью оперативного анализа радиоизотопного состава газовой среды, в которой размещены твэлы.

Для решения такой задачи в АО «ГНЦ НИИАР» подготовлена экспериментальная база, и разработан методический подход к определению количества вышедших продуктов деления из топливных компонентов с твэлами и анализу полученных данных для уточнения и оптимизации целевых характеристик топлива при обосновании его эффективности и безопасности использования в реакторах IV поколения путем проведения внутриреакторных испытаний с возможностью оперативного анализа газовой среды, из герметичной полости с твэлами, во время испытаний с помощью полупроводниковых гамма-спектрометров.

2. Технические средства и оборудование

2.1. Облучательное устройство

Облучение образцов топлива производят в составе экспериментальных облучательных устройств (ОУ), обеспечивающих условия испытаний (температуру, плотность нейтронного потока, мощность топлива, и т.д.) в экспериментальных ячейках реактора СМ [5], требуемые для анализа работоспособности топлива. Параметры испытаний во время эксперимента контролируются.

В каждую экспериментальную ячейку устанавливается одно облучательное устройство с образцами твэлов. На рис. 1 представлено поперечное сечение модернизированного реактора СМ с расположением экспериментальных каналов и их номерами.

Для проведения в реакторе СМ высокотемпературных реакторных испытаний твэлов в инертном газе (гелий, неон) при требуемой температуре (до 1800 °С) после проведения предтестовых нейтронно-физических [6, 7], теплогидравлических¹ [8, 9] и прочностных расчетов², подтверждающих выбранную конструкцию, изготавливается экспериментальное облучательное устройство. Для подтверждения герметичности защитных слоев топливных компонентов конструкция ОУ обеспечивает возможность отбора газовых проб из полости с твэлами во время испытаний. Для обеспечения безопасности во время проведения эксперимента, а также для обеспечения возможности контроля температуры облучения топливных компонентов вакуумированием или заменой газа в полости между корпусами, ОУ изготавливается двухкорпусным: перед проведением реакторных испытаний твэлы устанавливаются в специальную капсулу, к которой с обеих сторон привариваются трубки для продувки полости капсулы инертным газом, а каждая капсула помещена в отдельную ампулу из коррозионностойкой стали. Полости ампул и капсул между собой не сообщаются. Ампулы крепятся к подвеске, имеющей фланец для герметизации облучательного устройства на крышке реактора (рис. 2). Полость подвески изолирована от полостей ампул и капсул облучательного устройства, все полости ОУ имеют газовые трубки для

¹ 3D CAD Design Software| SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.solidworks.com/> (дата обращения: 20.05.2023).

² Нормы расчета на прочность оборудования и трубопроводов атомных энергетических установок. ПиН АЭ Г-7-002-86.

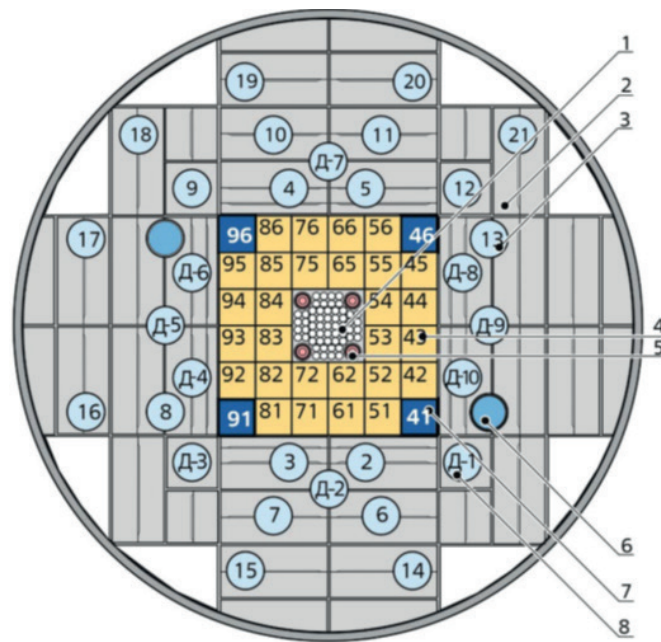


Рис. 1. Поперечное сечение модернизированного реактора СМ: 1 – центральная замедляющая полость; 2 – бериллиевый блок отражателя; 3, 4 – ячейка отражателя и активной зоны с указанием номера соответственно; 5 – рабочий орган аварийной защиты и компенсации реактивности; 6 – рабочий орган автоматического регулирования; 7 – рабочий орган компенсации реактивности; 8 – экспериментальная ячейка

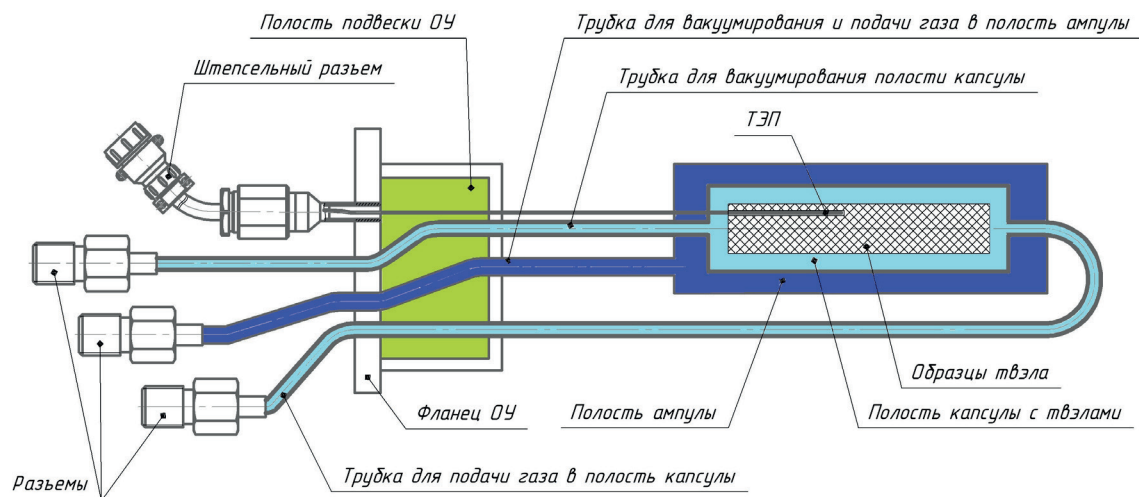


Рис. 2. Схема облучательного устройства

подключения к газовакуумному стенду. Снаружи ОУ, на уровне активной зоны, в ячейке отражателя устанавливается экран из гафниевого проволоки, предназначенный для формирования потока нейтронов, обеспечивающего условия облучения твэлов.

2.2. Стенд ГВС 2 СМ

Для контроля среды в полостях ампул, капсул и подвески ОУ используется газовакуумный стенд ГВС 2 СМ. Стенд размещен в центральном зале и представляет собой шкаф, в который вмонтирова-

ны сильфонные вентили и датчики давления МИДА. Внутри шкафа также размещены три газовых коллектора, каждый из которых имеет ответвление в виде газовых линий с отсечными вентилями и датчиками МИДА. На внешней панели находятся цифровые индикаторы для визуального контроля давления. Датчики МИДА осуществляют контроль давления в соответствующих газовых линиях.

ГВС 2 СМ подсоединен к вакуумному посту для вакуумирования и подачи газа в полости ампул и капсул ОУ через резьбовой разъем трубой $\varnothing 16 \times 2$ мм. Вакуумирование осуществляется через два коллектора, на которых расположены вентили. Контроль давления осуществляется мановакуумметром типа МВТ (МВ1). Подача газа ведется через коллектор, на котором находятся вентили.

Сигнальные линии от датчиков МИДА объединены в общую шину на задней панели стенда и выведены в помещение через приямок.

Варьируя давление среды, можно регулировать теплопроводность газа в полостях ампул ОУ и тем самым корректировать температуру образцов. Полости капсул для регулировки температуры не используются, так как из этих полостей планируется отбор проб газа.

Для осуществления визуализации информации о режиме испытаний применяется автоматизированная система научных исследований АСНИ СМ, представляющая собой электронно-вычислительную машину с подключенными к ней вторичными преобразователями для ТЭП и датчиков давления МИДА. Визуализация информации о режиме испытаний представляется в виде графиков зависимости от времени с периодом обновления один раз в секунду. Она регистрируется на диске, частота записи – один раз в минуту, при необходимости она может увеличиваться до 1 Гц.

3. Методика исследования выхода ГПД из твэлов

Методический подход к исследованию выхода ГПД из твэлов заключается в периодическом отборе проб газа из полости капсулы с твэлами и сравнении качественного и количественного состава газа из пробы с расчетными значениями образовавшихся продуктов деления топлива в результате облучения. Отбор проб осуществляется раз в месяц, в период останова реактора. На рис. 3 приведена принципиальная схема подключения капсул облучательного устройства к газовакуумному стенду ГВС 2 СМ и участку отбора проб.

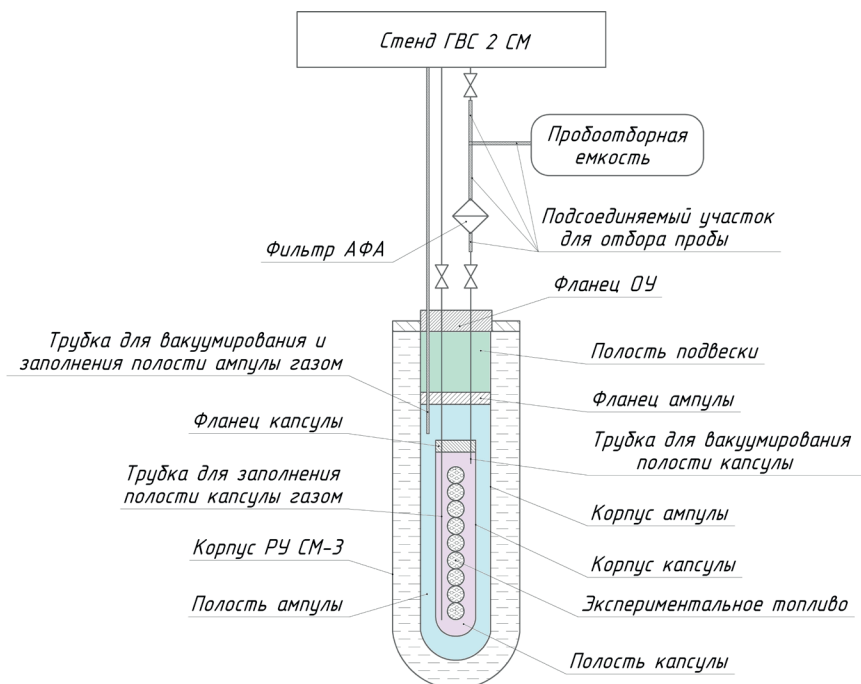


Рис. 3. Принципиальная схема подключения капсул облучательного устройства к ГВС 2 СМ и участку отбора проб

Продукты деления, вышедшие за пределы топливных компонентов, аккумулируются, в основном, в капсуле. К линии для вакуумирования полости капсулы подсоединяется участок линии, содержащий аналитический фильтр аэрозольный (АФА) и пробоотборную емкость (сосуд Маринелли), которая перед отбором проб вакуумируется. Зная все объемы, начальное и конечное давление в системе, можно определить количество газа, поступившего из полости капсулы через фильтр в пробоотборную емкость. Пробоотборная емкость и фильтр передаются для проведения анализа на гамма-спектрометр, измерения выполняются по аттестованной методике:

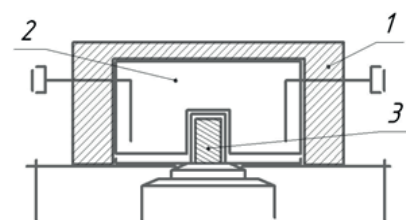


Рис. 4. Геометрия измерения с пробоотборной емкостью: 1 – свинцовая защита; 2 – пробоотборная емкость – сосуд Маринелли; 3 – детектор спектрометра из особо чистого германия

1. Используя объемный гранулированный источник гамма-излучения типа ОИСН (объемные источники специального назначения) на основе $^{241}\text{Am} + ^{60}\text{Co} + ^{137}\text{Cs} + ^{133}\text{Ba}$ (расширенная неопределенность аттестованных характеристик не более 11 %), измеряют градуировочную характеристику (далее по тексту – ГХ) зависимости эффективности регистрации гамма-излучения от его энергии для используемых спектрометра и геометрии измерений (сосуд Маринелли);

2. Отбирают в пробоотборную емкость представительную пробу газа;

3. Помещают сосуд Маринелли в свинцовую защиту (рис. 4) и при помощи спектрометра в установленном энергетическом диапазоне измеряют скорость счета для дискретных энергий гамма-излучения пробы газа. Измерения проводят в геометрии, в которой проведена градуировка спектрометра по п. 1;

4. Идентификацию и расчет активности радионуклидов, находящихся в пробоотборной емкости, проводят с помощью специального программного обеспечения, прилагаемого к анализатору SBS. Для этого используют: измеренные по п. 3 скорости счета в пиках полного поглощения, определенную ГХ спектрометра и значение объема пробы газа, полученное по п. 2;

5. Используя результаты, полученные по п. 4, рассчитывают суммарную объемную активность гамма-излучающих ПД, находящихся в пробоотборной емкости.

По результатам анализа измерений определяется качественный и абсолютный количественный состав ГПД в пробе, а также летучих ПД, осевших на фильтре (за исключением доли аэрозолей, осевших на поверхностях трубок).

Расчетная активность продуктов деления, образованных в топливе в результате облучения, определяется с учетом реальной загрузки топлива в активной зоне реактора. Рассчитываются все образовавшиеся изотопы и их естественный распад, учитывая образование нуклидов в процессе радиоактивного распада ядер-предшественников в цепочках радиоактивного распада [10]. На рис. 5 приведен график

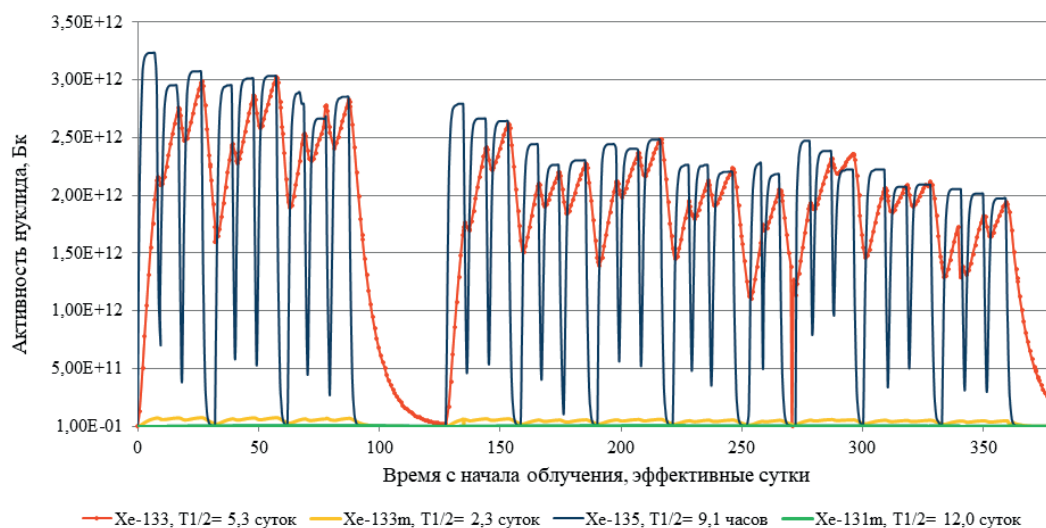


Рис. 5. Пример результата определения расчетной активности образовавшихся нуклидов ксенона в образцах твэлов во время облучения

образования нуклидов ксенона в топливных компонентах, размещенных в капсулах, обнаруженных в газовых пробах.

Доля вышедших продуктов деления (X_1) по результатам измерения первой пробы рассчитывается по формуле

$$X_1 = \frac{a}{A}, \quad (1)$$

где a , A – измеренная и расчетная активность продуктов деления первой пробы соответственно, Бк.

Так как анализ проб на остановленном реакторе позволяет учитывать точное количество отобранных продуктов деления при каждом отборе пробы, доля вышедших продуктов деления по результатам измерения второй пробы (X_2) определяется по формуле

$$X_2 = \frac{b}{(B + a \times X_1)}, \quad (2)$$

где b , B – измеренная и расчетная активность продуктов деления второй пробы соответственно, Бк; a^* – активность измеренных в первой пробе продуктов деления с учетом распада к моменту измерения второй пробы. Аналогично доле X_2 рассчитывается доля выхода продуктов деления по результатам всех последующих проб.

Собранные и обработанные за все время облучения экспериментальные данные позволяют проанализировать динамику выхода продуктов деления и отметить момент начала разгерметизации твэлов в случае резкого увеличения (на несколько порядков) доли выхода ГПД.

На данный момент методика отработана, получены результаты по выходу продуктов деления из твэлов в зависимости от продолжительности облучения. На рис. 6 и 7 показаны пример результата определения качественного и количественного состава газа в пробах и пример результата определения доли выхода нуклидов ксенона из экспериментальных твэлов.

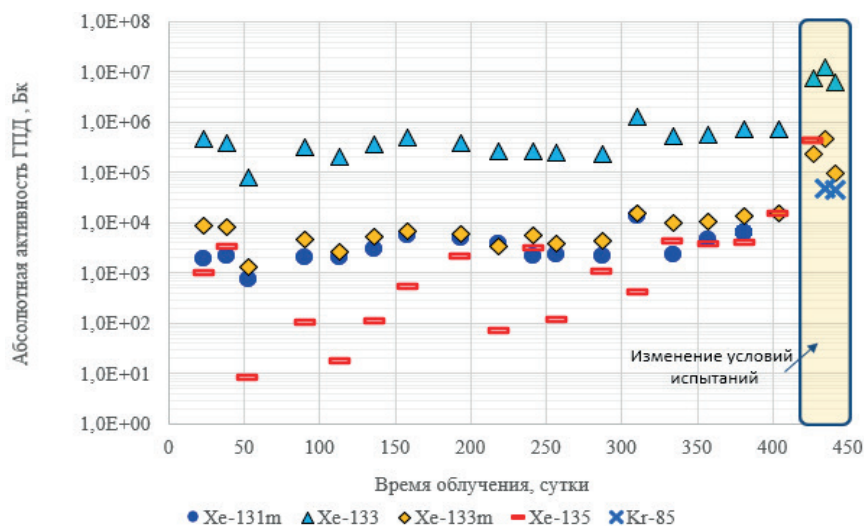


Рис. 6. Пример результата определения абсолютной активности нуклидов ксенона и криптона в пробах

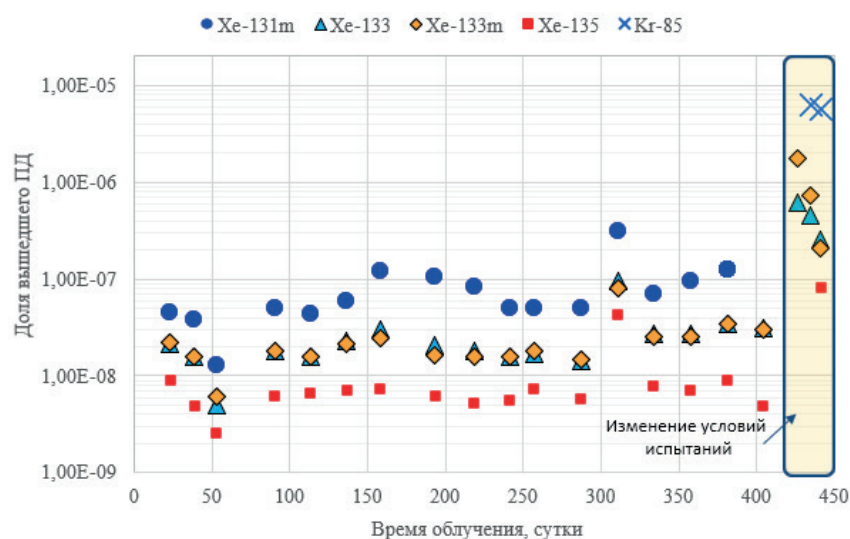


Рис. 7. Пример результата определения доли вышедших нуклидов ксенона и криптона в процессе облучения образцов твэлов

Выводы

Разработанная методика исследования выхода ГПД из тепловыделяющих элементов в процессе их облучения в реакторе направлена на подтверждение герметичности и безопасности новых топливных компонентов, используемых как во вновь разрабатываемых ядерных энергетических установках, включая реакторы IV поколения, так и в модернизированных топливных компонентах уже эксплуатируемых реакторных установок. Данные исследования проводятся на высокопоточном исследовательском реакторе СМ, позволяющем моделировать требуемые условия эксплуатации топливных компонентов. Для исследований разработаны специальные облучательные устройства со встроенными ТЭП и датчиками давления МИДА, конструкция обеспечивает возможность осуществлять отбор проб газа из герметичной полости с топливом.

Методика исследования включает периодический отбор проб газа из полости капсулы с твэлами на остановленном реакторе. Анализ проб осуществляется с применением полупроводниковых гамма-спектрометров, что позволяет достоверно определить качественный и количественный состав ГПД. На основе сравнения измеренной активности с расчетной осуществляется расчет доли вышедших ГПД из твэлов. Полученные данные о динамике выхода ГПД в зависимости от продолжительности облучения позволяют выявить момент разгерметизации твэлов по резкому увеличению доли вышедших ГПД. Результаты исследований подтверждены послереакторными материаловедческими исследованиями, что свидетельствует о высокой точности и надежности предложенной методики.

Данная методика может применяться для обоснования безопасности и эффективности эксплуатации различных видов ядерного топлива, включая топливо для реакторов IV поколения.

Таким образом, разработанная методика имеет важное практическое значение для ядерной энергетики, в частности, для разработки и внедрения новых топливных технологий, соответствующих высоким стандартам безопасности и эффективности.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Ижutow А.Л. – научный руководитель эксперимента, постановка эксперимента, участие в обсуждении результатов;

Каплина М.С. – выполнение экспериментальных работ, контроль параметров облучения топлива, обработка результатов, проведение теплофизических расчетов, проведение расчетов по количеству вышедших продуктов деления, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, участие в проведении исследования и обсуждении результатов, подбор литературных источников, подготовка и редактирование текста статьи;

Калинина Н.К. – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, анализ нормативной базы, разработка методик измерения, постановка эксперимента, контроль параметров облучения топлива, редактирование текста статьи, научный руководитель эксперимента;

Марихин Н.Ю. – проведение нейтронно-физических расчетов;

Моисеев В.С. – участие в проведении исследования и обсуждении результатов;

Дреганов О.И. – участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. *Панов Е.А.* Практическая гамма-спектрометрия на атомных станциях. М.: Энергоатомиздат, 1990. 75 с.
2. *Фертман Д.Е., Ризин А.И., Стась К.Н.* Повышение достоверности измерений в радиометрии аэрозолей // Измерительная техника, 1996. № 12. С. 23–30.
3. *Гаврилов П.М., Кохомский А.Г., Измestьев К.М., Сеелев И.Н., Силаев М.Е.* Гамма-спектрометрический метод контроля активности и нуклидного состава газообразных радиоактивных отходов, образующихся при эксплуатации ядерно-энергетических установок // Известия Томского политехнического университета, 2007. Т. 311. № 2. С. 66–69.
4. *Гилларович Э.Л., Грязнов А.Н., Инихов А.Г., Костылева Ю.Г., Мысев И.П., Николаев А.М.* Современная практика обеспечения качества измерений ионизирующих излучений. Ядерные измерительно-информационные технологии. М.: НИЦ «СНИИП», 1997. 35 с.
5. *Ханбиков Р.З., Митрофанов И.В., Малков А.П., Пайдулов А.В.* Характеристики активной зоны и обеспечение требований ядерной безопасности при эксплуатации реактора СМ после модернизации // Научный годовой отчет АО «ГНЦ НИИАР» (отчет об основных исследовательских работах, выполненных в 2021 г.) / Под общ. ред. Калыгина В.В. Димитровград: АО «ГНЦ НИИАР», 2022. 86 с.
6. *Марихин Н.Ю.* Комплекс программных средств на базе прецизионного кода для расчетов нейтронно-физических параметров эксплуатации реактора СМ. Дисс. канд. физ.-мат. наук... Димитровград, 2011. 135 с.
7. *Гомин Е.А.* Статус МСУ-4 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2006. Вып. 1. С. 6–32.
8. *Чиркин В.С.* Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968. 484 с.
9. *Каплина М.С., Калинина Н.К., Ильиных Г.А. и др.* Теплофизический расчет облучательного устройства для облучения топливных компонентов в реакторе СМ-3 // Сб. докладов XXII Международной конференции молодых специалистов по ядерным энергетическим установкам 13–14 апреля 2022 г., Подольск. Подольск: АО ОКБ «ГИДРОПРЕСС», 2022. С. 256–263.
10. Схемы распада радионуклидов. Энергия и интенсивность излучения // Публикация 38 МКРЗ. В 2-х ч. В 2-х кн.; пер. с англ. / Под ред. А.А. Моисеева. М.: Энергоатомиздат, 1987.

A technique to investigate the fission gas release from fuel rods

A. L. Izhutov², M. C. Kaplina^{1,2,✉}, N. K. Kalinina², N. Yu. Marikhin², V. S. Moiseev², O. I. Dreganov²

¹ National Research Nuclear University «MEPhI» (Moscow Engineering and Physics Institute, Dimitrovgrad, Ulyanovsk region, 433511, Russia

² Research Institute of Nuclear Reactors State Scientific Centre, Joint-Stock Company (RIAR JSC), Dimitrovgrad Ulyanovsk region, 433510, Russia

✉ marabond21@mail.ru

Received February 6, 2025; revised March 14, 2025; accepted April 8, 2025

High-flux research reactor SM was constructed in 1961. This is a vessel-type high-flux reactor with a trap and pressurized water cooling. The reactor design allows achieving high flux of thermal neutrons in the moderating trap located in the core centre with the hard neutron spectrum, the core volume being as small as possible. The priority applications of the SM reactor are energy efficiency, power optimization and nuclear power engineering. The critical technologies that promote these applications are physics and engineering of high-flux research reactors, research reactors operation practice and nuclear fuel cycle, safe management of radioactive waste and spent nuclear fuel. The SM experimental cells and channels are used to irradiate samples of reactor materials under the specified conditions, to investigate into the properties of different materials under irradiation, to produce a wide range of radionuclides and make research into nuclear physics. To justify the safe and reliable operation of new fuels, the amount of irradiation-induced fission gas release out of the containment should be measured. The paper presents RIAR's methodological approach to obtaining data on the activity and nuclide composition of fission gas when sampling from the sealed region with fuel rods during irradiation.

Key words: fuel rod, reactor SM, thermocouple, temperature, Marinelly vessel, fission gas, Gen IV reactors, nuclides, isotopes.

References

1. Panov E.A. Prakticheskaya gamma-spektrometriya na atomnyh stanciyah [Practical gamma-spectrometry at nuclear power plants]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1990. 75 p. (in Russian).
2. Fertman D.E., Rizin A.I., Stas K.N. Povyshenie dostovernosti izmerenij v radiometrii aerolej [Increasing the reliability of measurements in aerosol radiometry]. Izmeritel'naya tekhnika, 1996. No. 12. Pp. 23–30 (in Russian).
3. Gavrilov P.M., Kokhomsky A.G., Izmetiev K.M., Seelev I.N., Silaev M.E. Gamma-spektrometricheskij metod kontrolya aktivnosti i nuklidnogo sostava gazoobraznyh radioaktivnyh othodov, obrazuyushchih pri ekspluatcii yadernno-energeticheskikh ustanovok [Gamma-spectrometric method for monitoring the activity and nuclide composition of gaseous radioactive waste generated during the operation of nuclear power plants]. Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta, 2007. Vol. 311. No. 2. Pp. 66–69 (in Russian).
4. Gilyarovich E.L., Gryaznov A.N., Inikhov A.G., Kostyleva Yu.G., Mysev I.P., Nikolaev A.M. Sovremennaya praktika obespecheniya kachestva izmerenij ioniziruyushchih izluchenij. Yadernye izmeritel'no-informacionnye tekhnologii [Modern practice of ensuring the quality of ionizing radiation measurements. Nuclear measurement and information technologies]. Moscow, NIC «SNIIP» Publ., 1997. 35 p. (in Russian).
5. Khanbikov R.Z., Mitrofanov I.V., Malkov A.P., Paidulov A.V. Harakteristiki aktivnoj zony i obespechenie trebovanij yadernoj bezopasnosti pri ekspluatcii reaktora SM posle modernizacii / Nauchnyj godovoj otchet AO «GNC NIIAR» (otchet ob osnovnyh issledovatel'skikh rabotah, vypolnennyh v 2021 g.) / pod obshchej red. d-ra tekhn. nauk, prof. V.V. Kalygina. [Characteristics of the core and ensuring nuclear safety requirements to the SM reactor operation after refurbishment / RIAR JSC Scientific Annual Report (Report on the Research Work Performed in 2021) / edited by Prof. V.V. Kalygin]. Dimitrovgrad, RIAR JSC Publ., 2022. 86 p. (in Russian).

6. *Marikhin N.Yu.* Kompleks programmnyh sredstv na baze precizionnogo koda dlya raschyotov nejtronno-fizicheskikh parametrov ekspluatatsii reaktora SM. Diss. kandidata fiz.-mat. nauk [Software based on precision code for calculating neutronic parameters of the SM reactor operation. PhD Diss.]. Dimitrovgrad, 2011. 135 p. (in Russian).
7. *Gomin E.A.* Status MCU-4 [Status of MCU-4]. Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Seriya «Fizika yadernyh reaktorov», 2006. Iss. 1. Pp. 6–32 (in Russian).
8. *Chirkin V.S.* Teplofizicheskie svoystva materialov yadernoj tekhniki [Thermophysical properties of materials of nuclear engineering]. Moscow, ATOMIZDAT Publ., 1968. 484 p. (in Russian).
9. *Kaplina M.S., Kalinina N.K., Ilyinykh G.A., et al.* [Thermophysical calculation of the irradiation device for irradiating fuel components in the SM-3 reactor]. Sbornik dokladov XXII Mezhdunarodnoj konferencii molodyh specialistov po yadernym energeticheskim ustanovkam, 13–14 aprelya 2022 g., Podol'sk. [Proc. of the XXII International Conference of Young Specialists on Nuclear Power Plants April 13–14, 2022, Podolsk]. Podolsk, AO OKB «GIDROPRESS» Publ., 2022. Pp. 256–263 (in Russian).
10. Skhemy raspada radionuklidov. Energiya i intensivnost' izlucheniya: publikaciya 38 MKRZ: V 2 ch. V 2 kn. Per. s angl. / pod red. A. A. Moiseeva. [Decay patterns of radionuclides. Energy and radiation intensity: Publication 38 ICRP: 2 Parts. 2 books: Trans. from English / edited by A.A. Moiseev]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1987. (in Russian).

УДК 541.1

Описания межмолекулярных взаимодействий в димерах $(\text{CH}_4)_2$, CH_4Ne , Ne_2 © 2025 г. Б. В. Руцкой^{1,2}¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Проведено сравнительное неэмпирическое исследование межмолекулярных взаимодействий в димерах метан–метан, неон–неон, метан–неон, определенных методом связанных кластеров с учетом одно- и двукратных возбуждений и неитерационной поправки на трехкратные возбуждения (CCSD(T)) с базисными наборами Даннинга, дополненными связевыми функциями, а также явно коррелированным вариантом связанных кластеров (F12-CCSD(T)). Показано, что усредненная сферически парная электронная плотность, построенная методом связанных кластеров, в случае димера метана имеет минимум, находящийся в его геометрическом центре, только когда используется набор связевых функций, локализованных в этой области. Такой результат обосновывает учет межмолекулярной электронной корреляции для базисных наборов волновых функций, дополненных связевыми функциями. Анализ построенных сечений поверхности потенциальной энергии (ППЭ) позволил провести калибровку набора связевых функций, а также уточнить энергию взаимодействия в димере неона.

Ключевые слова: явно коррелированные методы, электронная корреляция, ван-дер-ваальсово взаимодействие, связевые функции, димер метана, димер неона, матрица плотности, связанные кластеры.

Введение

Межмолекулярные взаимодействия играют важную роль в различных областях науки и техники. Это лежит в основе направлений любого уровня значимости, в том числе и высокотехнологичных. Генная инженерия [1–18], биотехнология и разработка лекарств [19–21] – примеры подобных исследований. Они касаются энергетических характеристик больших систем, к которым относятся и такие соединения, как пептиды [10].

Возможность описания межмолекулярных взаимодействий в случае сложных молекул, включая глобулы белков и участки ДНК, путем непосредственного применения для них неэмпирических методов квантовой химии в настоящее время ограничено техническими возможностями из-за высоких требований к расчетным мощностям, поэтому такие исследования сфокусированы на прецизионных расчетах ван-дер-ваальсовых связей между активными центрами, а также другими функциональными группами, которые представляют собой димеры, число атомов которых не превышает несколько десятков. Проблема, однако, заключается в том, что оценка дисперсионных энергетических параметров с погрешностью, не превышающей 1 %, даже для таких маленьких молекул – нетривиальная задача. Основная трудность заключается в точном учете межмолекулярной электронной корреляции, которая является основной причиной возникновения взаимодействий в слабосвязанных комплексах. Как результат, для исследования сечений ППЭ димеров применяются высокоточные квантово-химические методы совместно с базисным набором Попла или Даннинга. Насыщение базисного набора для димера метана

✉ Б.В. Руцкой: Bogdan.Rutskey@itep.ru,
nrcki@nrcki.ru

Поступила в редакцию: 07.11.2024

После доработки: 25.03.2025

Принята к публикации: 25.03.2025

EDN CASOLJ

достигается с использованием метода связанных кластеров с учетом одно- и двукратных возбуждений и неитерационной поправки на трехкратные возбуждения (CCSD(T)) на уровне aug-cc-pVQZ, что обеспечивает значение энергии в 0.51 ккал/моль при экстраполяции к бесконечному базисному набору (CBS) [22]. В случае димера неона эта величина соответствует 0.70 ккал/моль в базисе aug-cc-pV5Z [23].

Главная сложность в построении сечения ППЭ вызвана относительно малыми энергиями взаимодействия и касается сходимости с точки зрения уровня приближения задействованной квантовохимической стратегии и размеров базиса. Одним из зарекомендовавших себя способов решения проблемы медленной сходимости корреляционных наблюдаемых по размеру базисов в случае изучения химически релевантных систем является подход связевых функций [24–28]. В этом случае дополнительный фиктивный атомный центр со специально разработанным набором диффузных атомных функций помещается между молекулярными фрагментами для улучшения описания узловой структуры волновой функции, а также поведения корреляционных вкладов в наблюдаемые, в том числе в энергии. Иллюстрируя эффективность этого метода, насыщение по базису в отношении результатов энергии достигается уже на уровне cc-pVDZ в случае димера метана, если задействованы связевые функции [33221] [26, 27]. Удастся осуществить аналогичную процедуру и для димера неона на уровне aug-cc-pV5Z и оценить значение энергии в 0.78 ккал/моль [23]. Представленный эффект наиболее подробно изучался в контексте димера гелия, для которого доступен анализ корреляционных эффектов дисперсионной составляющей двухчастичной волновой функции [25, 26]. Универсальным инструментом для анализа межмолекулярной электронной корреляции, обеспечивающей использование набора связевых функций, является двухчастичная матрица плотности и связанная с ней парная электронная плотность, которая после усреднения по спине помогает получить необходимую информацию обо всех корреляционных эффектах [29].

Использование явно коррелированного варианта метода связанных кластеров (F12-CCSD(T)) [30] также с высокой степенью точности позволяет описывать поведение ван-дер-ваальсовых систем, оставаясь конкурентом в эффективности и точности по отношению к методу CCSD(T) со связевыми функциями. Сравнение результатов двух подходов, а также калибровка этих функций необходимы для высокоточной оценки энергетических свойств димеров (CH_4)₂, CH_4Ne , Ne_2 . Применение набора связевых функций [24] ко всем системам без исключения может также нуждаться в коррекции.

В настоящей работе сделан анализ межмолекулярной электронной корреляции [31], и осуществлена оценка роли связевых функций для определения энергии взаимодействия между фрагментами в димере метана, для этого исследуется усредненная сферически парная электронная плотность. На втором этапе работы проведено варьирование набора связевых функций и сравнение метода CCSD(T) и явно коррелированного подхода F12-CCSD(T).

Построение двухчастичной матрицы плотности

Описание межмолекулярных взаимодействий имеет важное практическое значение, если оно получено с высокой степенью точности, для чего требуется использование прецизионного квантово-химического метода. Анализ парной электронной плотности позволяет исследовать корреляционные эффекты, лежащие в основе дисперсионных и индукционных взаимодействий, характерных для слабосвязанных систем, включая ван-дер-ваальсовы комплексы.

Среди методов одномерного модельного пространства, описывающих межмолекулярную электронную корреляцию для такого рода объектов, лучше всего подходит метод связанных кластеров, поскольку наилучшим образом обеспечивает хорошее соотношение цена/производительность. Он зарекомендовал себя для построения сечений ППЭ в случае димеров метана и неона в сочетании с базисными наборами Даннинга cc-pVNZ и aug-cc-pVNZ ($N = D, T, Q$). Насыщение базисного набора со связевыми функциями, центрированными на связи $X - X$ ($X = \text{C}, \text{Ne}$), достигается уже на уровне cc-pVDZ, а без них – только для базиса cc-pVQZ [27] и cc-pV6Z [23] в случае (CH_4)₂ и Ne_2 соответственно.

Метод CCSD применялся в настоящей работе для построения редуцированной двухчастичной матрицы плотности (2-RDM) в базисе молекулярных орбиталей (МО), в качестве модельного объекта был выбран димер метана. Классическая техника построения матрицы плотности [32–35], которая

подробно описана в предыдущей работе [28], предполагает решение методом множителей Лагранжа уравнения теории отклика первого порядка [32–34, 36–43]:

$$\langle \Phi_0 | (1 + \Lambda) \exp(-T) H \exp(T) - E | \Phi_I \rangle = 0 \quad [37],$$

где I означает порядок возбуждения, которое отвечает переходу из основного состояния физического вакуума $|\Phi_0\rangle$ в возмущенное $|\Phi_I\rangle$; коэффициенты Лагранжа λ_I являются кластерными лямбда-амплитудами [38, 39] с соответствующим значением I .

На заключительном этапе осуществлены необходимые преобразования редуцированной матрицы плотности, которые позволили использовать ее в качестве аналитической функции от координат первого и второго электронов. Вначале 2-RDM была представлена в атомном базисе (АО), а затем переведена в координатное представление. Из этой функции была исключена матрица плотности 2-RDM, построенная методом Хартри–Фока, что в итоге позволило получить корреляционный вклад, диагональная часть которого имеет обозначение «парная электронная плотность» и применялась для поиска и изучения наиболее коррелированных областей. Она в последствии была сферически усреднена [44, 45] относительно положения первого электрона, и, наконец, для нее построена производная в этой точке. Полученная функция, названная усредненной сферически парной электронной плотностью, совместно с исходной парной электронной плотностью используется для сравнительного анализа. Пропорциональность между ними обеспечивает выполнение условия каспа для редуцированной матрицы плотности в исследуемой области пространства [31], где под термином касп подразумевается точка коалесценции электронов.

Численные методы

Для построения усредненной сферически парной электронной плотности методом CCSD [32] была реализована программа на языке программирования C++. Парадигма объектно-ориентированного программирования, применяемая в этой программе, позволила разделить решение задачи на несколько этапов. Амплитуды t_1 , t_2 построены методом CCSD, лямбда-амплитуды λ_1 , λ_2 получены путем решения системы линейных уравнений [32], молекулярные орбитали, необходимые для преобразования в АО представление, были рассчитаны методом Хартри–Фока. Амплитуды t_1 , t_2 , молекулярные интегралы и матрица молекулярных орбиталей построены с помощью программного пакета МОЛПРО (MOLPRO) [46].

Система уравнений для нахождения лямбда-амплитуд λ_1 , λ_2 [31] решена методом GMRES с предположением [47, 48], DIIS использовался для ускорения сходимости [49, 50]. Основным недостатком метода GMRES, заключающийся в его медленной сходимости, устранен предположением Якоби [51] и применением DIIS [49, 50] для каждой внешней итерации GMRES [47, 48].

Матрица молекулярных интегралов хранилась как симметричный массив, а матрицы кластерных амплитуд t_1 и t_2 – как разреженный.

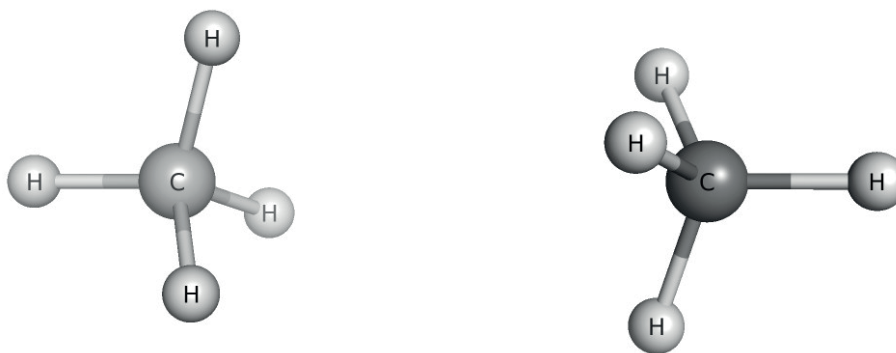
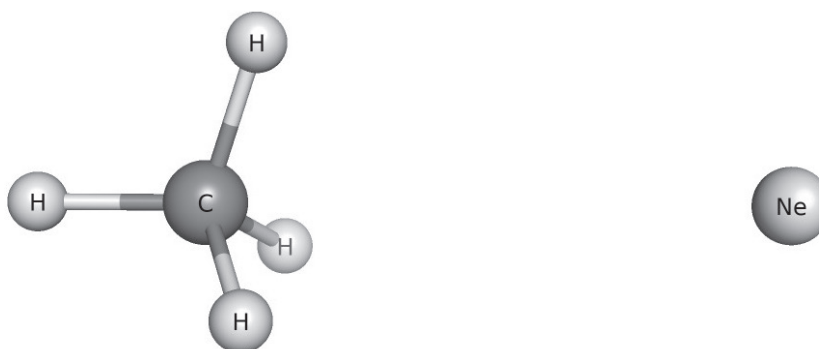
Усредненная сферически парная электронная плотность построена путем интегрирования по сфере Лебедева [44, 45].

Детали неэмпирического моделирования

Объектами исследования были димер метана $(CH_4)_2$ (рис. 1а), смешанный димер метан–неон $(CH_4 - Ne)$ (рис. 1б), для которых взаимное расположение мономеров отвечает симметрии D3d [27] и C3v соответственно, а также димер неона Ne_2 . Усредненная сферически парная электронная плотность для $(CH_4)_2$ построена методом CCSD в базисных наборах cc-pVDZ, cc-pVTZ, cc-pVDZ + bf[33221] [26].

Построение сечений ППЭ проводилось согласно схемам, хорошо зарекомендовавшим себя и подробно описанным в литературе. Сечения строились вдоль расстояния C – X (X = C, Ne), при этом геометрия мономера CH_4 оставалась постоянной [22].

Важное значение заключалось в выборе метода построения ППЭ и соответствующих базисных наборов. Корреляционно-согласованные базисы Даннинга cc-pvNZ (N = D, T) с двухпараметриче-

Рис. 1а. Равновесная геометрия D_{3d} димера метанаРис. 1б. Схематическое изображение равновесной геометрии C_{3v} комплекса метан – неон

ской экстраполяцией к бесконечному базисному набору [52] применялись для явно коррелированного подхода F12-CCSD(T). Метод связанных кластеров CCSD(T) использовался совместно с наборами $cc\text{-}p\text{VNZ}$ ($N = D, T, Q$), дополненными связевыми функциями, центрированными в области локализации минимума парной электронной плотности [28]. В качестве оптимального набора связевых функций, более эффективного для описания ван-дер-ваальсовых систем, чем тестовый [33221] [26], предложена серия корреляционно-согласованных базисов $d\text{-aug-}cc\text{-}p\text{VNZ}$ ($N = D, T, Q$) атома Ne, которая с высокой степенью точности описывает электронную корреляцию [53, 54]. Экстраполяция к бесконечному базисному набору для связевых функций проводилась по двухпараметрической схеме Хельгакера [52], как и в описанных выше случаях. Все расчеты, связанные с построением сечений ППЭ, выполнены в программном комплексе MOLPRO [45].

Обсуждение результатов

Анализ полученных ранее значений парной электронной плотности (ПЭП) [30] и усредненной сферически парной электронной плотности (УСПЭП) позволяет сделать вывод о влиянии связевых функций на учет межмолекулярной электронной корреляции на примере димера метана. На рис. 2 представлена усредненная сферически парная электронная плотность в проекции на плоскость YZ. Ее значения на рисунке увеличены в 100 раз. Участки vdz , $vdz+bf$, vtz соответствуют базисным наборам $cc\text{-}p\text{VDZ}$, $cc\text{-}p\text{VDZ}+bf[33221]$, $cc\text{-}p\text{VTZ}$ соответственно. Согласно рис. 2 точка минимума УСПЭП наблюдается только на уровне $cc\text{-}p\text{VDZ} + bf[33221]$ [26], и ее значение составляет -0.0167 (табл. 1). В других случаях, когда используются наборы $cc\text{-}p\text{VDZ}$ и $cc\text{-}p\text{VTZ}$ без связевых функций, минимум не наблюдается (см. рис. 2), указывая на учет электронной корреляции при наличии этих функций и его неполную оценку, когда они отсутствуют. Более явно этот эффект можно увидеть, если провести сравнительный анализ парной электронной плотности и УСПЭП. Коэффициент пропорциональности, равный 0.01, между ними наблюдается только для $cc\text{-}p\text{VDZ} + bf[33221]$ (см. рис. 2).

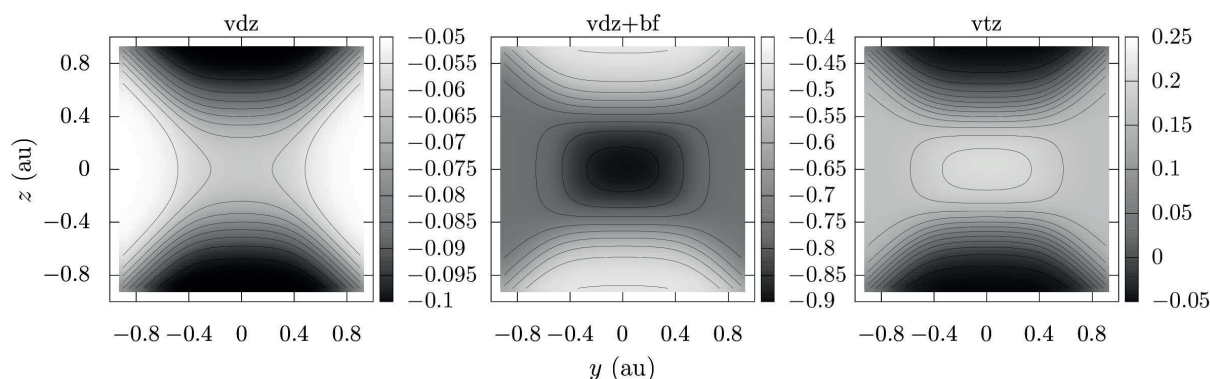


Рис. 2. Усредненная сферически парная электронная плотность в проекции на плоскость YZ

Его можно рассчитать, сравнивая значения табл. 1. В остальных случаях пропорциональность не наблюдается вовсе. Следовательно, условие каспа для матрицы плотности качественно выполняется только при использовании связевых функций. Это указывает на их важную роль в описании межмолекулярной электронной корреляции.

Таблица 1. Приводятся сравнительные значения УСПЭП и ПЭП

Координаты первого электрона (a_0)			сс-pVDZ		сс-pVTZ		сс-pVTZ	
X_1	Y_1	Z_1	УСПЭП	ПЭП	УСПЭП	ПЭП	УСПЭП	ПЭП
0	0	0	-0.006	-0.414 [28]	0.0022	-2.71 [28]	-0.0089	-1.26 [28]
0	0	0.9	-0.0010	-0.321 [28]	-0.0004	-2.66 [28]	-0.0044	-0.321 [28]
0	0.9	0	-0.0005	-0.355 [28]	0.0017	-2.33 [28]	-0.0073	-1.06 [28]

Примечание. Значения ПЭП взяты из работы [28].

Обеспечить наиболее прецизионное описание межмолекулярных взаимодействий и быструю сходимость энергии взаимодействия по базисному набору удастся в случае локализации связевых функций в области минимума усредненной сферически парной электронной плотности. Подтверждается это на примере димера метана, для которого был построен ряд сечений ППЭ методом CCSD(T) с различным расположением фиктивного центра дополнительного набора волновых функций. Согласно данным, представленным в табл. 2, при их локализации в геометрическом центре димера насыщение по базисному набору достигается на уровне сс-pVDZ, где относительное отклонение в энергии диссоциации при переходе от сс-pVDZ к сс-pVTZ составляет 1 %. В случае центрирования в другой области: на расстоянии 1 Å вдоль экваториального направления Y либо по оси углерод – углерод в сторону одного из фрагментов такой же предел насыщения достигается только для сс-pVQZ.

Таблица 2. Энергии взаимодействия (ккал/моль) в точке минимума ППЭ для димера $(CH_4)_2$, полученные с помощью расчетов методом CCSD(T) в базисных наборах сс-pVNZ+bf[33221] ($N = D, T, Q$) с экстраполяцией к бесконечному базисному набору (CBS)

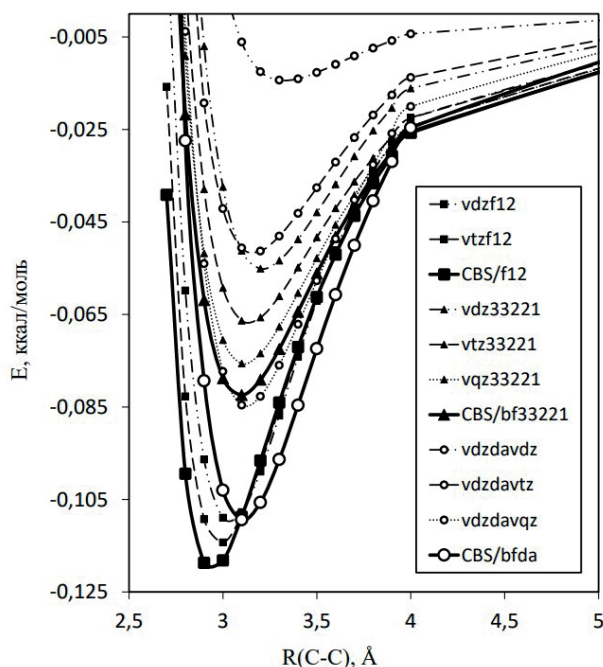
Метод/базис	Центрирование (1)	Центрирование (2)	Центрирование (3)
сс-pVDZ+bf[33221]	0.501	0.405	0.415
сс-pVTZ+bf[3321]	0.505	0.489	0.487
сс-pVQZ+bf[33221]	0.514	0.499	0.507
CBS/bf[33221]	0.521	0.506	0.523

Примечание. Данные, полученные с использованием связевых функций, центрированных в геометрическом центре или смещенных относительно него на 1 Å вдоль экваториального направления Y или в сторону одного из фрагментов, указаны с помощью меток (1), (2) и (3) соответственно.

Важное место в работе занимает калибровка набора связевых функций. Явно коррелированный подход F12-CCSD(T), напрямую учитывающий межэлектронные взаимодействия, может быть использован как эталонный для оценки учета межмолекулярной электронной корреляции, а значит, и для необходимого подбора. Применение этого метода позволяет достичь быстрого насыщения по базису. Отличие между энергиями взаимодействия, соответствующими *сс*-pVTZ и экстраполяции CBS, не превышает 4 % (табл. 3, рис. 3), однако применение явно коррелированного метода ограничено по расчетным мощностям и параметрам базисного набора.

Таблица 3. Энергии взаимодействия (ккал/моль) в точке минимума ППЭ в димерах $(\text{CH}_4)_2$, CH_4Ne , Ne_2 , полученные методами F12-CCSD(T) и CCSD(T) в базисных наборах *сс*-pVNZ+bf[33221] и *vdz*+bf[d-aug-*сс*-pVNZ] (*N* = D, T, Q) с экстраполяцией к бесконечному базисному набору (CBS)

Метод/базис	$(\text{CH}_4)_2$	CH_4Ne	Ne_2
F12-CCSD(T)/vdz	0.460	0.137	0.109
F12-CCSD(T)/vtz	0.504	0.149	0.114
F12-CCSD(T)/CBS	0.539	0.158	0.119
CCSD(T)/vdz/bf[33221]	0.501	0.163	0.0551
CCSD(T)/vtz/bf[33221]	0.505	0.172	0.0663
CCSD(T)/vqz/bf[33221]	0.514	0.173	0.0756
CCSD(T)/CBS/bf[33221]	0.521	0.174	0.082
CCSD(T)/vdz/bf[d-aug- <i>сс</i> -pVDZ]	0.429	0.126	0.0125
CCSD(T)/vdz/bf[d-aug- <i>сс</i> -pVTZ]	0.470	0.135	0.0513
CCSD(T)/vdz/bf[d-aug- <i>сс</i> -pVQZ]	0.494	0.150	0.0846
CCSD(T)/CBS/bf[d-aug- <i>сс</i> -pVNZ]	0.515	0.161	0.109



Представленные на рис. 3 наборы связевых функций [33221] и [d-aug-*сс*-pVNZ] (*N* = D, T, Q) центрированы в геометрическом центре системы, на середине расстояния неон – неон. Сечения, построенные методом F12-CCSD(T) в базисных наборах *сс*-pVDZ, *сс*-pVZ и с экстраполяцией к бесконечному базисному набору (CBS), указаны с помощью меток *vdzf*12, *vtzf*12 и CBS/*f*12, а сечения, полученные

методом CCSD(T) с базисными наборами cc-pVDZ+bf[33221], cc-pVTZ+bf[33221], cc-pVQZ+bf[33221], cc-pVDZ+bf[d-aug-cc-pVDZ], cc-pVDZ+bf[d-aug-cc-pVTZ], cc-pVDZ+bf[d-aug-cc-pVQZ], в том числе с экстраполяцией к бесконечному базисному набору (CBS) для серии базисов cc-pVTZ+bf[33221] и cc-pVTZ+bf[d-aug-cc-pVNZ] ($N = D, T, Q$), соответствуют меткам vdz33221, vtz33221, vqz33221, vdzdavdz, vdzdavtz, vdzdavqz, CBS/bf33221 и CBS/bfda.

Важен сравнительный анализ всех трех подходов. Значения энергии взаимодействия, найденные с помощью F12-CCSD(T)/CBS, CCSD(T)/CBS на уровне cc-pVNZ ($N = D, T, Q$) + bf[33221], CCSD(T)/CBS для базисов cc-pVDZ + bf[d-aug-cc-pVNZ] ($N = D, T, Q$), в случае димера метана отличаются не более чем на 5 % (см. табл. 3). В то же время для $(Ne)_2$ существенно расходятся данные (более чем на 30 %), когда в качестве набора связевых функций используется [33221] [26] со значениями, верифицированными явно коррелированным методом (см. табл. 3, рис. 3), однако при использовании d-aug-cc-pVNZ ($N = D, T, Q$) с экстраполяцией CBS это отличие составляет всего 6 %. В случае димера метан – неон такой разброс значений составляет 10 и 2 % соответственно. Представленные данные свидетельствуют о том, что тестовый набор связевых функций 33221 [26] в ряде случаев не достаточен для насыщения по базису, поэтому для него оказалось невозможно точно описать энергию связи в системах Ne_2 и CH_4Ne . Необходимо расширение набора связевых функций, на примере того, как это было сделано в случае d-aug-cc-pVNZ ($N = D, T, Q$).

Заслуживает особого внимания и исследование сходимости энергии взаимодействия. Результаты, представленные в табл. 3, показывают, что существенные изменения наблюдаются для разных методов в случае димера неона, чего нельзя сказать о димерах метана и системе метан – неон, поэтому Ne_2 в данном контексте заслуживает отдельного рассмотрения. Здесь подход F12-CCSD(T) обеспечивает сходимость уже на уровне cc-pVDZ, отличия в энергии взаимодействия в точке минимума ППЭ составляют порядка 4 % как между значениями, соответствующим cc-pVDZ и cc-pVTZ, так между данными, полученными для cc-pVTZ и CBS. Для метода CCSD(T) в ряду cc-pVDZ, cc-pVTZ, cc-pVQZ, CBS при переходе от базиса к базису такие относительные отличия можно оценить в 20, 14 и 8 % соответственно, поэтому рассуждать о сходимости можно только для cc-pVQZ. Однако здесь энергия в 0.0756 ккал/моль является существенно недооцененной по сравнению с данными метода F12-CCSD(T), что стало основанием для поиска нового подхода, основанного на расширении набора связевых функций, локализованных в геометрическом центре димера, при базисе для атомов неона на уровне cc-pVDZ. Вместо привычного тестового набора [33221] предложена серия базисов d-aug-cc-pVNZ ($N = D, T, Q$) для Ne, зарекомендовавших себя в описании межмолекулярных взаимодействий инертных газов [53, 54]. При переходе от базиса к базису в этом ряду энергия межмолекулярного взаимодействия изменяется существенно: от 310 % при изменении базиса с d-aug-cc-pVDZ на d-aug-cc-pVTZ, до 29 % при переходе от d-aug-cc-pVQZ к экстраполяции CBS. С одной стороны, это свидетельствует о значительной роли качества описания волновой функции в области середины связи углерод – углерод, с другой стороны, можно предполагать, что для связевых функций d-aug-cc-pVQZ мы приближаемся к сходимости по базисному набору. Наконец, также стоит отметить, что величина энергии взаимодействия, полученная методом CCSD(T) в базисе cc-pVDZ, дополненном связевыми функциями с экстраполяцией CBS, соответствует значению в 0.109 ккал/моль, которое было верифицировано методом F12-CCSD(T) в том же базисе. Это является дополнительным аргументом в пользу выбранной стратегии по поиску набора связевых функций.

Заключение

Результаты исследования усредненной сферически парной электронной плотности на примере димера метана позволяют сделать вывод о существенной роли связевых функций в прецизионном определении значения межмолекулярного взаимодействия и подтверждают правильность выбора их фиктивного центра для получения сходящихся к пределу значений энергии диссоциации. Данный факт находит подтверждение и при построении сечений ППЭ для димера метана, когда используется набор связевых функций, в одном случае локализованных в области минимума усредненной сферически парной электронной плотности, а в другом – на расстоянии 1 Å от этой точки минимума. Сходимость энергии по

базису на уровне *ss-pVDZ* наблюдается только в первом примере локализации, тогда как для других вариантов требуется необоснованное расширение базисного набора.

Более того варьирование дополнительного набора корреляционно-согласованных связевых функций *d-aug-ss-pVNZ* ($N = D, T, Q$) позволило реализовать прецизионный подход для расчета энергий взаимодействия в димерах метан–метан, неон–неон, метан–неон. Так, в случае Ne_2 результат, полученный *CCSD(T)* с использованием этих связевых функций в основном базисе *ss-pVDZ*, центрированном на атомах неона, соответствует значению, которое было определено с помощью подхода *F12-CCSD(T)*, но с затратами меньших вычислительных мощностей. Применение для $(Ne)_2$ метода *CCSD(T)//ss-pVNZ+bf[33221]* ($N = D, T, Q$) с экстраполяцией CBS не обеспечило ни насыщения по базису, ни значений, которые бы соответствовали *F12-CCSD(T)*. В итоге можно заключить, что для определения межмолекулярного взаимодействия с высокой степенью точности требуется не только поиск точки локализации связевых функций, но и подбор их состава.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-23-01180) и в рамках тематического плана научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ по государственному заданию НИЦ «Курчатовский институт».

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Благодарности

Автор благодарит к. ф.-м. н., зам. зав. каф., доцента кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова Д.С. Безрукова за полезное обсуждение результатов.

Список литературы

1. Hobza P., Šponer J. Toward True DNA Base-Stacking Energies: MP2, CCSD(T), and Complete Basis Set Calculations // *Journal of the American Chemical Society*, 2002. V. 124. P. 11802–11808. DOI: 10.1021/ja026759n.
2. Danilov V.I., Anisimov V.M., Kurita N., Hovorun D. MP2 and DFT studies of the DNA rare base pairs: The molecular mechanism of the spontaneous substitution mutations conditioned by tautomerism of bases // *Chemical Physics Letters*, 2005. V. 412. P. 285–293. DOI: 10.1016/j.cplett.2005.06.123.
3. Chung G., Oh H., Lee D. Tautomerism and isomerism of guanine–cytosine DNA base pair: Ab initio and density functional theory approaches // *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2005. V. 730. P. 241–249. DOI: 10.1016/j.theochem.2005.05.040.
4. Yildirim I., Turner D.H. RNA Challenges for Computational Chemists // *Biochemistry*, 2005. V. 44. P. 13225–13234. DOI: 10.1021/bi051236o.
5. Cysewski P., Czyżnikowska-Balcerak Ż. The MP2 quantum chemistry study on the local minima of guanine stacked with all four nucleic acid bases in conformations corresponding to mean B-DNA // *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2005. V. 757. P. 29–36. DOI: 10.1016/j.theochem.2005.06.014.
6. Jurečka P., Šponer J., Černý J., Hobza P. Benchmark database of accurate (MP2 and CCSD(T) complete basis set limit) interaction energies of small model complexes, DNA base pairs, and amino acid pairs // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2006. V. 8. P. 1985–1993. DOI: 10.1039/B600027D.
7. Priyakumar U.D., MacKerell A.D. Base Flipping in a GCGC Containing DNA Dodecamer: A Comparative Study of the Performance of the Nucleic Acid Force Fields, CHARMM, AMBER, and BMS // *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2006. V. 2. P. 187–200. DOI: 10.1021/ct0501957.
8. Langner K.M., Kedzierski P., Sokalski W.A., Leszczynski J. Physical Nature of Ethidium and Proflavine Interactions with Nucleic Acid Bases in the Intercalation Plane // *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. V. 110. № 19. P. 9720–9727. DOI: 10.1021/jp056836b.
9. Haley T.P., Graybill E.R., Cybulski S.M. Ab Initio Calc. Dispers. Coefficients Nucleic Acid Base Pairs // *Journal of Chemical Physics*, 2006. V. 124. № 204301. P. 1–7. DOI: 10.1063/1.2197832.
10. Fukuzawa K., Komeiji Y., Mochizuki Y., Kato A., Nakano T., Tanaka S. Intra- and intermolecular interactions between cyclic-AMP receptor protein and DNA: Ab Initio Fragm. Mol. Orbital Study // *Journal of Computational Chemistry*, 2006. V. 27. P. 948–960. DOI: 10.1002/jcc.20399.

11. *Cauët E., Lièvin J.* Radical Cations of the Nucleic Bases and Radiation Damage to DNA: Ab Initio Study // *Advances in Quantum Chemistry*, 2007. V. 52. P. 121–147. DOI: 10.1016/S0065-3276(06)52006-4.
12. *Šponer J., Riley K.E., Hobza P.* Nature and magnitude of aromatic stacking of nucleic acid bases // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2008. V. 10. P. 2595–2610. DOI: 10.1039/B719370J.
13. *Rutledge L.R., Campbell-Verduyn L.S., Hunter K.C., Wetmore S.D.* Characterization of Nucleobase-Amino Acid Stacking Interactions Utilized by a DNA Repair Enzyme // *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. V. 110. P. 19652–19663. DOI: 10.1021/jp061939v.
14. *Rutledge L.R., Durst H.F., Wetmore S.D.* Evidence for Stabilization of DNA/RNA-Protein Complexes Arising from Nucleobase-Amino Acid Stacking and T-Shaped Interactions // *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2009. V. 5. P. 1400–1410. DOI: 10.1021/ct800567q.
15. *Butchosa C., Simon S., Voityuk A.A.* Conformational dependence of the electronic coupling for hole transfer between adenine and tryptophan // *Computational and Theoretical Chemistry*, 2011. V. 975. P. 38–41. DOI: 10.1016/j.comptc.2011.04.025.
16. *Šponer J., Šponer J.E., Petrov A.I., Leontis N.B.* Quantum Chemical Studies of Nucleic Acids: Can We Construct a Bridge to the RNA Structural Biology and Bioinformatics Communities? // *Journal of Physical Chemistry B*, 2010. V. 114. P. 15723–15741. DOI: 10.1021/jp104361m.
17. *Parrish R.M., Sherrill C.D.* Spatial assignment of symmetry adapted perturbation theory interaction energy components: The atomic SAPT partition // *Journal of Chemical Physics*, 2014. V. 141. № 044115. P. 1–21. DOI: 10.1063/1.4889855.
18. *Ballesteros F., Dunivan S., Lao K.U.* Coupled cluster benchmarks of large noncovalent complexes: The L7 dataset as well as DNA – ellipticine and buckycatcher-fullerene // *Journal of Chemical Physics*, 2021. V. 154 № 154104. P. 1–12. DOI: 10.1063/5.0042906.
19. *Kříž K., Řezáč J.* Benchmarking of Semiempirical Quantum-Mechanical Methods on Systems Relevant to Computer-Aided Drug Design // *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2020. V. 60. P. 1453–1460. DOI: 10.1021/acs.jcim.9b01171.
20. *Morawietz T., Artrith N.* Machine learning-accelerated quantum mechanics-based atomistic simulations for industrial applications // *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 2021. V. 35. P. 557–586. DOI: 10.1007/s10822-020-00346-6.
21. *Villar R., Gil M.J., García J.I., Martínez-Merino, V.* Are AM1 ligand-protein binding enthalpies good enough for use in the rational design of new drugs? // *Journal of Computational Chemistry*, 2005. V. 26. P. 1347–1358. DOI: 10.1002/jcc.20276.
22. *Li A.H.-T., Chao S.D.* Interaction energies of dispersion-bound methane dimer from coupled cluster method at complete basis set // *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2009. V. 897. P. 90. DOI: 10.1016/j.theochem.2008.11.026.
23. *Cybulski S.M., Toczyłowski R.R.* Ground state potential energy curves for He₂, Ne₂, Ar₂, He–Ne, He–Ar, and Ne–Ar: A coupled-cluster study // *Journal of Chemical Physics*, 1999. V. 111. P. 10520–10528. DOI: 10.1063/1.480430.
24. *Burcl R., Chalański G., Bukowski R., Szczęśniak M.M.* On the role of bond functions in interaction energy calculations: Ar ··· HCl, Ar ··· H₂O, (HF)₂ // *Journal of Chemical Physics*, 1995. V. 103. Iss. 4. P. 1–11. DOI: 10.1063/1.469771.
25. *Chalański G., Szczęśniak M.M.* State of the Art and Challenges of the ab Initio Theory of Intermolecular Interactions // *Chemical Reviews*, 2000. V. 100. № 11. P. 4227–4252. DOI: 10.1021/CR990048Z.
26. *Tao F.-M., Pan Y.-K.* Møller-Plesset perturbation investigation of the He₂ potential and the role of midbond basis functions // *Journal of Chemical Physics*, 1992. V. 97. P. 4989–4995. DOI: 10.1063/1.463852.
27. *Rutskoy B.V., Bezrukov D.S.* Ab Initio Description of the Structure and Interaction Energy of Perhalomethane Dimers // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2019. V. 93. P. 1519–1524. DOI: 10.1134/S0036024419080259.
28. *Rutskoy B.V., Ozerov G.K., Bezrukov D.S.* The Role of Bond Functions in Describing Intermolecular Electron Correlation for Van der Waals Dimers: A Study of (CH₄)₂ and Ne₂ // *International Journal of Molecular Sciences*, 2024. V. 25. № 3. P. 1472. DOI: 10.3390/ijms25031472.
29. *Baerends E.J., Gritsenko O.V.* A Quantum Chemical View of Density Functional Theory. // *Journal of Physical Chemistry A*, 1997. V. 101. P. 5383–5403. DOI: 10.1021/jp9703768.
30. *Kong L., Bischoff F., Valeev E.F.* Explicitly Correlated R12/F12 Methods for Electronic Structure // *Chemical Reviews*, 2011. V. 112. P. 75–107. DOI: 10.1021/cr200204r.
31. *Pan X.-Y., Sahnia V.* Integral coalescence conditions in D ≥ 2 dimension space // *Journal of Chemical Physics*, 2003. V. 119. P. 7083–7086. DOI: 10.1063/1.1605933.
32. *Gauss J., Stanton J.F., Bartlett R.J.* Coupled-cluster open-shell analytic gradients: Implementation of the direct product decomposition approach in energy gradient calculations // *Journal of Chemical Physics*, 1991. V. 95. P. 2623–2638. DOI: 10.1063/1.460915.
33. *Stanton J.F., Gauss J., Watts J.D., Bartlett R.J.* A direct product decomposition approach for symmetry exploitation in many-body methods. I. Energy calculations // *Journal of Chemical Physics*, 1991. V. 94. P. 4334–4345. DOI: 10.1063/1.460620.
34. *Fitzgerald G., Harrison R.J., Bartlett R.J.* Analytic energy gradients for general coupled-cluster methods and fourth-order many-body perturbation theory // *Journal of Chemical Physics*, 1986. V. 85. P. 5143–5150. DOI: 10.1063/1.451823.
35. *Scheiner A.C., Scuseria G.E., Rice J.E., Lee, T.J., Schaefer H.F.* Analytic evaluation of energy gradients for the single and double excitation coupled cluster (CCSD) wave function: Theory and application // *Journal of Chemical Physics*, 1987. V. 87. P. 5361–5373. DOI: 10.1063/1.453655.
36. *Fitzgerald G., Harrison R., Laidig W.D., Bartlett R.J.* Analytic energy gradients for general coupled-cluster methods and fourth-order many-body perturbation theory // *Chemical Physics Letters*, 1985. V. 117. P. 433–436. DOI: 10.1063/1.451823.

37. *Salter E.A., Trucks G.W., Bartlett R.J.* Analytic energy derivatives in many-body methods. I. First derivatives // *Journal of Chemical Physics*, 1989. V. 90. P. 1752–1766. DOI: 10.1063/1.456069.
38. *Gauss J., Stanton J.F.* Analytic gradients for the coupled-cluster singles, doubles, and triples (CCSDT) model // *Journal of Chemical Physics*, 2002. V. 116. P. 1773–1782. DOI: 10.1063/1.1429244.
39. *Taube A.G., Bartlett R.J.* Improving upon CCSD(T): ACCSD(T). I. Potential energy surfaces // *Journal of Chemical Physics*, 2008. V. 128. P. 1–13. DOI: 10.1063/1.2830236.
40. *Jørgensen P., Helgaker T.* Møller-Plesset energy derivatives // *Journal of Chemical Physics*, 1988. V. 89. P. 1560–1570. DOI: 10.1063/1.455152.
41. *Helgaker T., Jørgensen P.* Analytical Calculation of Geometrical Derivatives in Molecular Electronic Structure Theory // *Advances in Quantum Chemistry*, 1988. V. 19. P. 183–245. DOI: 10.1016/S0065-3276(08)60616-4.
42. *Gauss J., Stanton J.F.* Coupled-cluster calculations of nuclear magnetic resonance chemical shifts // *Journal of Chemical Physics*, 1995. V. 103. P. 3561–3577. DOI: 10.1063/1.470240.
43. *Gauss J., Stanton J.F., Bartlett R.J.* Analytic evaluation of energy gradients at the coupled-cluster singles and doubles level using quasi-restricted Hartree-Fock open-shell reference functions // *Journal of Chemical Physics*, 1991. V. 95. P. 2639–2645. DOI: 10.1063/1.460916.
44. *Lebedev V.I.* Quadratures on the sphere // *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1976. V. 16. P. 10–24. DOI: 10.1016/0041-5553(76)90100-2
45. *Lebedev V.I.* Spherical quadrature formulas exact to orders 25–29 // *Siberian Mathematical Journal*, 1977. V. 18. P. 99–107. DOI: 10.1007/bf00966954.
46. *Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R., etc.* MOLPRO, Version 2015.1, a Package of Ab Initio Programs, 2015. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.molpro.net> [Дата обращения 23.09.2024].
47. *Saad Y., Schultz M.H.* GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems // *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1986. V. 7. P. 856–869. DOI: 10.1137/0907058.
48. *Yang C., Brabec J., Veis L., Williams-Young, D.B., Kowalski K.* Solving Coupled Cluster Equations by the Newton Krylov Method // *Theoretical and Computational Chemistry*, 2020. V. 7. P. 856–869. DOI: 10.3389/fchem.2020.590184.
49. *Pulay P.* Convergence acceleration of iterative sequences. the case of SCF iteration // *Chemical Physics Letters*, 1980. V. 73. P. 393–398. DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4.
50. *Scuseria G.E., Lee T.J., Schaefer H.F.* Accelerating the convergence of the coupled-cluster approach // *Chemical Physics Letters*, 1986. V. 130. P. 236–239. DOI: 10.1016/0009-2614(86)80461-4.
51. *Ito T., Hayami K.* Preconditioned GMRES methods for least squares problems // *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 2008. V. 25. P. 185–207. DOI: 10.1007/BF03167519.
52. *Halkier A., Helgaker T., Jørgensen P., Klopper W., Koch H., Olsen J., Wilson A.K.* Basis-set convergence in correlated calculations on Ne, N₂, and H₂O // *Chemical Physics Letters*, 1998 V. 286. P. 243–252. DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00111-0.
53. *Woon D.A., Dunning T.H.* Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. IV. Calculation of static electrical response properties // *Journal of Chemical Physics*, 1994 V. 100. P. 2975–2988. DOI: 10.1063/1.466439.
54. *Van Mourik T.V., Wilson A.K., Dunning T.H.* Benchmark Calculations with Correlated Molecular Wavefunctions. XIII. Potential Energy Curves for He₂, Ne₂ and Ar₂ using Correlation Consistent Basis Sets through Augmented Sextuple Zeta // *Molecular Physics*, 1999. V. 96 P. 529–547. DOI: 10.1080/00268979909482990.

Describing intermolecular interaction of $(CH_4)_2$, CH_4Ne , Ne_2 dimers

B. V. Rutskoy^{1,2}, ✉

¹ National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, 123182, Russia

² National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

✉ Bogdan.Rutskoy@itep.ru, nrcki@nrcki.ru

Received November 07, 2024; revised March 25, 2025; accepted March 25, 2025

The comparative ab initio study of intermolecular interactions in methane-methane, neon-neon, and methane-neon dimers was carried out using the coupled cluster method taking into account single and double excitations and the non-iterative correction for triple excitations (CCSD(T)) with Dunning's basis sets complemented with bond functions, as well as explicitly correlated coupled cluster method (F12-CCSD(T)). It was shown that in the case of the methane dimer, the pair density spherical mean constructed by the coupled cluster method has a minimum point only if set of bond functions centered on its minimum region is used. This result explains the inclusion of intermolecular electron correlation for wave function basis sets complemented by bond functions. Analyzing sections of the potential energy surface (PES) dimers made it possible to calibrate the set of bond functions, as well as to clarify the interaction energy in the neon dimer.

Keywords: explicitly correlated methods, electron correlation, van der Waals interaction, bond function, methane dimer, neon dimer, density matrix, coupled clusters.

References

1. Hobza P., Šponer J. Toward True DNA Base-Stacking Energies: MP2, CCSD(T), and Complete Basis Set Calculations. *Journal of the American Chemical Society*, 2002. Vol. 124. Pp. 11802–11808. DOI: 10.1021/ja026759n.
2. Danilov V.I., Anisimov V.M., Kurita N., Hovorun D. MP2 and DFT studies of the DNA rare base pairs: The molecular mechanism of the spontaneous substitution mutations conditioned by tautomerism of bases. *Chemical Physics Letters*, 2005. Vol. 412. Pp. 285–293. DOI: 10.1016/j.cplett.2005.06.123.
3. Chung G., Oh H., Lee D. Tautomerism and isomerism of guanine–cytosine DNA base pair: Ab initio and density functional theory approaches. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2005. Vol. 730. Pp. 241–249. DOI: 10.1016/j.theochem.2005.05.040.
4. Yildirim I., Turner D.H. RNA Challenges for Computational Chemists. *Biochemistry*, 2005. Vol. 44. Pp. 13225–13234. DOI: 10.1021/bi051236o.
5. Cysewski P., Czyżnikowska-Balcerak Ż. The MP2 quantum chemistry study on the local minima of guanine stacked with all four nucleic acid bases in conformations corresponding to mean B-DNA. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2005. Vol. 757. Pp. 29–36. DOI: 10.1016/j.theochem.2005.06.014.
6. Jurečka P., Šponer J., Černý J., Hobza P. Benchmark database of accurate (MP2 and CCSD(T) complete basis set limit) interaction energies of small model complexes, DNA base pairs, and amino acid pairs. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2006. Vol. 8. Pp. 1985–1993. DOI: 10.1039/B600027D.
7. Priyakumar U.D., MacKerell A.D. Base Flipping in a GCGC Containing DNA Dodecamer: A Comparative Study of the Performance of the Nucleic Acid Force Fields, CHARMM, AMBER, and BMS. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2006. Vol. 2. Pp. 187–200. DOI: 10.1021/ct0501957.
8. Langner K.M., Kedzierski P., Sokalski W.A., Leszczynski J. Physical Nature of Ethidium and Proflavine Interactions with Nucleic Acid Bases in the Intercalation Plane. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. Vol. 110. No. 19. Pp. 9720–9727. DOI: 10.1021/jp056836b.
9. Haley T.P., Graybill E.R., Cybulski S.M. Ab Initio Calc. Dispers. Coefficients Nucleic Acid Base Pairs. *Journal of Chemical Physics*, 2006. Vol. 124. No. 204301. Pp. 1–7. DOI: 10.1063/1.2197832.

10. Fukuzawa K., Komeiji Y., Mochizuki Y., Kato A., Nakano T., Tanaka S. Intra- and intermolecular interactions between cyclic-AMP receptor protein and DNA: Ab Initio Fragm. Mol. Orbital Study. *Journal of Computational Chemistry*, 2006. Vol. 27. Pp. 948–960. DOI: 10.1002/jcc.20399.
11. Cauët E., Lièvin J. Radical Cations of the Nucleic Bases and Radiation Damage to DNA: Ab Initio Study. *Advances in Quantum Chemistry*, 2007. Vol. 52. Pp. 121–147. DOI: 10.1016/S0065-3276(06)52006-4.
12. Šponer J., Riley K.E., Hobza P. Nature and magnitude of aromatic stacking of nucleic acid bases. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2008. Vol. 10. Pp. 2595–2610. DOI: 10.1039/B719370J.
13. Rutledge L.R., Campbell-Verduyn L.S., Hunter K.C., Wetmore S.D. Characterization of Nucleobase-Amino Acid Stacking Interactions Utilized by a DNA Repair Enzyme. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006. Vol. 110. Pp. 19652–19663. DOI: 10.1021/jp061939v.
14. Rutledge L.R., Durst H.F., Wetmore S.D. Evidence for Stabilization of DNA/RNA-Protein Complexes Arising from Nucleobase-Amino Acid Stacking and T-Shaped Interactions. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2009. Vol. 5. Pp. 1400–1410. DOI: 10.1021/ct800567q.
15. Butchosa C., Simon S., Voityuk A.A. Conformational dependence of the electronic coupling for hole transfer between adenine and tryptophan. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2011. Vol. 975. Pp. 38–41. DOI: 10.1016/j.comptc.2011.04.025.
16. Šponer J., Šponer J.E., Petrov A.I., Leontis N.B. Quantum Chemical Studies of Nucleic Acids: Can We Construct a Bridge to the RNA Structural Biology and Bioinformatics Communities? *Journal of Physical Chemistry B*, 2010. Vol. 114. Pp. 15723–15741. DOI: 10.1021/jp104361m.
17. Parrish R.M., Sherrill C.D. Spatial assignment of symmetry adapted perturbation theory interaction energy components: The atomic SAPT partition. *Journal of Chemical Physics*, 2014. Vol. 141. No. 044115. Pp. 1–21. DOI: 10.1063/1.4889855.
18. Ballesteros F., Dunivan S., Lao K.U. Coupled cluster benchmarks of large noncovalent complexes: The L7 dataset as well as DNA–ellipticine and buckycatcher–fullerene. *Journal of Chemical Physics*, 2021. Vol. 154. No. 154104. Pp. 1–12. DOI: 10.1063/5.0042906.
19. Kříž K., Řezáč J. Benchmarking of Semiempirical Quantum-Mechanical Methods on Systems Relevant to Computer-Aided Drug Design. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2020. Vol. 60. Pp. 1453–1460. DOI: 10.1021/acs.jcim.9b01171.
20. Morawietz T., Artrith N. Machine learning-accelerated quantum mechanics-based atomistic simulations for industrial applications. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 2021. Vol. 35. Pp. 557–586. DOI: 10.1007/s10822-020-00346-6.
21. Villar R., Gil M.J., García J.I., Martínez-Merino, V. Are AM1 ligand-protein binding enthalpies good enough for use in the rational design of new drugs? *Journal of Computational Chemistry*, 2005. Vol. 26. Pp. 1347–1358. DOI: 10.1002/jcc.20276.
22. Li A.H.-T., Chao S.D. Interaction energies of dispersion-bound methane dimer from coupled cluster method at complete basis set. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2009. Vol. 897. Pp. 90. DOI: 10.1016/j.theochem.2008.11.026.
23. Cybulski S.M., Toczyłowski R.R. Ground state potential energy curves for He₂, Ne₂, Ar₂, He–Ne, He–Ar, and Ne–Ar: A coupled-cluster study. *Journal of Chemical Physics*, 1999. Vol. 111. Pp. 10520–10528. DOI: 10.1063/1.480430.
24. Burcl R., Chalasiński G., Bukowski R., Szczyński M.M. On the role of bond functions in interaction energy calculations: Ar ··· HCl, Ar ··· H₂O, (HF)₂. *Journal of Chemical Physics*, 1995. Vol. 103. Iss. 4. Pp. 1–11. DOI: 10.1063/1.469771.
25. Chalasiński G., Szczyński M.M. State of the Art and Challenges of the ab Initio Theory of Intermolecular Interactions. *Chemical Reviews*, 2000. Vol. 100. No. 11. Pp. 4227–4252. DOI: 10.1021/cr990048z.
26. Tao F.-M., Pan Y.-K. Møller-Plesset perturbation investigation of the He₂ potential and the role of midbond basis functions. *Journal of Chemical Physics*, 1992. Vol. 97. Pp. 4989–4995. DOI: 10.1063/1.463852.
27. Rutskoy B.V., Bezrukov D.S. Ab Initio Description of the Structure and Interaction Energy of Perhalomethane Dimers. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2019. Vol. 93. Pp. 1519–1524. DOI: 10.1134/S0036024419080259.
28. Rutskoy B.V., Ozerov G.K., Bezrukov D.S. The Role of Bond Functions in Describing Intermolecular Electron Correlation for Van der Waals Dimers: A Study of (CH₄)₂ and Ne₂. *International Journal of Molecular Sciences*, 2024. Vol. 25. No. 3. Pp. 1472. DOI: 10.3390/ijms25031472.
29. Baerends E.J., Gritsenko O.V. A Quantum Chemical View of Density Functional Theory. *Journal of Physical Chemistry A*, 1997. Vol. 101. Pp. 5383–5403. DOI: 10.1021/JP9703768.
30. Kong L., Bischoff F., Valeev E.F. Explicitly Correlated R12/F12 Methods for Electronic Structure. *Chemical Reviews*, 2011. Vol. 112. Pp. 75–107. DOI: 10.1021/cr200204r.
31. Pan X.-Y., Sahnja V. Integral coalescence conditions in D ≥ 2 dimension space. *Journal of Chemical Physics*, 2003. Vol. 119. Pp. 7083–7086. DOI: 10.1063/1.1605933.
32. Gauss J., Stanton J.F., Bartlett R.J. Coupled-cluster open-shell analytic gradients: Implementation of the direct product decomposition approach in energy gradient calculations. *Journal of Chemical Physics*, 1991. Vol. 95. Pp. 2623–2638. DOI: 10.1063/1.460915.
33. Stanton J.F., Gauss J., Watts J.D., Bartlett R.J. A direct product decomposition approach for symmetry exploitation in many-body methods. I. Energy calculations. *Journal of Chemical Physics*, 1991. Vol. 94. Pp. 4334–4345. DOI: 10.1063/1.460620.
34. Fitzgerald G., Harrison R.J., Bartlett R.J. Analytic energy gradients for general coupled-cluster methods and fourth-order many-body perturbation theory. *Journal of Chemical Physics*, 1986. Vol. 85. Pp. 5143–5150. DOI: 10.1063/1.451823.

35. Scheiner A.C., Scuseria G.E., Rice J.E., Lee T.J., Schaefer H.F. Analytic evaluation of energy gradients for the single and double excitation coupled cluster (CCSD) wave function: Theory and application. *Journal of Chemical Physics*, 1987. Vol. 87. Pp. 5361–5373. DOI: 10.1063/1.453655.
36. Fitzgerald G., Harrison R., Laidig W.D., Bartlett R.J. Analytic energy gradients for general coupled-cluster methods and fourth-order many-body perturbation theory. *Chemical Physics Letters*, 1985. Vol. 117. Pp. 433–436. DOI: 10.1063/1.451823.
37. Salter E.A., Trucks G.W., Bartlett R.J. Analytic energy derivatives in many-body methods. I. First derivatives. *Journal of Chemical Physics*, 1989. Vol. 90. Pp. 1752–1766. DOI.org/10.1063/1.456069.
38. Gauss J., Stanton J.F. Analytic gradients for the coupled-cluster singles, doubles, and triples (CCSDT) model. *Journal of Chemical Physics*, 2002. Vol. 116. Pp. 1773–1782. DOI: 10.1063/1.1429244.
39. Taube A.G., Bartlett R.J. Improving upon CCSD(T): ACCSD(T). I. Potential energy surfaces. *Journal of Chemical Physics*, 2008. Vol. 128. Pp. 1–13. DOI: 10.1063/1.2830236.
40. Jørgensen P., Helgaker T. Møller-Plesset energy derivatives. *Journal of Chemical Physics*, 1988. Vol. 89. Pp. 1560–1570. DOI: 10.1063/1.455152.
41. Helgaker T., Jørgensen P. Analytical Calculation of Geometrical Derivatives in Molecular Electronic Structure Theory. *Advances in Quantum Chemistry*, 1988. Vol. 19. Pp. 183–245. DOI: 10.1016/S0065-3276(08)60616-4.
42. Gauss J., Stanton J.F. Coupled-cluster calculations of nuclear magnetic resonance chemical shifts. *Journal of Chemical Physics*, 1995. Vol. 103. Pp. 3561–3577. DOI: 10.1063/1.470240.
43. Gauss J., Stanton J.F., Bartlett R.J. Analytic evaluation of energy gradients at the coupled-cluster singles and doubles level using quasi-restricted Hartree-Fock open-shell reference functions. *Journal of Chemical Physics*, 1991. Vol. 95. Pp. 2639–2645. DOI: 10.1063/1.460916.
44. Lebedev V.I. Quadratures on the sphere. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1976. Vol. 16. Pp. 10–24. DOI: 10.1016/0041-5553(76)90100-2.
45. Lebedev V.I. Spherical quadrature formulas exact to orders 25–29. *Siberian Mathematical Journal*, 1977. Vol. 18. Pp. 99–107. DOI: 10.1007/bf00966954.
46. Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R. M. MOLPRO, Version 2015.1, a Package of Ab Initio Programs, 2015. Available at: <http://www.molpro.net> (accessed 23.09.2024).
47. Saad Y., Schultz M.H. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1986. Vol. 7. Pp. 856–869. DOI: 10.1137/0907058.
48. Yang C., Brabec J., Veis L., Williams-Young, D.B., Kowalski K. Solving Coupled Cluster Equations by the Newton Krylov Method. *Theoretical and Computational Chemistry*, 2020. Vol. 7. Pp. 856–869. DOI: 10.3389/fchem.2020.590184.
49. Pulay P. Convergence acceleration of iterative sequences. the case of SCF iteration. *Chemical Physics Letters*, 1980. Vol. 73. Pp. 393–398. DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4.
50. Scuseria G.E., Lee T.J., Schaefer H.F. Accelerating the convergence of the coupled-cluster approach. *Chemical Physics Letters*, 1986. Vol. 130. Pp. 236–239. DOI: 10.1016/0009-2614(86)80461-4.
51. Ito T., Hayami K. Preconditioned GMRES methods for least squares problems. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 2008. Vol. 25. Pp. 185–207. DOI: 10.1007/BF03167519.
52. Halkier A., Helgaker T., Jørgensen P., Klopper W., Koch H., Olsen J., Wilson A.K. Basis-set convergence in correlated calculations on Ne, N₂, and H₂O. *Chemical Physics Letters*, 1998. Vol. 286. Pp. 243–252. DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00111-0.
53. Woon D.A., Dunning T.H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. IV. Calculation of static electrical response properties. *Journal of Chemical Physics*, 1994. Vol. 100. Pp. 2975–2988. DOI: 10.1063/1.466439.
54. Van Mourik T.V., Wilson A.K., Dunning T.H. Benchmark Calculations with Correlated Molecular Wavefunctions. XIII. Potential Energy Curves for He₂, Ne₂ and Ar₂ using Correlation Consistent Basis Sets through Augmented Sextuple Zeta. *Molecular Physics*, 1999. Vol. 96. Pp. 529–547. DOI: 10.1080/00268979909482990.

УДК 517.9

Многомерные нелинейные уравнения Шредингера с потенциалом и дисперсией общего вида: точные решения и редукции

© 2025 г. А. Д. Полянин¹, Н. А. Кудряшов²¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, Россия² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Исследуются многомерные нелинейные уравнения Шредингера общего вида, потенциал и дисперсия которых задаются одной или двумя произвольными функциями. Рассматриваемые уравнения естественным образом обобщают ряд родственных нелинейных уравнений с частными производными, которые встречаются в различных разделах теоретической физики, включая нелинейную оптику, сверхпроводимость и физику плазмы. Описаны многомерные и одномерные несимметричные редукции, приводящие исследуемые нелинейные уравнения Шредингера к более простым уравнениям меньшей размерности или обыкновенным дифференциальным уравнениям (или системам обыкновенных дифференциальных уравнений). Специальное внимание уделяется поиску решений с радиальной симметрией. С помощью методов обобщенного и функционального разделения переменных найдены новые точные решения двумерных и n -мерных нелинейных уравнений Шредингера общего вида, которые выражаются в квадратурах или элементарных функциях.

Ключевые слова: нелинейное уравнение Шредингера, многомерные уравнения математической физики, точные решения, решения в квадратурах, решения в элементарных функциях, методы обобщенного и функционального разделения переменных, нелинейная оптика.

Введение

Классическое нелинейное уравнение Шредингера

Во многих разделах физики встречается классическое одномерное нелинейное уравнение Шредингера с кубической нелинейностью [1–10]:

$$iu_t + u_{xx} + k|u|^2u = 0, \quad (1)$$

где $u(x, t)$ – искомая комплекснозначная функция действительных аргументов; t – время; x – пространственная переменная; k – параметр уравнения; $i^2 = -1$. Отметим, что уравнение (1) является интегрируемым уравнением с частными производными (УрЧП) [4, 5] и проходит тест Пенлеве [11–13]; его характерные особенности и точные решения описаны в [4, 5, 14–16].

Родственные нелинейные уравнения с частными производными вида

$$iu_t + u_{xx} + g(|u|)u = 0, \quad (2)$$

$$iu_t + [f(|u|)u]_{xx} + g(|u|)u = 0, \quad (3)$$

✉ А. Д. Полянин: polyanin@ipmnet.ruН. А. Кудряшов: nakudr@gmail.com

Поступила в редакцию: 24.01.2025

После доработки: 10.02.2025

Принята к публикации: 11.02.2025

и многие другие одномерные нелинейные уравнения типа Шредингера, которые встречаются в литературе, можно найти, например, в [14–29]. В нелинейной оптике потенциал $g(|u|)$ в уравнениях (2) и (3) характеризует закон взаимодействия светового импульса с материалом волокна. Функция $f(|u|)$ в уравнении (3) описывает нелинейную дисперсию.

Точные решения уравнения (2) в случае степенного потенциала $g(|u|) = k|u|^n$ рассматривались, например, в [14–16]. Решения с обобщенным разделением переменных нелинейного уравнения (2) с произвольной функцией $g(|u|)$ приведены в [14, 16]. Точные решения и редукции нелинейного уравнения Шредингера общего вида (3) двумя произвольными функциями $f(|u|)$ и $g(|u|)$ описаны в [25, 26].

Точные решения нелинейных УрЧП

Под точными решениями нелинейных УрЧП понимаются следующие решения [25, 29, 30]:

- a) решения, которые выражаются через элементарные функции или могут быть представлены в замкнутой форме (в квадратурах);
- b) решения, которые выражаются через решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или систем таких уравнений.

Точные решения являются своеобразными математическими эталонами, которые часто используются в качестве тестовых задач для проверки адекватности и оценки точности численных и приближенных аналитических методов интегрирования нелинейных уравнений в частных производных.

Под редукциями рассматриваемого уравнения обычно понимаются уравнения меньшей размерности или более низкого порядка, все решения которых являются решениями данного уравнения. Редукции играют ключевую роль в построении точных решений дифференциальных уравнений и приводят к более простым уравнениям.

В данной работе для поиска точных решений многомерных обобщений нелинейных уравнений (2) и (3) использованы различные модификации методов обобщенного и функционального разделения переменных [14, 30, 31] и принцип структурной аналогии решений [27, 32].

Многомерные нелинейные уравнения Шредингера

Рассматриваемые нелинейные уравнения Шредингера

В данной работе будем рассматривать многомерные нелинейные уравнения Шредингера общего вида

$$iu_t + \Delta u + g(|u|)u = 0, \quad (4)$$

$$iu_t + \Delta[f(|u|)u] + g(|u|)u = 0, \quad (5)$$

где $u = u(\mathbf{x}, t)$ – искомая комплекснозначная функция действительных аргументов; t – время; $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$,

x_k – пространственные переменные ($k = 1, \dots, n$); $\Delta = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ – оператор Лапласа; $i^2 = -1$. Уравнения

(4) и (5) являются n -мерными пространственными обобщениями уравнений (2) и (3). Действительные функции $f(|u|)$ и $g(|u|)$, входящие в эти нелинейные УрЧП и характеризующие дисперсию и потенциал, будем считать произвольными.

Групповая классификация уравнения (4) была проведена в [33–35]. Некоторые точные решения этого уравнения в двумерном, трехмерном и n -мерном случаях получены в [14, 34, 36] (см. также [37, 38], где рассматривались родственные УрЧП).

Свойство уравнения (4). Пусть $u(x_1, \dots, x_n, t)$ – решение уравнения (4). Тогда функция

$$\bar{u} = \exp \left\{ -i \left[\sum_{k=1}^n \lambda_k x_k + \left(\sum_{k=1}^n \lambda_k^2 \right) t + A \right] \right\} u(x_1 + 2\lambda_1 t + C_1, \dots, x_n + 2\lambda_n t + C_n, t + B), \quad (6)$$

где $A, B, C_1, \dots, C_n, \lambda_1, \dots, \lambda_n$ – произвольные действительные постоянные, также является решением этого уравнения.

Формула (6), содержащая $2(n+1)$ свободных параметров, позволяет с помощью более простых частных решений уравнения (4) строить его более сложные точные решения. В частности, она дает возможность с помощью стационарных решений уравнения (4) получать некоторые нестационарные решения. Отметим, что при $n = 2$ и $n = 3$ формула разложения решений (6) была выведена в [14].

Преобразование нелинейных уравнений Шредингера к системе действительных УрЧП

Представим искомую функцию в показательной форме

$$u = re^{i\varphi}, \quad r = |u|, \quad (7)$$

где $r = r(\mathbf{x}, t) \geq 0$ и $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$ – действительные функции.

Дифференцируя (7), получим

$$\begin{aligned} u_t &= (r_t + ir\varphi_t)e^{i\varphi}, \\ \Delta[f(|u|)u] &= [\Delta h - h|\nabla\varphi|^2 + i(2\nabla h \cdot \nabla\varphi + h\Delta\varphi)]e^{i\varphi}, \quad h = rf(r), \end{aligned} \quad (8)$$

где использованы обозначения

$$|\nabla\varphi|^2 = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_k} \right)^2, \quad \nabla h \cdot \nabla\varphi = \sum_{k=1}^n \frac{\partial h}{\partial x_k} \frac{\partial\varphi}{\partial x_k}.$$

Подставим (8) в (5) и сократим все члены на $e^{i\varphi}$. Приравняв далее к нулю действительную и мнимую части полученного соотношения, приходим к следующей системе двух действительных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} -r\varphi_t + \Delta h - h|\nabla\varphi|^2 + rg(r) &= 0, \\ r_t + 2\nabla h \cdot \nabla\varphi + h\Delta\varphi &= 0, \quad h = rf(r). \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом показано, что комплекснозначное многомерное нелинейное уравнение Шредингера (5) путем введения двух вспомогательных функций r и φ по формуле (7) преобразуется к системе двух действительных УрЧП (9). Более простое нелинейное уравнение (4) в этом случае приводится к системе УрЧП (9), в которой надо положить $f(r) \equiv 1$, что дает $h = r$.

Замечание 1. Второе уравнение в системе (9) можно представить в виде закона сохранения:

$$H + \operatorname{div}(h^2 \nabla\varphi) = 0, \quad H = \int h(r) dr.$$

Решения и редукции нелинейного уравнения Шредингера с радиальной симметрией

Нелинейные уравнения Шредингера, описывающие радиально-симметричные решения

Уравнения (4) и (5) существенно упрощаются, если рассматривать радиально-симметричные решения. В этом случае приходим к уравнениям с двумя независимыми переменными

$$iu_t + \rho^{1-n}(\rho^{n-1}u_\rho)_\rho + g(|u|)u = 0, \quad (10)$$

$$iu_t + \rho^{1-n}\{\rho^{n-1}[f(|u|)u]_\rho\}_\rho + g(|u|)u = 0, \quad (11)$$

где $\rho = \left(\sum_{k=1}^n x_k^2 \right)^{1/2}$ – радиальная координата. При $n = 1$ уравнения (10) и (11) переходят, соответственно, в уравнения (2) и (3).

Как и ранее, представим искомую функцию в показательной форме (7). Подставив (7) в уравнение (11), после несложных преобразований приходим к системе двух действительных уравнений с частными производными

$$\begin{aligned} -r\varphi_t + h_{\rho\rho} - h\varphi_\rho^2 + \frac{n-1}{\rho}h_\rho + rg(r) &= 0, \\ r_t + 2h_\rho\varphi_\rho + h\varphi_{\rho\rho} + \frac{n-1}{\rho}h\varphi_\rho &= 0, \quad h = rf(r). \end{aligned} \quad (12)$$

Далее описаны некоторые точные решения системы (12).

Решения типа стационарных солитонов

Система (12) допускает простые периодические по времени точные решения вида

$$r = r(\rho), \quad \varphi = C_1 t + C_2, \quad (13)$$

где C_1 и C_2 – произвольные постоянные, а функция $r = r(\rho)$ описывается нелинейным ОДУ второго порядка

$$h_{\rho\rho}'' + (n-1)\rho^{-1}h_\rho' - C_1 r + rg(r) = 0, \quad h = rf(r). \quad (14)$$

Решение этого неавтономного уравнения нельзя представить в замкнутом виде в общем случае произвольных функций $f(r)$ и $g(r)$. Однако, задавая эти функции подходящим образом и используя [39], можно найти его некоторые решения.

Опишем простой и весьма полезный для анализа уравнения (14) полуобратный подход, основанный на введении вместо функции $g(r)$ произвольной вспомогательной функции и непосредственном задании точных решений в неявном виде. А именно, будем считать функцию $f(r)$ произвольной, а решение $r = r(\rho)$ уравнения (14), с учетом соотношения $h = rf$, будем задавать с помощью произвольной вспомогательной функции $h = h(\rho)$ в неявном виде

$$rf(r) = h(\rho). \quad (15)$$

Функция $g = g(r)$ в таком подходе уже не задается, а находится непосредственно из уравнения (14), что приводит к формуле

$$g = C_1 + r^{-1}\rho^{1-n}(\rho^{n-1}h_\rho')'_\rho. \quad (16)$$

Функция потенциала $g = g(r)$ для заданной конкретной функции $h(\rho)$ определяется путем исключения ρ из соотношений (15) и (16).

Продemonстрируем теперь на конкретном примере, как описанный подход работает на практике. Для этого возьмем простую элементарную функцию $h = h(\rho)$ и найдем порожденную ей функцию $g = g(r)$. В этом случае функция $g(r)$ будет выражаться через $f(r)$.

Пример 1. В соотношения (15) и (16) подставим функцию

$$h(\rho) = a\rho^{2-n} + b, \quad (17)$$

где a и b – произвольные постоянные. В результате получим

$$rf(r) = a\rho^{2-n} + b, \quad g(r) = C_1 = \text{const.} \quad (18)$$

Здесь первое соотношение, где $f(r)$ – произвольная функция, неявным образом задает зависимость амплитуды солитона от пространственной координаты $r = r(\rho)$.

Формулы (7), (13), (18) определяют точное решение в неявной форме уравнения (11) с произвольной функцией $f(|u|)$ и постоянным потенциалом $g(|u|) = C_1$.

Можно также подходящим образом задать связь между функциями $f(r)$ и $g(r)$, а функцию $h = h(\rho)$ находить из полученного дифференциального уравнения.

Пример 2. Полагая в (11) и (14) (или (16)) $g = af + b$, приходим к нелинейному уравнению Шредингера

$$iu_t + \rho^{1-n} \{ \rho^{n-1} [f(|u|)u]_{\rho} \}_{\rho} + [af(|u|) + b]u = 0, \quad (19)$$

где $f(z)$ – произвольная функция, которая допускает точное решение, определяемое формулами (7) и (13) при $C_1 = b$. В этих формулах амплитуда $r = r(\rho)$ задается неявным соотношением (15), в котором функция $h = h(\rho)$ описывается линейным ОДУ:

$$h''_{\rho\rho} + (n-1)\rho^{-1}h'_{\rho} + ah = 0. \quad (20)$$

Общее решение этого уравнения при нечетных n можно выразить через элементарные функции, а при четных n – через функции Бесселя или модифицированные функции Бесселя [39].

Периодические по времени решения, амплитуда и фаза которых зависят от пространственной переменной

Система (12) допускает более сложное, чем (13), точное решение вида

$$r = r(\rho), \quad \varphi = C_1 t + \theta(\rho), \quad (21)$$

где C_1 – произвольная постоянная, а функции $r = r(\rho)$ и $\theta = \theta(\rho)$ описываются системой ОДУ:

$$\begin{aligned} h''_{\rho\rho} - h(\theta'_{\rho})^2 + \frac{n-1}{\rho}h'_{\rho} - C_1 r + r g(r) &= 0, \\ 2h'_{\rho}\theta'_{\rho} + h\theta''_{\rho\rho} + \frac{n-1}{\rho}h\theta'_{\rho} &= 0, \quad h = rf(r). \end{aligned} \quad (22)$$

Интегрируя дважды второе уравнение (22), последовательно имеем

$$\theta'_{\rho} = C_2 \rho^{1-n} h^{-2}, \quad \theta = C_2 \int \rho^{1-n} h^{-2} d\rho + C_3, \quad (23)$$

где C_2, C_3 – произвольные постоянные. Исключив производную θ'_{ρ} из первого уравнения (22) с помощью первого соотношения (23), получим следующее нелинейное неавтономное ОДУ второго порядка для функции $r = r(\rho)$:

$$h''_{\rho\rho} - C_2^2 \rho^{2(1-n)} h^{-3} + (n-1)\rho^{-1}h'_{\rho} - C_1 r + r g(r) = 0, \quad h = rf(r). \quad (24)$$

Это уравнение отличается от уравнения (14) наличием дополнительного нелинейного члена, пропорционального h^{-3} . Некоторые точные решения этого уравнения можно получить, используя описанный ранее полуобратный подход, задавая вспомогательную функцию $h = h(\rho)$.

Замечание 2. Уравнение (11) в некоторых случаях (когда две функции f и g задаются одной подходящей вспомогательной произвольной функцией) может допускать также более сложные, чем (21), решения вида

$$r = r(\rho), \quad \varphi = a(t)\theta(\rho) + b(t).$$

В одномерном случае, что соответствует значению $n = 1$, такие решения были построены в [26].

Решения с обобщенным разделением переменных, амплитуда которых зависит от времени

Покажем, что система (12) допускает точное решение с обобщенным разделением переменных вида

$$r = r(t), \quad \varphi = a(t)\rho^2 + b(t). \quad (25)$$

Для этого подставим (25) в (12). В результате первое уравнение системы приводится к квадратному уравнению относительно ρ , коэффициенты которого зависят от времени. Приравнявая нулю функциональные коэффициенты квадратного уравнения и добавляя второе уравнение системы, которое в данном случае зависит только от t , получим следующую систему ОДУ:

$$\begin{aligned} a'_t &= -4a^2 f(r), \\ b'_t &= g(r), \\ r'_t &= -2nar f(r), \end{aligned} \quad (26)$$

в которой первые два уравнения были сокращены на r .

Из первого и третьего уравнения системы (26) имеем интеграл

$$a = C_1 r^{2/n}, \quad (27)$$

где C_1 – произвольная постоянная. Исключив a из третьего уравнения (26) с помощью (27), получим ОДУ

$$r'_t = -2C_1 n r^{(n+2)/n} f(r), \quad (28)$$

общее решение которого можно представить в неявной форме

$$\int \frac{dr}{r^{(n+2)/n} f(r)} = C_2 - 2C_1 n t, \quad (29)$$

где C_2 – произвольная постоянная. Функция $a = a(t)$ определяется соотношениями (27) и (29). Функция $b = b(t)$ находится интегрированием второго уравнения (26):

$$b = \int g(r) dt + C_3, \quad (30)$$

где C_3 – произвольная постоянная, а функции $r = r(t)$ задана неявно выражением (29).

Отметим, что функцию b можно выразить через функцию r по формуле:

$$b = -\frac{1}{2C_1 n} \int \frac{g(r) dr}{r^{(n+2)/n} f(r)} + C_3.$$

Решения и редукции многомерного нелинейного уравнения Шредингера

Далее описаны некоторые точные решения и редукции многомерного нелинейного уравнения Шредингера общего вида (5), которое содержит две произвольные функции $f(z)$ и $g(z)$. Для построения этих решений используется представление решения в экспоненциальной форме (7) и система двух действительных УрЧП (9).

Решения типа многомерной бегущей волны с постоянной амплитудой

Система (9) имеет простое точное решение типа многомерной бегущей волны

$$\begin{aligned} r &= A, \quad \varphi = \sum_{k=1}^n C_k x_k + Bt + D, \\ B &= g(A) - f(A) \sum_{k=1}^n C_k^2, \end{aligned} \quad (31)$$

где $A, C_1, \dots, C_n, D$ – произвольные действительные постоянные. Это решение является периодическим по времени t .

Решения типа многомерных стационарных солитонов

Система (9) допускает нестационарное периодическое по времени решение (7) в виде произведения функций разных аргументов

$$r = r(\mathbf{x}), \quad \varphi = C_1 t + C_2, \quad (32)$$

где C_1 и C_2 – произвольные постоянные, а функция $r = r(\mathbf{x})$ описывается n -мерным стационарным уравнением с частными производными

$$\Delta h - C_1 r + r g(r) = 0, \quad h = r f(r). \quad (33)$$

Точные решения этого уравнения в двумерном, трехмерном и общем случае для некоторых функций $f(r)$ и $g(r)$ можно найти, например, в [14].

Рассмотрим специальный случай, задав линейную связь $g = af + b$ между функциями $f = f(r)$ и $g = g(r)$. В этом случае нелинейное уравнение Шредингера (5) принимает вид

$$iu_t + \Delta[f(|u|)u] + [af(|u|) + b]u = 0, \quad (34)$$

где $f(z)$ – произвольная функция. Полагая в (33) $g = af + b$ и $C_1 = b$, а также учитывая соотношение $h = rf$, приходим к уравнению Гельмгольца для функции h :

$$\Delta h + ah = 0. \quad (35)$$

Решения этого линейного уравнения можно найти в [40]. Любое частное решение этого уравнения $h = h(\mathbf{x})$ порождает точное решение нелинейного уравнения (34), которое описывается формулами (7) и (32) при $C_1 = b$, где функция $r = r(\mathbf{x})$ задается неявно с помощью соотношения $h(\mathbf{x}) = rf(r)$.

В частности, в двумерном случае при $n = 2$ уравнение (35) допускает точные решения:

$$\begin{aligned} h &= (A_1 \cos \mu_1 x_1 + B_1 \sin \mu_1 x_1)(A_2 \cos \mu_2 x_2 + B_2 \sin \mu_2 x_2), \quad a = \mu_1^2 + \mu_2^2; \\ h &= (A_1 \cos \mu_1 x_1 + B_1 \sin \mu_1 x_1)(A_2 \cosh \mu_2 x_2 + B_2 \sinh \mu_2 x_2), \quad a = \mu_1^2 - \mu_2^2; \end{aligned}$$

где $A_1, A_2, B_1, B_2, \mu_1, \mu_2$ – произвольные постоянные.

Замечание 3. Уравнение (33) с помощью подстановки $h = rf(r)$ сводится к нелинейному стационарному n -мерному уравнению теплопроводности с источником

$$\Delta h + \Phi(h) = 0,$$

где функция $\Phi(h)$ задается параметрически двумя соотношениями

$$h = zf(z), \quad \Phi = -C_1 z + zg(z) \quad (z - \text{параметр}).$$

Решения типа пространственных стационарных солитонов с выделенным направлением

Система (9) допускает периодическое по времени нестационарное решение вида

$$r = r(x_1), \quad \varphi = At + \sum_{k=2}^n B_k x_k + C, \quad (36)$$

где $A, B_2, \dots, B_n, C$ – произвольные постоянные, а функция $r = r(x_1)$ описывается нелинейным ОДУ автономного типа

$$h''_{xx} - \left(\sum_{k=2}^n B_k^2 \right) h - Ar + rg(r) = 0, \quad h = rf(r), \quad x = x_1. \quad (37)$$

В [26] было доказано, что общее решение таких ОДУ может быть представлено в квадратурах [26] для произвольных функций f и g .

Другие периодические по времени решения, амплитуда которых зависит от пространственных переменных

1. Решение (36), в котором выделена одна переменная x_1 , допускает пространственное обобщение. Для этого надо выделить две группы пространственных переменных $x_1, \dots, x_m$ и $x_{m+1}, \dots, x_n$ и искать точные решения нелинейного уравнения Шредингера в виде

$$r = r(x_1, \dots, x_m), \quad \varphi = At + \sum_{k=m+1}^n B_k x_k + C.$$

В результате для амплитуды r получим одно нелинейное УрЧП размерности m .

2. Имеется также более широкий класс решений

$$r = r(\mathbf{x}), \quad \varphi = At + \theta(\mathbf{x}).$$

Подставив эти выражения в (9), получим стационарную нелинейную систему УрЧП для функций r и θ .

Решения с обобщенным разделением переменных, амплитуда которых зависит от времени

В общем случае система (9) допускает решения, амплитуда которых зависит только от времени, а фаза является квадратичным многочленом по пространственным координатам с переменными коэффициентами:

$$r = r(t), \quad \varphi = \sum_{p,q=1}^n a_{pq}(t) x_p x_q + \sum_{p=1}^n b_p(t) x_p + c(t). \quad (38)$$

где функции $r = r(t)$, $a_{pq} = a_{pq}(t)$, $b_p = b_p(t)$, $c = c(t)$ подлежат определению в ходе дальнейшего анализа (считается, что $a_{pq} = a_{qp}$).

Рассмотрим подробнее двумерное нелинейное уравнение Шредингера (5), соответствующее значению $n = 2$. Входящие в решение (7) искомые функции (38) в данном случае имеют вид

$$r = r(t), \quad \varphi = a_{11}(t)x^2 + a_{12}(t)xy + a_{22}(t)y^2 + b_1(t)x + b_2(t)y + c(t), \quad (39)$$

где $x = x_1, y = x_2$, а $2a_{12}$ было переобозначено на a_{12} . Подставив (39) в (9), после разделения переменных приходим к следующей нелинейной системе ОДУ для функциональных коэффициентов:

$$\begin{aligned} a'_{11} &= -(4a_{11}^2 + a_{12}^2)f(r), \\ a'_{12} &= -4a_{12}(a_{11} + a_{22})f(r), \\ a'_{22} &= -(4a_{22}^2 + a_{12}^2)f(r), \\ b'_1 &= -2(2a_{11}b_1 + a_{12}b_2)f(r), \\ b'_2 &= -2(2a_{22}b_2 + a_{12}b_1)f(r), \\ c' &= -(b_1^2 + b_2^2)f(r) + g(r), \\ r' &= -2(a_{11} + a_{22})rf(r), \end{aligned} \quad (40)$$

где первые шесть уравнений были сокращены на r , а штрих обозначает производную по t .

Два точных решения системы ОДУ (40) при $f(r) \equiv 1$

Далее приведены два многопараметрических точных решения системы ОДУ (40) при $f(r) \equiv 1$, которые выражаются через элементарные функции и определяют соответствующие точные решения нелинейного уравнения Шредингера с одной произвольной функцией (4).

1. При $a_{12} = 0$ второе уравнение системы ОДУ (40) удовлетворяется тождественно. В этом случае сначала последовательно интегрируются оставшиеся четыре первых уравнения, затем интегрируется последнее уравнение, и наконец, предпоследнее. В результате указанных действий получим

$$\begin{aligned} a_{11}(t) &= \frac{1}{4(t+C_1)}, \quad a_{12}(t) = 0, \quad a_{22}(t) = \frac{1}{4(t+C_2)}, \\ b_1(t) &= \frac{C_3}{2(t+C_1)}, \quad b_2(t) = \frac{C_4}{2(t+C_2)}, \quad r(t) = \frac{C_5}{\sqrt{(t+C_1)(t+C_2)}}, \\ c(t) &= \frac{C_3^2}{4(t+C_1)} + \frac{C_4^2}{4(t+C_2)} + \int g(r(t))dt + C_6, \end{aligned} \quad (41)$$

где $C_1, \dots, C_6$ – произвольные постоянные.

2. Решения первых трех функциональных коэффициентов в системе ОДУ (40) ищем обратно пропорциональными $(t+C_1)$, считая, что $a_{12} \neq 0$. Таким образом можно найти следующие точные решения:

$$\begin{aligned} a_{11}(t) &= \frac{C_2}{t+C_1}, \quad a_{12}(t) = \frac{A}{t+C_1}, \quad a_{22}(t) = \frac{B}{t+C_1}, \\ b_1(t) &= \frac{2AC_3}{t+C_1} + AC_4, \quad b_2(t) = \frac{(1-4C_2)C_3}{t+C_1} - 2C_2C_4, \\ r(t) &= \frac{C_5}{\sqrt{t+C_1}}, \quad A = \pm(C_2 - 4C_2^2)^{1/2}, \quad B = \frac{1}{4} - C_2, \\ c(t) &= -\int [b_1^2(t) + b_2^2(t)]dt + \int g(r(t))dt + C_6, \end{aligned} \quad (42)$$

где $C_1, \dots, C_6$ – произвольные постоянные. Первый интеграл в последнем выражении (42) легко вычисляется, но из-за громоздкости не приводится.

Другие решения с обобщенным разделением переменных уравнения (4)

Нелинейное уравнение Шредингера (4) допускает точное решение (7), в котором амплитуда и фаза ищутся в виде

$$r = r(z), \quad z = t^2 + \sum_{k=1}^n a_k x_k, \quad \varphi = ct^3 + t \sum_{k=1}^n b_k x_k + d, \quad (43)$$

где d – произвольная постоянная, а свободные параметры $a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_n, c$ подбираются так, чтобы удовлетворить системе УрЧП (9).

Рассмотрим подробнее двумерное нелинейное уравнение Шредингера (4), соответствующее значению $n = 2$. Входящие в решение (7) искомые функции (43) в данном случае имеют вид

$$r = r(z), \quad z = t^2 + a_1 x + a_2 y, \quad \varphi = ct^3 + t(b_1 x + b_2 y) + d, \quad (44)$$

где использованы обозначения $x = x_1$ и $y = x_2$.

Подставив (44) во второе уравнение системы (9) при $n = 2$, после сокращения на $2tu'_z$ приходим к простому алгебраическому соотношению

$$a_1 b_1 + a_2 b_2 + 1 = 0. \quad (45)$$

Подставив (44) в первое уравнение системы (9) при $n = 2$, после элементарных алгебраических преобразований получим

$$(a_1^2 + a_2^2)r''_{zz} - [(3c + b_1^2 + b_2^2)t^2 + b_1 x + b_2 y]r + rg(r) = 0. \quad (46)$$

Это соотношение будет обыкновенным дифференциальным уравнением, если потребовать, чтобы выражение в квадратных скобках было функцией только переменной z , которая введена в (44). Требование приводит к следующим трем алгебраическим уравнениям на свободные коэффициенты:

$$\begin{aligned} 3c + b_1^2 + b_2^2 &= \lambda, \\ b_1 &= \lambda a_1, \\ b_2 &= \lambda a_2, \end{aligned} \quad (47)$$

где λ – новый свободный параметр. При выполнении условий (47) соотношение (46) становится обыкновенным дифференциальным уравнением

$$(a_1^2 + a_2^2)r''_{zz} - \lambda zr + rg(r) = 0. \quad (48)$$

Четыре соотношения (8) и (47) представляют собой недоопределенную систему алгебраических уравнений, в которую входит шесть неизвестных коэффициентов $a_1, b_1, a_2, b_2, c, \lambda$. Поэтому два из этих коэффициентов можно задать произвольно, а остальные четыре выразить через них. Прямой проверкой нетрудно убедиться, что общее решение системы уравнений (8) и (47) можно представить в виде

$$\begin{aligned} a_1 &= p \cos q, & a_2 &= p \sin q, \\ b_1 &= -\frac{1}{p} \cos q, & b_2 &= -\frac{1}{p} \sin q, \\ c &= -\frac{2}{3p^2}, & \lambda &= -\frac{1}{p^2}, \end{aligned} \quad (49)$$

где p и q – произвольные постоянные ($p \neq 0$). Подставив выражения (49) в (44) и (48), а затем в (7), можно найти точное решение двумерного нелинейного уравнения Шредингера (4).

Отметим, что поиск точного решения n -мерного нелинейного уравнения Шредингера (4) в виде (43) приводит к ОДУ, которое можно получить из (46), формально заменив в нем коэффициент $(a_1^2 + a_2^2)$ перед второй производной на сумму $\left(\sum_{k=1}^n a_k^2\right)$.

Редукция с использованием новой переменной типа обобщенной бегущей волны

Система УрЧП (9) допускает решение вида

$$r = r(z), \quad \varphi = at + \sum_{k=1}^n b_k x_k + \theta(z), \quad z = \sum_{k=1}^n c_k x_k + \lambda t, \quad (50)$$

где $a, b_1, \dots, b_n, c_1, \dots, c_n, \lambda$ – произвольные действительные постоянные, а функции $r = r(z)$ и $\theta = \theta(z)$ удовлетворяют нелинейной системе ОДУ:

$$\begin{aligned} -r(a + \lambda \theta'_z) + h''_{zz} \sum_{k=1}^n c_k^2 - h \sum_{k=1}^n (b_k + c_k \theta'_z)^2 + rg(r) &= 0, \\ \lambda r'_z + 2 \left(\sum_{k=1}^n b_k c_k \right) h'_z + \left(\sum_{k=1}^n c_k^2 \right) (2h'_z \theta'_z + h \theta''_{zz}) &= 0, \quad h = rf(r). \end{aligned} \quad (51)$$

Отметим, что замена $\xi = \theta_z$ позволяет понизить порядок системы ОДУ (51) на единицу. Нетрудно проверить, что второе уравнение (51) допускает первый интеграл

$$\lambda \int h(r) dr + \left(\sum_{k=1}^n b_k c_k \right) h^2 + \left(\sum_{k=1}^n c_k^2 \right) h^2 \theta'_z = C, \quad h = rf(r), \quad (52)$$

где C – произвольная постоянная. Исключив далее производную θ'_z из первого уравнения (51) с помощью (52), можно вывести нелинейное автономное ОДУ второго порядка (которое явно не зависит от z). Общее решение полученного ОДУ можно выразить в квадратурах с помощью метода, описанного в [26].

Краткие выводы

Исследуются многомерные нелинейные уравнения Шредингера общего вида, дисперсия и потенциал которых задаются одной или двумя произвольными функциями. Найдены некоторые решения этих уравнений, которые выражаются в квадратурах или элементарных функциях. Описаны многомерные и одномерные редукции, приводящие рассматриваемые нелинейные УрЧП к более простым уравнениям меньшей размерности или обыкновенным дифференциальным уравнениям или системам таких уравнений.

Финансирование

Работа выполнена по темам государственного задания (номера госрегистрации 124012500440-9 и FSWU-2023-0031).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Полянин А.Д. – разработка математической модели, построение точных решений, подготовка текста статьи, обсуждение результатов.

Кудряшов Н.А. – разработка математической модели, построение точных решений, подготовка текста статьи, обсуждение результатов.

Список литературы

1. Агравал Г. Нелинейная волоконная оптика. М.: Мир, 1996.
2. Кившарь Ю.С., Агравал Г. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. М.: Физматлит, 2005.
3. Kodama Y., Hasegawa A. Nonlinear pulse propagation in a monomode dielectric guide // IEEE Journal of Quantum Electronics, 1987. V. 23. № 5. P. 510–524.
4. Drazin P.G., Johnson R.S. Solitons: An Introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
5. Ablowitz M.J., Clarkson P.A. Solitons Nonlinear Evolution Equations and Inverse Scattering. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.
6. Kivshar Yu.S., Malomed B.A. Dynamics of solitons in nearly integrable systems // Rev. Mod. Phys., 1989. V. 63. P. 763–915.
7. Hasegawa A., Tappert F. Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. I. Anomalous dispersion // Applied Physics Letters, 1973. V. 23. № 3. P. 142–144.
8. Hasegawa A., Tappert F. Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. II. Normal dispersion // Applied Physics Letters, 1973. V. 23. № 4. P. 171–172.
9. Tai K., Hasegawa A., Tomita A. Observation of modulational instability in optical fibers // Physical Review Letters, 1986. V. 56. № 2. P. 135–138.
10. Ахманов С.А., Сухоруков А.П., Хохлов Р.В. Самофокусировка и дифракция света в нелинейной среде // Успехи физических наук, 1967. Т. 93. № 1. С. 19–70.
11. Weiss J., Tabor M., Carnevale G. The Painleve property for partial differential equations // J. Math. Phys., 1982. V. 24. № 3. P. 522–526.
12. Kudryashov N.A. Painlevé analysis of the resonant third-order nonlinear Schrödinger equation // Appl. Math. Letters, 2024. V. 158. 109232.
13. Kudryashov N.A. Painlevé analysis of the Sasa–Satsuma equation // Phys. Letters A, 2024. V. 525. 129900.
14. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2012.
15. Al Khawaja U., Al Sakkaf L. Handbook of Exact Solutions to the Nonlinear Schrödinger Equations. Bristol: Institute of Physics Publ., 2019.
16. Polyanin A.D. Handbook of Exact Solutions to Mathematical Equations. Boca Raton: CRC Press–Chapman & Hall, 2025.
17. Kudryashov N.A. Mathematical model of propagation pulse in optical fiber with power nonlinearities // Optik, 2020. V. 212. 164750.
18. Kudryashov N.A. Stationary solitons of the generalized nonlinear Schrödinger equation with nonlinear dispersion and arbitrary refractive index // Applied Mathematics Letters, 2022. V. 128. 107888.
19. Kudryashov N.A. Almost general solution of the reduced higher-order nonlinear Schrödinger equation // Optik, 2021. V. 230. 66347.
20. Yildirim Y. Optical solitons to Schrödinger–Hirota equation in DWDM system with modified simple equation integration architecture // Optik, 2019. V. 182. P. 694–701.
21. Zayed E.M.E., Shohib R.M.A., Alngar M.E.M., Biswas A., Moraru L., Khan S., Yildirim Y., Alshehri H.M., Belic M.R. Dispersive optical solitons with Schrödinger–Hirota model having multiplicative white noise via Ito Calculus // Physics Letters A: General, Atomic and Solid State Physics, 2022. V. 445. 128268.
22. Wang G., Kara A.H., Biswas A., Guggilla P., Alzahrani A.K., Belic M.R. Highly dispersive optical solitons in polarization-preserving fibers with Kerr law nonlinearity by Lie symmetry // Physics Letters A: General, Atomic and Solid State Physics, 2022. V. 421. 127768.
23. Biswas A., Hubert M.B., Justin M., Betchewe G., Doka S.Y., Crepin K.T., Ekici M., Zhou Q., Moshokoa S., Belic M. Chirped dispersive bright and singular optical solitons with Schrödinger–Hirota equation. Optik, 2018. V. 168. P. 192–195.
24. Zhou Q., Xu M., Sun Y., Zhong Y., Mirzazadeh M. Generation and transformation of dark solitons, anti-dark solitons and dark double-hump solitons // Nonlinear Dynamics, 2022. V. 110. № 2. P. 1747–1752.
25. Полянин А.Д., Кудряшов Н.А. Нелинейное уравнение Шредингера с дисперсией и потенциалом общего вида: Точные решения и редукции // Вестник НИЯУ МИФИ. 2024. Т. 13. № 6. С. 394–402.
26. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Closed-form solutions of the nonlinear Schrödinger equation with arbitrary dispersion and potential // Chaos, Solitons & Fractals. 2025. V. 191. 115822.

27. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Nonlinear Schrödinger equations with delay: Closed-form and generalized separable solutions // *Contemporary Mathematics*. 2024. V. 5. № 4. P. 5783–5794.
28. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Exact solutions and reductions of nonlinear Schrödinger equations with delay // *Journal of Computational & Applied Mathematics*. 2025. V. 462. 116477.
29. Полянин А.Д., Кудряшов Н.А. Нелинейное уравнение Шредингера общего вида: Многофункциональная модель, редукции и точные решения // *Вестник НИЯУ МИФИ*. 2025. Т. 14. № 1. С. 23–35.
30. Polyanin A.D., Zhurov A.I. Separation of Variables and Exact Solutions to Nonlinear PDEs. Boca Raton–London: CRC Press, 2022.
31. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R. Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
32. Aksenov A.V., Polyanin A.D. Methods for constructing complex solutions of nonlinear PDEs using simpler solutions // *Mathematics*, 2021. V. 9. № 4. 345.
33. Gagnon L., Winternitz P. Lie symmetries of a generalized nonlinear Schrödinger equation. I. The symmetry group and its subgroups // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1988. V. 21. № 7. 1493.
34. Баранник А.Ф., Марченко В.А., Фуцич В.И. О редукции и точных решениях нелинейных многомерных уравнений Шредингера // *Теор. и мат. физика*, 1991. Т. 87. № 2. С. 220–234.
35. Ibragimov N.H. (ed.). CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Vol. 2. Applications in Engineering and Physical Sciences. Boca Raton: CRC Press, 1995.
36. Gagnon L., Winternitz P. Lie symmetries of a generalized nonlinear Schrödinger equation. II. Exact solutions // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1989. V. 22. № 5. 469.
37. Zhong W.-P., Xie R.-H., Belić M., Petrović N., Chen G. Exact spatial soliton solutions of the two-dimensional generalized nonlinear Schrödinger equation with distributed coefficients // *Physical Review A*, 2008. V. 78. 023821.
38. Seadawy A.R. Exact solutions of a two-dimensional nonlinear Schrödinger equation // *Applied Mathematics Letters*, 2012. V. 25. № 4. P. 687–691.
39. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems. Boca Raton–London: CRC Press, 2018.
40. Polyanin A.D., Nazaikinskii V.E. Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists, 2nd ed. Boca Raton–London: CRC Press, 2016.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 116–130

Multidimensional nonlinear Schrödinger equations with potential and dispersion of the general form: exact solutions and reductions

A. D. Polyanin^{1,✉}, N. A. Kudryashov^{2,✉}

¹ Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119526 Russia

² National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

✉ polyanin@ipmnet.ru

✉ nakudr@gmail.com

Received January 24, 2025; revised February 10, 2025; accepted February 11, 2025

Multidimensional nonlinear Schrödinger equations of the general form are investigated, in which the potential and dispersion are specified by one or two arbitrary functions. The equations under consideration naturally generalize a number of related nonlinear partial differential equations that occur in various areas of theoretical physics, including nonlinear optics, superconductivity, and plasma physics. Multidimensional and one-dimensional non-symmetry reductions are described, which lead the studied nonlinear Schrödinger equations to simpler equations of lower dimension or ordinary differential equations (or systems of ordinary differential equations). Special attention is paid to finding solutions

with radial symmetry. Using methods of generalized separation of variables, new exact solutions of two-dimensional and n -dimensional nonlinear Schrödinger equations of the general form, which are expressed in quadratures or elementary functions, are found.

Keywords: nonlinear Schrödinger equations, multidimensional equations of mathematical physics, exact solutions, solutions in quadratures, solutions in elementary functions, methods of generalized separation of variables, nonlinear optics.

References

1. Agrawal G.P. Nonlinear Fiber Optics, 4th ed. New York, Academic Press, 2007.
2. Kivshar Yu.S., Agrawal G.P. Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals. San Diego, Academic Press, 2003.
3. Kodama Y., Hasegawa A. Nonlinear pulse propagation in a monomode dielectric guide. IEEE Journal of Quantum Electronics, 1987. Vol. 23. No. 5. Pp. 510–524.
4. Drazin P.G., Johnson R.S. Solitons: An Introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
5. Ablowitz M.J., Clarkson P.A. Solitons Nonlinear Evolution Equations and Inverse Scattering. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.
6. Kivshar Yu.S., Malomed B.A. Dynamics of solitons in nearly integrable systems. Rev. Mod. Phys., 1989. Vol. 63. Pp. 763–915.
7. Hasegawa A., Tappert F. Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. I. Anomalous dispersion. Applied Physics Letters, 1973. Vol. 23. No. 3. Pp. 142–144.
8. Hasegawa A., Tappert F. Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. II. Normal dispersion. Applied Physics Letters, 1973. Vol. 23. No. 4. Pp. 171–172.
9. Tai K., Hasegawa A., Tomita A. Observation of modulational instability in optical fibers. Physical Review Letters, 1986. Vol. 56. No. 2. Pp. 135–138.
10. Akhmanov S.A., Sukhorukov A.P., Khokhlov R.V. Self-focusing and diffraction of light in a nonlinear medium [Self-focusing and diffraction of light in a nonlinear medium]. Uspekhi fizicheskikh nauk, 1968. Vol. 10. No. 5. Pp. 609–636 (in Russian).
11. Weiss J., Tabor M., Carnevale G. The Painleve property for partial differential equations. J. Math. Phys., 1982. Vol. 24. No. 3. Pp. 522–526.
12. Kudryashov N.A. Painlevé analysis of the resonant third-order nonlinear Schrödinger equation. Appl. Math. Letters, 2024. Vol. 158. 109232.
13. Kudryashov N.A. Painlevé analysis of the Sasa–Satsuma equation. Phys. Letters A, 2024. Vol. 525. 129900.
14. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2012.
15. Al Khawaja U., Al Sakka L. Handbook of Exact Solutions to the Nonlinear Schrödinger Equations. Bristol, Institute of Physics Publ., 2019.
16. Polyanin A.D. Handbook of Exact Solutions to Mathematical Equations. Boca Raton, CRC Press–Chapman & Hall, 2025.
17. Kudryashov N.A. Mathematical model of propagation pulse in optical fiber with power nonlinearities. Optik, 2020. Vol. 212. 164750.
18. Kudryashov N.A. Stationary solitons of the generalized nonlinear Schrödinger equation with nonlinear dispersion and arbitrary refractive index. Applied Mathematics Letters, 2022. Vol. 128. 107888.
19. Kudryashov N.A. Almost general solution of the reduced higher-order nonlinear Schrödinger equation. Optik, 2021. Vol. 230. 66347.
20. Yildirim Y. Optical solitons to Schrödinger–Hirota equation in DWDM system with modified simple equation integration architecture. Optik, 2019. Vol. 182. Pp. 694–701.
21. Zayed E.M.E., Shohib R.M.A., Alngar M.E.M., Biswas A., Moraru L., Khan S., Yildirim Y., Alshehri H.M., Belic M.R. Dispersive optical solitons with Schrödinger–Hirota model having multiplicative white noise via Ito Calculus. Physics Letters A: General, Atomic and Solid State Physics, 2022. Vol. 445. 128268.
22. Wang G., Kara A.H., Biswas A., Guggilla P., Alzahrani A.K., Belic M.R. Highly dispersive optical solitons in polarization-preserving fibers with Kerr law nonlinearity by Lie symmetry. Physics Letters A: General, Atomic and Solid State Physics, 2022. Vol. 421. 127768.
23. Biswas A., Hubert M.B., Justin M., Betchewe G., Doka S.Y., Crepin K.T., Ekici M., Zhou Q., Moshokoa S., Belic M. Chirped dispersive bright and singular optical solitons with Schrödinger–Hirota equation. Optik, 2018. Vol. 168. Pp. 192–195.
24. Zhou Q., Xu M., Sun Y., Zhong Y., Mirzazadeh M. Generation and transformation of dark solitons, anti-dark solitons and dark double-hump solitons. Nonlinear Dynamics, 2022. Vol. 110. No. 2. Pp. 1747–1752.

25. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Nelineynoye uravneniye Shredingera s dispersiyey i potentsialom obshchego vida: Tochnyye resheniya i reduktsii [Nonlinear Schrödinger equation with dispersion and potential of the general form: Exact solutions and reductions]. Vestnik NIYaU MIFI, 2024. Vol. 13. No. 6. Pp. 394–402 (in Russian).
26. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Closed-form solutions of the nonlinear Schrödinger equation with arbitrary dispersion and potential. Chaos, Solitons & Fractals. 2025. Vol. 191. 115822.
27. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Nonlinear Schrödinger equations with delay: Closed-form and generalized separable solutions. Contemporary Mathematics. 2024. Vol. 5. No. 4. Pp. 5783–5794.
28. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Exact solutions and reductions of nonlinear Schrödinger equations with delay. Journal of Computational & Applied Mathematics. 2025. Vol. 462. 116477.
29. Polyanin A.D., Kudryashov N.A. Nelineynoye uravneniye Shredingera obshchego vida: Mnogofunktsional'naya model', reduktsii i tochnyye resheniya [Nonlinear Schrödinger equation of general form: Multifunctional model, reductions and exact solutions]. Vestnik NIYaU MIFI, 2025. Vol. 14. No. 1. Pp. 23–35 (in Russian).
30. Polyanin A.D., Zhurov A.I. Separation of Variables and Exact Solutions to Nonlinear PDEs. Boca Raton–London: CRC Press, 2022.
31. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R. Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
32. Aksenov A.V., Polyanin A.D. Methods for constructing complex solutions of nonlinear PDEs using simpler solutions. Mathematics, 2021. Vol. 9. No. 4. 345.
33. Gagnon L., Winternitz P. Lie symmetries of a generalized nonlinear Schrödinger equation. I. The symmetry group and its subgroups. J. Phys. A: Math. Gen., 1988. Vol. 21. No. 7. 1493.
34. Barannik A.F., Marchenko V.A., Fushchych V.I. O reduktsii i tochnykh resheniyakh nelineynykh mnogomernykh uravneniy Shredingera [On reduction and exact solutions of nonlinear multidimensional Schrödinger equations]. Theor. & Math. Physics, 1991. Vol. 87. No. 2. Pp. 220–234 (in Russian).
35. Ibragimov N.H. (ed.). CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Vol. 2. Applications in Engineering and Physical Sciences. Boca Raton: CRC Press, 1995.
36. Gagnon L., Winternitz P. Lie symmetries of a generalized nonlinear Schrödinger equation. II. Exact solutions. J. Phys. A: Math. Gen., 1989. Vol. 22. No. 5. 469.
37. Zhong W.-P., Xie R.-H., Belić M., Petrović N., Chen G. Exact spatial soliton solutions of the two-dimensional generalized nonlinear Schrödinger equation with distributed coefficients. Physical Review A, 2008. Vol. 78. 023821.
38. Seadawy A.R. Exact solutions of a two-dimensional nonlinear Schrödinger equation. Applied Mathematics Letters, 2012. Vol. 25. No. 4. Pp. 687–691.
39. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems. Boca Raton–London: CRC Press, 2018.
40. Polyanin A.D., Nazaikinskii V.E. Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists, 2nd ed. Boca Raton–London: CRC Press, 2016.

УДК 539.42

Численное моделирование раскрытия мембраны легкогазовой пушки

© 2025 г. М. В. Никульшин, И. В. Минаев, И. В. Смирнова, Д. Т. Юсупов, А. И. Кленов

¹ Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, Снежинск, 456770, Россия

Для исследования динамических свойств материалов чаще всего используется ударно-волновое нагружение, что позволяет изучать сжимаемость, фазовые превращения и ряд других явлений, происходящих в области высоких давлений и температур. В качестве систем ударно-волнового нагружения, как правило, используются взрывные нагружающие устройства и легкогазовые пушки. Проведены численные оценки величины давления раскрытия (разрушения) алюминиевых мембран в камере высокого давления пневматической легкогазовой пушки. Результаты расчета сравниваются с данными экспериментов. Расчетно-экспериментальные исследования проводились с целью получения величин разрушающего давления для партии мембран, отличающихся геометрией (толщиной и высотой непрорезной части), так как знание предельных нагрузок мембран позволяет прогнозировать давление в камере высокого давления и ускорение метаемого объекта. Дополнительно рассмотрено влияние на величину раскрытия давления мембран ряда факторов: механических свойств материала мембраны, количества насечек-концентраторов напряжений на поверхности мембраны, формы насечек и т.д. В результате проведенных расчетов показано, что основным фактором, влияющим на разброс давления раскрытия мембраны, являются свойства материала. Для уменьшения разброса давления раскрытия мембран необходимо проводить контроль свойств материала или использовать материал с более стабильными механическими свойствами. Выводы подтверждены сопоставлением результатов испытаний мембран и численных расчетов. Увеличение толщины мембраны при постоянной глубине насечек приводит к снижению давления раскрытия мембран и связано с ростом концентрации напряжений в радиальных насечках, что подтверждено экспериментальными данными.

Ключевые слова: мембрана, легкогазовая пушка, давление раскрытия, расчет, эксперимент.

Постановка задачи

Эффективным способом исследования сжатия конструкционных материалов при высоких давлениях и температурах считается динамическое нагружение. В качестве систем ударно-волнового нагружения используются взрывные нагружающие устройства и различные виды пушек, в том числе пневматические легкогазовые пушки (ЛГП) [1]. Метательные установки данного типа иногда называют баллистическими ударными трубами. В качестве рабочего газа в них обычно используют сжатый гелий или сжатый воздух. Несомненным преимуществом пневматических установок перед другими ускорителями является простота ее обслуживания и безопасность эксплуатации. В РФЯЦ-ВНИИТФ используются ЛГП калибра 44 мм (рис. 1) [2]. Установка состоит из камеры высокого давления (КВД), ствола баллистического, мембранного узла, камеры измерительной и камеры демпферной. Калибр ствола – 44 мм, длина – 6 м.

✉ М.В. Никульшин: M.V.Nikulshin@vniitf.ru

Поступила в редакцию: 02.10.2024

После доработки: 17.01.2025

Принята к публикации: 11.02.2025



Рис. 1. ЛГП калибра 44 мм

Камера высокого давления отделена от ствола мембраной, толщина которой подбирается исходя из требуемого значения давления в ней. Разрушение мембраны осуществляется посредством набора определенного давления в КВД, после чего сжатый газ ускоряет метаемый объект (МО) по баллистическому стволу в направлении измерительного узла. Предварительно, перед накачкой легкого газа в КВД, баллистический ствол вакуумируется через испытательный отсек, в котором расположен измерительный узел с исследуемым материалом и типовыми методиками регистрации быстропротекающих процессов.

Расчетно-экспериментальные исследования проводились с целью получения величин разрушающего давления для партии мембран, отличающихся геометрией (толщиной (S) и высотой непрорезной части (h)), так как знание предельных нагрузок мембран позволяет прогнозировать давление в КВД и ускорение МО. В ЛГП разработки РФЯЦ-ВНИИТФ используются разрывные мембраны с S от 3 до 7 мм. На одной из поверхностей мембран выполнено четыре диаметральные насечки под углом 45° друг к другу и глубиной насечек примерно 1 мм (рис. 2). Материал мембран – алюминиевый сплав АМц М ГОСТ 21631-76¹.

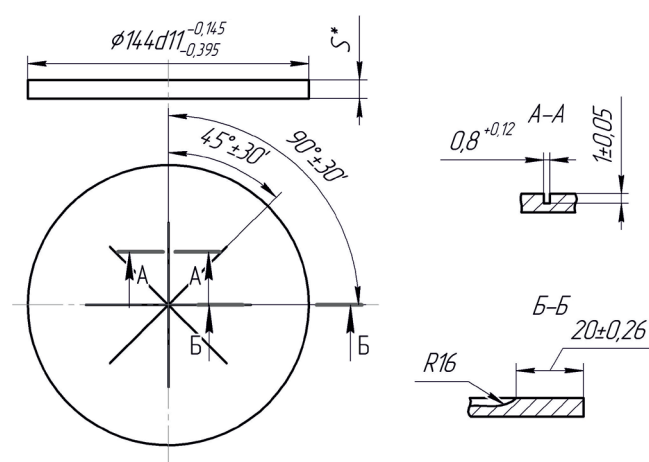


Рис. 2. Схема мембраны

Результаты экспериментов, представленные в табл. 1, показали, что мембраны, имеющие примерно одинаковые размеры (S и h), имеют различное давление раскрытия (отличие может составлять 15 %).

Типовая мембрана до и после выстрела показана на рис. 3.

Целью данной работы является численное решение задачи по определению давления раскрытия мембран, отличающихся геометрическими параметрами (S и h), с последующим сопоставлением ре-

¹ ГОСТ 21631-76. Листы из алюминия и алюминиевых сплавов. Технические условия.

Таблица 1. Экспериментальные данные давления раскрытия мембраны разной толщины

Геометрические размеры мембраны		Давление, МПа
S , мм	h , мм	
3.0	1.95	5.1–5.2
3.0	1.9	4.8
3.85	2.8	6.9
3.85	2.88	7.8
5.0	4.0	11.4–12.7
4.87	3.99	12.7
4.90	3.99	12.0
5.8	5.1	17.7
5.84	5.05	17.4

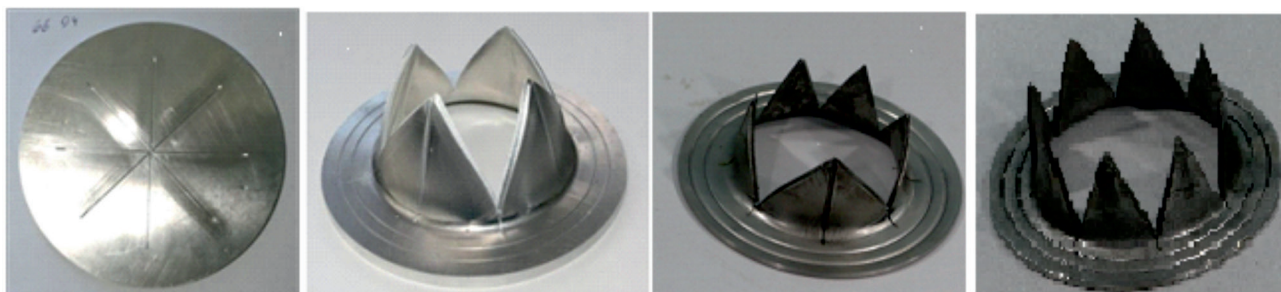


Рис. 3. Характерный вид мембраны до и после выстрела

зультатов, полученных при испытаниях, а также исследование влияния некоторых параметров (свойств материала, количества насечек на поверхности мембраны и вида насечек) на величину давления раскрытия мембран.

Описание расчетной модели

При проведении численных оценок используется трехмерная расчетная модель мембраны в виде сектора с углом 45° . Характерный размер восьмиузлового конечного элемента сетки равен 0.2 мм. Силовое взаимодействие между деталями моделируется с помощью контактных элементов. Мембраны выполнены из алюминиевого сплава АМц М, выбор которого обусловлен его высокой пластичностью. Механические характеристики сплава АМц М приведены в табл. 2 [3–7].

Мембрана моделировалась изотропным упругопластическим материалом, который позволяет задавать разные значения предела текучести для сжатия и растяжения в зависимости от пластической деформации. В расчетах задавались истинные диаграммы растяжения и сжатия материала АМц М [8–11]. В качестве критерия разрушения принималось достижение относительного удлинения материала после разрыва (δ).

Таблица 2. Механические характеристики сплава АМц М [3–7]

E , МПа	Растяжение		Сжатие		δ , %
	σ_t , МПа	σ_b , МПа	σ_t , МПа	σ_b , МПа	
$0.7 \cdot 10^5$	47–58.9	90–150	110–118.6	160–180	20–23

Примечание. E – модуль упругости материала; σ_t – предел текучести при растяжении и сжатии; σ_b – предел прочности при растяжении и сжатии; δ – относительное удлинение после разрыва.

Верификация расчетной модели проведена на сплошной мембране (без насечек), для которой существует приближенное аналитическое решение. Аналитическая оценка определения давления раскрытия мембраны осложняется тем, что на его величину оказывает влияние ряд параметров: толщина (допуск на толщину) мембраны, свойства материала, температура и т.д. При известных толщине, диаметре и материале можно определить весьма ориентировочно среднее давление раскрытия мембраны, а предельные значения – неизвестны [12, 13].

Аналитическую оценку давления раскрытия сплошных мембран проведем по формуле [13]:

$$P = \frac{8 \cdot S \cdot K_t \cdot \sigma_B}{D \cdot \sqrt{\frac{1+\delta}{\sqrt{1+\delta}-1}}},$$

где S – толщина мембраны (рис. 1), мм; K_t – температурный коэффициент; σ_B – предел прочности при растяжении материала; D – диаметр мембраны; δ – относительное удлинение материала после разрыва.

В табл. 3 приведены толщины рассматриваемых сплошных мембран, а также величины давления раскрытия, полученные численным и аналитическим путем.

Таблица 3. Результаты расчетов и аналитической оценки давления раскрытия сплошной мембраны

Параметры	Давление, МПа				
Толщина мембраны S , мм	1	2	3	4	5
Численная оценка	2.8	5.7	8.5	11.3	14.2
Аналитическая оценка*	2.6	5.2	7.8	10.4	13

* В расчетах принято: $K_t=1$ при температуре среды 20°, [13]; $\sigma_B=120$ МПа; $\delta=20$ %.

Отличие величины давления не превышает 10 %, что позволяет применить данный подход для численных оценок давления раскрытия мембран с насечками.

В [14, 15] предложена зависимость давления разрушения восьмилепестковой мембраны в зависимости от ее геометрических и прочностных параметров. Данная зависимость справедлива при отношении $S/D=0.01-0.08$, и $h=0.1-1.2$ мм. В расчетно-экспериментальных исследованиях участвуют мембраны с отношением $S/D=0.03-0.06$ и $h=1.95-3.99$ мм, что не позволяет использовать данную зависимость для аналитической оценки давления разрушения рассматриваемых мембран.

Исследование влияния некоторых параметров на величину давления раскрытия мембран

В табл. 4 приведены геометрические параметры рассматриваемых мембран, давления раскрытия мембран, полученные численным путем и в экспериментах. Результаты расчетов показали, что отличие численных оценок и экспериментальных данных составляет от 5 до 40 %.

Таблица 4. Сравнение давления раскрытия мембраны по результатам расчетов и экспериментов

Варьируемые геометрические размеры мембраны		Расчетное давление P , МПа	Экспериментальное давление $P_{\text{эк}}$, МПа
S , мм	h , мм		
5.0	4.0	11.6	11.2–12.2
3.85	2.88	7.1	7.8
3.85	2.8	6.7	6.3
3.0	1.95	3.8	5.1–5.2

Влияние механических характеристик материала мембраны

В табл. 5 приведены рассматриваемые механические характеристики материала и варьируемые геометрические размеры мембраны, а также приводятся давления раскрытия мембран, полученные численным путем. Результаты расчетов показывают, что давление раскрытия мембран прямо пропорционально величинам, характеризующим механические свойства материала. Отличие величин давления раскрытия мембран может составлять 1.6 раз в зависимости от заданных свойств материала в расчете, а от экспериментально полученных давлений отличаться в 0.8–1.45 раза.

Таблица 5. Результаты расчетов

Механические свойства материала мембраны при растяжении			Варьируемые геометрические размеры мембраны	
			$S=5 \text{ мм}, h=4 \text{ мм}$	$S=3.85 \text{ мм}, h=2.8 \text{ мм}$
σ_t , МПа	σ_b , МПа	Давление раскрытия мембраны, МПа		
$\delta=20 \%$	47	90	8.4	4.9
	47	110	10.7	6.2
	47	120	11.6	6.7
	49	127	12.1	7.5
	58	140	13.4	8.3
$\delta=23 \%$	47	90	8.9	5.3
	47	110	11.1	6.6
	47	120	12.0	7.3
	49	127	12.8	7.8
	58	140	13.9	8.6
$P_{\text{экс}}$, МПа			11.2–12.2	6.3

Влияние допуска на толщину мембраны

Расчеты проводились для мембран с постоянной $h=4 \text{ мм}$, в которых варьировалась толщина мембраны от 4.85 до 5.0 мм. На рис. 4 представлена зависимость давления раскрытия мембраны от допуска на толщину мембраны. Результаты расчетов показали незначительный разброс давления (примерно 4 %), что говорит о несущественном влиянии допуска на толщину мембраны на давление ее раскрытия.

Отметим, что с увеличением толщины мембраны S при $h=\text{const}$ давление раскрытия мембраны уменьшается (рис. 4), что связано с увеличением концентрации напряжений в радиальных насечках.

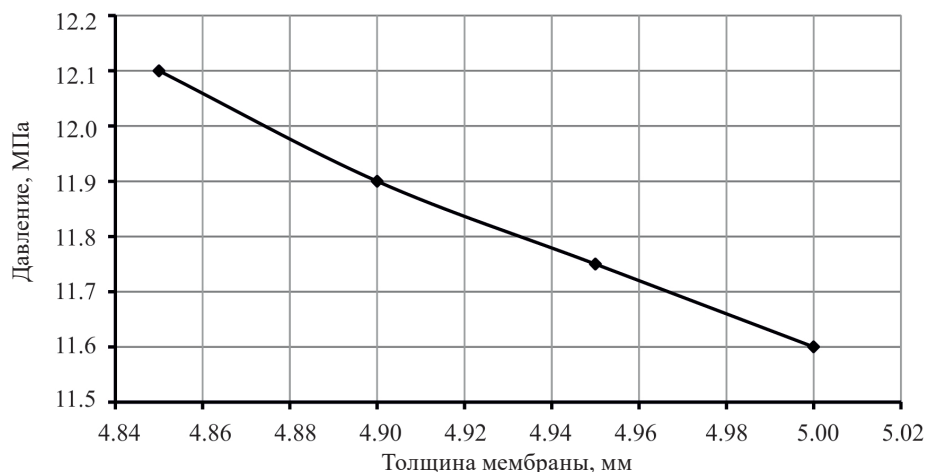


Рис. 4. Зависимость давления раскрытия мембраны от допуска на толщину мембраны

Данный результат подтверждается экспериментально (табл. 1), а также отмечается в [16]. Согласно [16], равномерное и полное раскрытие мембран с радиальными насечками достигается при отношении $h/S=0.5-0.6$. Результаты расчетов, представленные на рис. 5, показали, что мембрана работает более стабильно при отношении $h/S=0.5-0.75$, что требует экспериментального подтверждения.

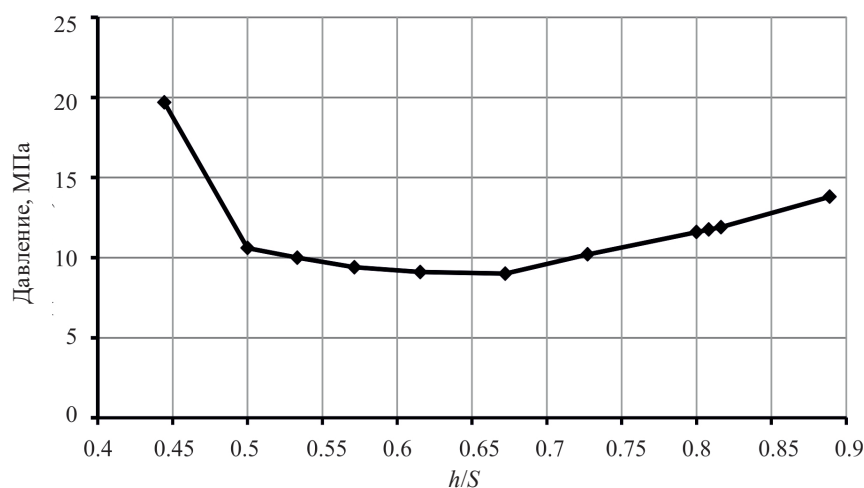


Рис. 5. График зависимости давления от отношения h/S

Влияние формы насечек

Влияние формы насечек на давление раскрытия мембран проводилось для мембран с V-образной и прямоугольной формой насечки (рис. 6).

Результаты расчетов показали несущественный разброс величины давления раскрытия мембраны (менее 5 %), что согласуется с результатами ранее проведенных работ по оценке влияния различных форм концентратора (полукруглой, U-образной и V-образной) на величину разрушающего давления трубы с надрезом. Таким образом, форма концентратора практически не влияет на величину разрушающего давления в зоне разрушения.

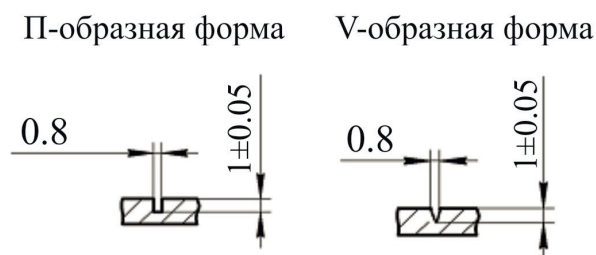


Рис. 6. Рассматриваемые формы насечек

Влияние количества радиальных насечек

Наиболее распространенными являются мембраны с двумя, тремя или четырьмя насечками на поверхности (рис. 7) [12, 16]. При оценке влияния количества насечек на работоспособность мембраны расчеты проводились для мембраны с геометрическими параметрами $S = 5$ мм и $h = 4$ мм.

На рис. 8 представлена зависимость давления раскрытия мембраны от количества насечек. Разброс давления не превышает 5 %, что говорит о незначительном вкладе данного параметра в давление раскрытия мембраны. Мембрана с двумя радиальными насечками раскрывается более равномерно [10].

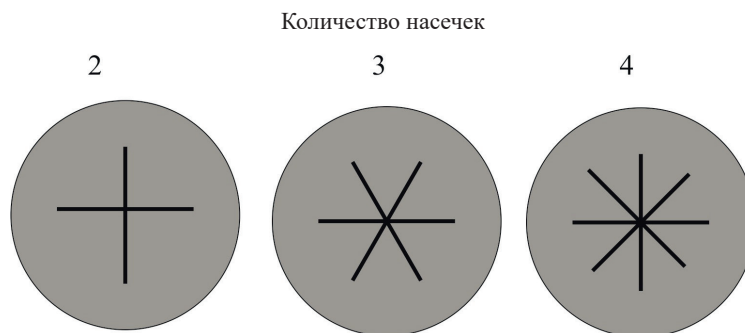


Рис. 7. Расчетные варианты



Рис. 8. Зависимость давления раскрытия мембраны от количества насечек

Мембрана с круговой насечкой

Среди разрывных мембран находят применение как мембраны с радиальными насечками, так и мембраны с круговыми насечками (рис. 9) [12, 16]. Мембрана с радиальными насечками проще в изготовлении [12, 16], однако при срабатывании она разрывается по одной-двум насечкам (или через одну насечку), и не происходит полного раскрытия мембраны (рис. 3). В этом смысле круговые насечки предпочтительнее, так как имеют более высокую точность срабатывания [12] и раскрываются полностью [13].

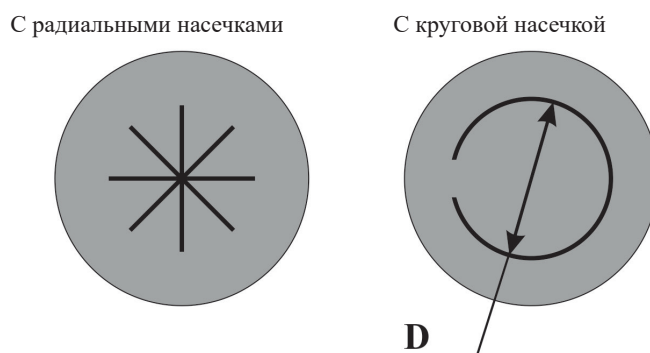


Рис. 9. Виды разрывных мембран

В ходе работы проведены численные оценки давления раскрытия мембран с круговой насечкой для различных рабочих диаметров (D) (рис. 9). Рассматривалась мембрана $S = 5$ мм и $h = 4$ мм, форма насечки – прямоугольная, материал АМц М. Результаты расчетов показали существенный разброс давления раскрытия мембран в зависимости от заданного ее рабочего диаметра (табл. 6). С увеличением рабочего диаметра в 1.5 раза (с 60 до 90 мм) давление раскрытия мембран увеличивается

Таблица 6. Результаты расчетов давления раскрытия в зависимости от диаметра круговой насечки

Рабочий диаметр (D), мм	60	80	90
Давление, МПа	8.5	12.7	14.9

в 1.7 раза. Разброс механических характеристик материала мембран приводит к существенному отличию величин давления раскрытия и может составлять 1.7 раза.

Заключение

В работе представлено расчетное исследование давления раскрытия мембран из алюминиевого сплава АМц М ГОСТ 21631-76, а также влияния ряда факторов на его величину.

В результате проведенных расчетов показано, что основным фактором, влияющим на разброс давления раскрытия мембраны, являются свойства материала. Для уменьшения разброса давления раскрытия мембран необходимо проводить контроль свойств материала или использовать материал с более стабильными механическими свойствами. Выводы подтверждены сопоставлением результатов испытаний мембран и численных расчетов.

Увеличение толщины мембраны при постоянной глубине насечек приводит к снижению давления раскрытия мембран, связано с ростом концентрации напряжений в радиальных насечках и подтверждено экспериментальными данными.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Никульшин М.В. – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, редактирование текста статьи;

Минаев И.В. – разработка концепции исследования, анализ экспериментальных данных, участие в проведении расчетов, обсуждении результатов, выявление закономерностей в исследованиях, редактирование текста статьи, подготовка заключения;

Смирнова И.В. – проведение численных расчетов, обработка результатов исследования, выявление закономерностей в исследованиях, анализ экспериментальных данных, подбор литературных источников, подготовка текста статьи;

Юсупов Д.Т. – формулировка идеи и целей исследования, постановка эксперимента;

Кленов А.И. – формулировка целей исследования, постановка эксперимента, выполнение экспериментальных работ, выполнение измерений, подбор литературных источников.

Список литературы

1. Новиков Л.С. Воздействие твердых частиц естественного и искусственного происхождения на космические аппараты: Учебное пособие. М.: Университетская книга, 2009. 104 с.
2. Гармашев А.Ю., Кленов А.И., Смирнов Е.Б., Юсупов Д.Т. Двухступенчатая легкогазовая пушка для изучения свойств веществ при высокоинтенсивных процессах. РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина, Снежинск // Сб. докладов и тезисов ВРЦ РАРАН, 2018. г. Саров.
3. Хоришкина Г.П., Михайлов Н.Я., Учаев А.А. Физико-механические свойства конструкционных материалов и некоторые современные методы их исследования: Справочное пособие. М.: ЦНИИАтоминформ, 1982. 239 с.
4. Авиационные материалы: Справочник в 9 т. Алюминиевые и бериллиевые сплавы / Под ред. Р.Е. Шалина. М.: Машиностроение, 1982. Т. 4. 625 с.

5. Материалы в машиностроении. Выбор и применение. Т. 1. Цветные металлы и сплавы: Справочник / Под ред. Л.П. Лужникова. М.: Машиностроение, 1997. 304 с.
6. Цветные металлы и сплавы: Справочник. Н. Новгород: Вента-2, 2001. 278 с.
7. Александров В.Г., Базанов Б.И. Справочник по авиационным материалам и технологии их применения. М.: Транспорт, 1979. 263 с.
8. Козаев В.П., Махутов Н.А., Гусенков А.П. Расчеты деталей машин и конструкций на прочность и долговечность. М.: Машиностроение, 1985. 224 с.
9. Надаи А. Пластичность. М: ОНТИ, 1936. 280 с.
10. Бакуменко В.И. Краткий справочник конструктора нестандартного оборудования. Т. 1. М.: Машиностроение, 1997.
11. Teng X., et al. Numerical prediction of fracture in the Taylor test // International Journal of Solids and Structures. V. 42. Iss. 9. P. 2929–2948.
12. Ольховский Н.Е. Предохранительные мембраны для защиты оборудования в химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности. М.: Химия, 1970. 176 с.
13. Водяник В.И., Малахов Н.Н., Полтавский В.Т., Шелюк И.П. Предохранительные мембраны: Справочное пособие. М.: Химия, 1982. 144 с.
14. Герасимов С.И., Ерофеев В.И., Каныгин И.И., Лапичев Н.В. Расчетно-экспериментальные исследования раскрытия лепестковых разрывных диафрагм легкогазовых баллистических установок // Вестник научно-технического развития, 2015. № 10 (98). С. 3–12.
15. Герасимов С.И., Ерофеев В.И., Каныгин И.И., Лапичев Н.В., Никитина Е.А. Исследование раскрытия лепестковых разрывных диафрагм легкогазовых баллистических установок // Приволжский научный журнал, 2015. № 4. С. 9–20.
16. Ольховский Н.Е. Предохранительные мембраны. М.: Химия, 1976. 152 с.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 131–140

Numerical simulation of light-gas gun membrane opening

M. V. Nikulshin [✉], I. V. Minaev, I. V. Smirnova¹, D. T. Yusupov, A. I. Klenov

¹Federal State Unitary Enterprise «Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russia Research Institute of Technical Physics», Snezhinsk, 456770, Russia

[✉]M.V.Nikulshin@vniitf.ru

Received October 02, 2024; revised January 17, 2025; accepted February 11, 2025

Shock-wave loading is the most commonly used way to study the dynamic properties of the materials since this permits the investigation into compressibility, phase transformations, and some other phenomena that take place in the high-pressure and high-temperature region. Explosive loading devices and light-gas guns are usually used as the shock-wave loading systems. The paper presents numerical evaluations of aluminum membrane opening (destruction) pressure in the high-pressure chamber of the pneumatic light-gas gun. The calculation results are compared with the experimental data. The simulations and experiments were aimed to evaluate the destruction pressure for a batch of membranes having different geometry, i.e. thickness and height of the unnotched part, because the data on the membrane load limits helps predict the pressure in the high-pressure chamber and the flyer acceleration. Besides, the effect of some factors on the membrane opening pressure is considered such as mechanical properties of the membrane material, the number of notches, i.e. stress concentrators on the membrane surface, the shape of notches, etc. The simulations demonstrated that the main factor affecting the spread in the membrane opening pressures is the material properties. To reduce this spread, one should

control the material properties and choose the materials with more stable mechanical properties. The conclusions were validated by comparing the membrane testing data with the simulated results. At constant notch depth, the increase in membrane thickness reduces the membrane opening pressure due to higher stress concentration in the radial notches, as evidenced by the experimental data.

Keywords: membrane, light-gas gun, opening pressure, calculation, experiment.

References

1. *Novikov L.S.* Vozdejstvie tverdyh chastic estestvennogo i iskusstvennogo proiskhozhdeniya na kosmicheskie apparaty. Uchebnoe posobie [Effect of solid particles of natural and artificial origin on space vehicles. Educational book]. Moscow, Universitetskaya kniga Publ., 2009. 104 p. (in Russian).
2. *Garmashev A.Yu., Klenov A.I., Smirnov E.B., Yusupov D.T.* Dvuhstupenchataya legkogazovaya pushka dlya izucheniya svoystv veshchestv pri vysokointensivnyh processah [Two-stage light-gas gun for studying substance properties in high-intensity processes]. FSUE «RFNC – VNIITF named after Academ. E.I. Zababakhin», Snezhinsk, Russia. Proceedings of VRC RARAS 2018, Sarov (in Russian).
3. *Khorshkina G.P., Mikhailov N.Ya., Uchaev A.A.* Fiziko-mekhanicheskie svoystva konstrukcionnykh materialov i nekotorye sovremennyye metody ih issledovaniya: Spravochnoe posobie. [Physical and mechanical properties of structural materials and some up-to-date research methods: Reference Guide]. Moscow, CSRIatominform Publ., 1982. 239 p. (in Russian).
4. *Aviacionnye materialy: Spravochnik v 9 tomah. Alyuminievye i berillievye splavy / Pod red. S.Halina R.E.* [Aviation materials: Reference book in 9 volumes. Aluminum and beryllium alloys. Edited by Shalin R.E.]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1982. Vol. 4. 625 p. (in Russian).
5. *Materialy v mashinostroenii. Vybory i primeneniye. T.1. Cvetnye metally i splavy: Spravochnik / Pod red. Luzhnikova* [Materials in machine engineering. Choice and applications. Vol. 1. Nonferrous metals and alloys: Reference book. Edited by Luzhnikov L.P.]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1997. 304 p. (in Russian).
6. *Cvetnye metally i splavy. Spravochnik* [Nonferrous metals and alloys: Reference book]. Nizhny Novgorod, Venta-2 Publ., 2001. 278 p. (in Russian).
7. *Aleksandrov V.G., Bazanov B.I.* Spravochnik po aviacionnym materialam i tekhnologii ih primeneniya. [Handbook of aircraft materials and their application technology]. Moscow, Transport Publ., 1979. 263 p. (in Russian).
8. *Kogaev V.P., Makhutov N.A., Gusenkov A.P.* Raschety detalej mashin i konstrukcij na prochnost' i dolgovechnost'. [Calculations of machine and structural components for strength and durability]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1985. 224 p. (in Russian).
9. *Nadai A.* Plastichnost'. [Plasticity]. Moscow, ONTI Publ., 1936. 280 p. (in Russian).
10. *Bakumenko V.I.* Kratkij spravochnik konstruktora nestandartnogo oborudovaniya [Quick-reference book of a designer of nonstandard equipment]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1997. Vol. 1 (in Russian).
11. *Teng X., et al.* Numerical prediction of fracture in the Taylor test. International Journal of Solids and Structures. Vol. 42. Iss. 9. Pp. 2929–2948.
12. *Olkhovsky N.E.* Predokhranitel'nye membrany dlya zashchity oborudovaniya v himicheskoy, neftekhimicheskoy i neftepererabatyvayushchej promyshlennosti [Safety diaphragms for protection of equipment in chemical, petrochemical and oil refining industries]. Moscow, Chemistry Publ., 1970. 176 p. (in Russian).
13. *Vodyanik V.I., Malakhov N.N., Poltavsky V.T., Shelyuk I.P.* Predokhranitel'nye membrany. Spravochnoe posobie. [Safety diaphragms Reference book]. Moscow, Chemistry Publ., 1982. 144 p. (in Russian).
14. *Gerasimov S.I., Erofeev V.I., Kanygin I.I., Lapichev N.V.* Raschetno-eksperimental'nye issledovaniya raskrytiya lepestkovykh razryvnykh diafragm legkogazovykh ballisticheskikh ustanovok [Computational-experimental investigations in opening of petal-type burst diaphragms in light-gas ballistic installations]. Vestnik nauchno-technicheskogo razvitiya, 2015. No. 10 (98). Pp. 3–12 (in Russian).
15. *Gerasimov S.I., Erofeev V.I., Kanygin I.I., Lapichev N.V., Nikitina E.A.* Issledovanie raskrytiya lepestkovykh razryvnykh diafragm legkogazovykh ballisticheskikh ustanovok [Investigations in opening of petal-type burst diaphragms in light-gas ballistic installations]. Privolzhsky nauchnyi zhurnal, 2015, No. 4. Pp. 9–20 (in Russian).
16. *Olkhovsky N.E.* Predokhranitel'nye membrany [Safety diaphragms]. Moscow, Chemistry Publ., 1976. 152 p. (in Russian).

УДК 519.67

Приближенное решение параметрического уравнения пятой степени

© 2025 г. К. Я. Кудрявцев

Институт интеллектуальных кибернетических систем, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Задача нахождения корней полиномов высоких степеней является сложной и в общем случае неразрешимой. Однако в ряде частных случаев корни могут быть найдены. В статье предлагается оригинальный подход поиска корней частного полинома пятой степени, содержащего параметр в качестве свободного члена. Попытка найти корни параметрического полинома пятой степени путем представления данного полинома в виде произведения полиномов третьей и второй степени, с последующим составлением системы уравнений для нахождения коэффициентов полиномов третьей и второй степени, приводит к очень громоздким уравнениям, сложность решения которых является очень высокой. Поэтому предлагается подход, идея которого состоит в том, что сначала выполняется поиск корней для фиксированных значений параметра. Далее, задавая небольшое приращение значению параметра, проводится анализ на изменение значений корней полинома. Это становится возможным в силу того, что параметр является свободным членом полинома, и его приращение приводит к сдвигу графика полинома вдоль вертикальной оси. Данный подход позволяет находить приближенные значения корней без использования итерационных численных методов.

Ключевые слова: полиномы высоких степеней, параметрический полином пятой степени, корни полинома.

Введение

Нахождение корней полиномов высоких степеней (четвертого и выше) является в общем случае неразрешимой задачей. Однако в ряде частных случаев корни могут быть найдены. Как правило, это делается путем отыскания одного корня и последующего понижения степени полинома путем деления его на линейный полином вида $P(x) = x - x_1$, где x_1 – найденный корень. Решению уравнений пятой степени посвящены работы [1, 2]. Имеется численный метод нахождения одного или двух действительных корней уравнения нечетной степени, который не требует задания начального приближения, и который справедлив для уравнения пятой степени [3]. Но он действует лишь при определенных ограничениях на коэффициенты уравнения. В данной статье предлагается подход нахождения корней частного полинома пятой степени. Корни находятся приближенно, без применения итерационных процедур.

Постановка задачи

Математической лигой НИЯУ МИФИ была сформулирована следующая задача: требуется решить уравнение

$$16x^4 - 20x^2 + 5 = \frac{a}{x} \quad (1)$$

для всех значений параметра a из диапазона $-1 \leq a \leq 1$.

✉ К.Я. Кудрявцев: KYKudryavtsev@mephi.ru

Поступила в редакцию: 24.12.2024

После доработки: 19.03.2025

Принята к публикации: 25.03.2025

Введя переменную $y = 2x$, запишем (1) следующим образом:

$$y^4 - 5y^2 + 5 = \frac{2a}{y}, \quad (2)$$

или

$$y^5 - 5y^3 + 5y - 2a = 0. \quad (3)$$

В [4] предлагается способ нахождения корней подобных уравнений путем представления (3) в виде произведения полиномов третьей и второй степеней:

$$y^5 - 5y^3 + 5y - 2a = (y^3 + b_2y^2 + b_1y + b_0) \cdot (y^2 + c_1y + c_0). \quad (4)$$

Раскрывая скобки в правой части выражения (4) и сравнивая коэффициенты при соответствующих степенях y , приходим к системе

$$\begin{cases} b_2 + c_1 = 0, \\ b_2c_1 + b_1 + c_0 = -5, \\ b_2c_0 + b_1c_1 + b_0 = 0, \\ b_1c_0 + b_0c_1 = 5, \\ b_0c_0 = -2a. \end{cases} \quad (5)$$

Если решить данную систему уравнений, то найти корни кубического уравнения можно с помощью формул Кардано [5, 6] или тригонометрической формулы Виета¹. Коэффициенты b_0, b_1, b_2 легко выражаются через c_0 и c_1 . Однако вычисление c_0 и c_1 связано с существенными трудностями. Выполняя эквивалентные преобразования, можно установить, что

$$c_1 = \frac{-(5c_0 - c_0^3) \pm \sqrt{(5c_0 - c_0^3)^2 + 16a^2c_0}}{4a}.$$

Коэффициент c_0 , в свою очередь, находится из уравнения

$$\frac{-(5c_0 - c_0^3) \pm \sqrt{(5c_0 - c_0^3)^2 + 16a^2c_0}}{4a} = \pm \sqrt{\frac{3c_0 + 5 \pm \sqrt{5c_0^2 + 10c_0 + 5}}{2}},$$

аналитическое решение которого вряд ли возможно. Применение итерационных методов [7–9] сопряжено со значительными трудностями, потребует хорошего начального приближения и большого количества итераций. Поэтому предлагается неитерационный метод приближенного поиска корней уравнения (3).

Метод приближенного поиска корней уравнения

В основе данного метода лежит тот факт, что в исходном полиноме

$$P(y, a) = y^5 - 5y^3 + 5y - 2a \quad (6)$$

¹ Тригонометрическая формула Виета: материал из Википедии – свободной энциклопедии [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ru.wikipedia.org/?curid=591745&oldid=140999290> (дата обращения 23.10.2024).

параметр a является свободным членом. Следовательно, при его изменении в диапазоне $-1 \leq a \leq 1$ происходит смещение графика кривой полинома $P(y, a)$ вдоль оси y .

Таким образом, если найти значение корней полинома при каком-то фиксированном значении параметра a , то потом можно будет находить значения других корней путем добавления небольшого приращения Δa и анализа изменения (смещения) корней, вызванного сдвигом графика кривой вдоль оси y .

Проведем анализ зависимости корней уравнения $P(y, a) = 0$ от параметра a . Для этого построим графики зависимости полинома $P(y, a)$ при различных значениях $-1 \leq a \leq 1$, которые представлены на рис. 1.

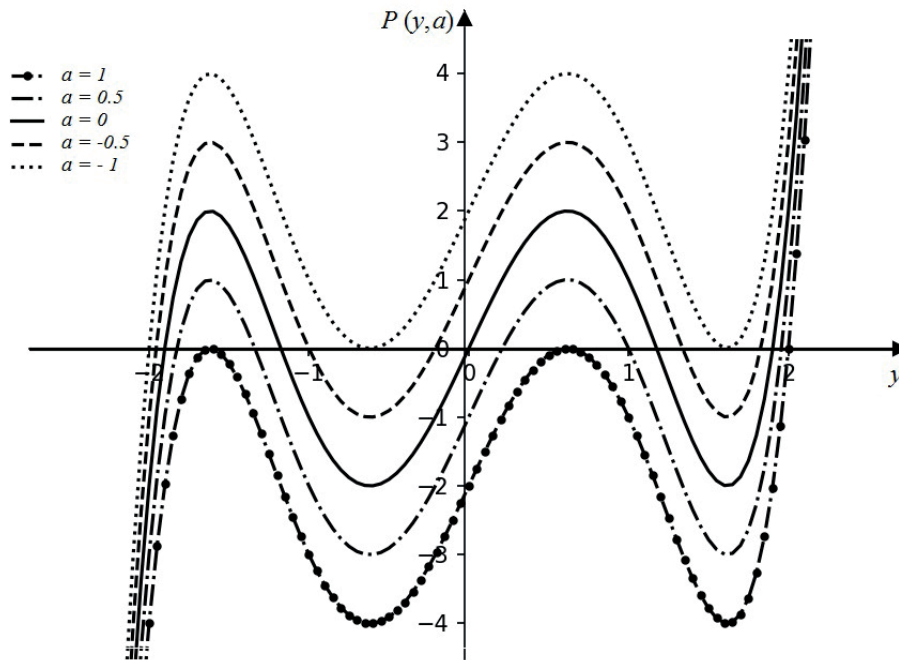


Рис. 1. Графики зависимости полинома $P(y, a)$ при различных значениях a

Из графиков видно, что при изменении параметра a происходит смещение кривой вдоль оси y . Поэтому надо найти корни полинома при некотором значении a , и далее будем находить значения корней путем добавления небольшого приращения Δa и анализа изменения (смещения) корней, вызванного сдвигом кривой вдоль оси y .

Заметим, что в уравнении (3) члены без параметра образуют полином по нечетным степеням, следовательно, при изменении параметра в пределах симметричного относительно нуля интервала достаточно определить корни на положительном или отрицательном полуинтервале – остальные корни будут противоположны найденным по знакам. Поэтому проведем анализ только для диапазона $0 \leq a \leq 1$.

Непосредственной подстановкой убеждаемся, что $P(2, 1) = 0$, т.е. $y = 2$, является корнем полинома (при $a = 1$). Кроме того, корни полинома $P(y, 1)$ совпадают с точками экстремумов, которые могут быть найдены из решения уравнения

$$P'(y, 1) = 5y^4 - 15y^2 + 5 = P'(y, 1) = y^4 - 3y^2 + 1 = 0,$$

а именно:

$$y_1 = -\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} \cong -1.618, \quad (7)$$

$$y_2 = +\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \cong +0.618. \quad (8)$$

Отметим, что корни $y_1 = -1.618$ и $y_2 = +0.618$ имеют кратность 2, а пятым корнем является $y_5 = 2$.

Если теперь положить $a = 1 - \Delta a$, где Δa – довольно малое положительное число, то значения корней уравнения $P(y, 1 - \Delta a) = 0$ также изменятся. Будем иметь пять корней:

$$z_1 = y_1 - \Delta y; \quad z_2 = y_1 + \Delta y; \quad z_3 = y_2 - \Delta y; \quad z_4 = y_2 + \Delta y; \quad z_5 = y_5 - \Delta y.$$

Подставляя z_5 в $P(y, 1 - \Delta a)$, выполняя преобразования и оставляя слагаемые, содержащие только Δy , будем иметь:

$$-5y_3^4 \Delta y + 15y_3^2 \Delta y - 5\Delta y + 2\Delta a = 0,$$

или, учитывая, что $y_5 = 2$,

$$\Delta y = \frac{2}{25} \Delta a.$$

Таким образом, в окрестности точки $y = 2$ значение корня будет равно

$$z_5 = 2 - \frac{2}{25} \Delta a \quad \text{или} \quad z_5 = 2 - \frac{2}{25} (1 - a). \quad (9)$$

Подстановка z_1 в $P(y, 1 - \Delta a)$ дает

$$(y_1 - \Delta y)^5 - 5(y_1 - \Delta y)^3 + 5(y_1 - \Delta y) - 2(1 - \Delta a) = 0.$$

Раскрывая скобки и оставляя слагаемые содержащие Δy и Δy^2 , будем иметь:

$$y_1^5 - 5y_1^4 \Delta y + 10y_1^3 \Delta y^2 - 5y_1^3 + 15y_1^2 \Delta y - 15y_1 \Delta y^2 + 5y_1 - 5\Delta y - 2 + 2\Delta a = 0.$$

Учитывая, что при $y_1 \cong -1.618$ $y_1^5 - 5y_1^3 + 5y_1 - 2 = 0$ и $5y_1^4 - 15y_1^2 + 5 = 0$, перепишем последнее уравнение в следующем виде:

$$10y_1^3 \Delta y^2 - 15y_1 \Delta y^2 + 2\Delta a = 0,$$

и, следовательно,

$$\Delta y = \sqrt{\frac{2}{15y_1 - 10y_1^3}} \Delta a \cong \sqrt{\frac{2}{18.088}} \Delta a \cong 0.3325 \sqrt{1 - a}.$$

Таким образом, в окрестности точки $y = -1.618$ новое значение корня будет равно

$$z_1 = -1.618 - 0.3325 \sqrt{1 - a}. \quad (10)$$

Рассуждая аналогичным образом, найдем выражения для корней z_2 , z_3 , и z_4 :

$$z_2 = -1.618 + 0.3325 \sqrt{1 - a}, \quad (11)$$

$$z_3 = 0.618 - 0.3325 \sqrt{1 - a}, \quad (12)$$

$$z_4 = 0.618 + 0.3325\sqrt{1-a}. \quad (13)$$

При $a=0$ корни находятся достаточно легко:

$$\begin{aligned} P(y,0) &= y^5 - 5y^3 + 5y = y(y^4 - 5y^2 + 5) = 0, \\ y_1 &= -\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{2}} \cong -1.902; \quad y_2 = -\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{2}} \cong -1.176; \quad y_3 = 0; \\ y_4 &= \sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{2}} \cong 1.176; \quad y_5 = \sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{2}} \cong 1.902. \end{aligned} \quad (14)$$

Для диапазона $-1 \leq a < 0$ корни будут противоположны по знакам корням, найденным выше для диапазона $0 < a \leq 1$. Таким образом, для $a=-1$ будем иметь:

$$y_1 = -2; \quad y_2 = -\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \cong -0.618; \quad y_3 = \sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} \cong 1.618; \quad (15)$$

причем, корни $y_2 = -0.618$ и $y_3 = +1.618$ имеют кратность 2.

Для $a = -1 + \Delta a$, где Δa – довольно малое положительное число, можем записать:

$$z_1 = -2 + \frac{2}{25}\Delta a \quad \text{или} \quad z_1 = -2 + \frac{2}{25}(1+a), \quad (16)$$

$$z_2 = -0.618 - 0.3325\sqrt{1+a}, \quad (17)$$

$$z_3 = -0.618 + 0.3325\sqrt{1+a}, \quad (18)$$

$$z_4 = 1.618 - 0.3325\sqrt{1+a}, \quad (19)$$

$$z_5 = 1.618 + 0.3325\sqrt{1+a}. \quad (20)$$

Таким образом, зависимость корней уравнения (3) от параметра a может быть представлена в виде набора формул (7) – (20).

Анализ зависимости корней полинома от параметра a показывает, что при $a \approx 1$ корни располагаются около точек:

$$y_1 = -\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} \cong -1.618; \quad y_2 = \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \cong 0.618; \quad y_3 = 2.$$

По мере уменьшения параметра a корни отходят («расползаются») от этих точек по выведенным формулам. От -1.618 корни движутся к -1.902 и -1.176 , а от 0.618 – к нулю и 1.176 . От точки $+2$ корень смещается влево к 1.902 .

При переходе параметра a в область отрицательных значений, т.е. при $-1 \leq a < 0$, корни начинают сосредотачиваться около точек -2 , -0.618 и 1.618 , и при $a=-1$ имеем три корня: -2 , -0.618 и 1.618 .

Учитывая первоначальную замену переменной $y=2x$, окончательно представим полученные результаты в виде табл. 1.

Таблица 1. Корни полинома при различных значениях параметра a

Параметр	Корни				
a	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
-1	-1	-0.309	-0.309	0.809	0.809
$-1 < a < 0$	$-1 + \frac{1}{25}(1+a)$	$-0.309 - 0.1662\sqrt{1+a}$	$-0.309 + 0.1662\sqrt{1+a}$	$0.809 - 0.1662\sqrt{1+a}$	$0.809 + 0.1662\sqrt{1+a}$
0	-0.951	-0.588	0	0.588	0.951
$0 < a < 1$	$-0.809 - 0.1662\sqrt{1-a}$	$-0.809 + 0.1662\sqrt{1-a}$	$0.309 - 0.1662\sqrt{1-a}$	$0.309 + 0.1662\sqrt{1-a}$	$1 - \frac{1}{25}(1-a)$
1	-0.809	-0.809	0.309	0.309	1

Выводы

В работе предложен неитерационный метод поиска корней частного полинома пятой степени, содержащего параметр в качестве свободного члена. Метод состоит в том, что сначала выполняется поиск корней для фиксированных значений параметра, которые, как правило, удастся найти достаточно легко. Далее, задавая небольшое приращение значению параметра, проводится анализ на изменение значений корней полинома. Это возможно в силу того, что параметр является свободным членом полинома, и его приращение приводит к сдвигу графика полинома вдоль вертикальной оси. Данный подход позволяет находить приближенные значения корней без использования итерационных численных методов.

В качестве дальнейших исследований представляется целесообразным попытаться решить уравнение (3) по известным формулам Эйткена или Эйлера [10, 11].

Финансирование

Автор заявляет об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Список литературы

1. Клейн Ф. Лекции об икосаэдре и решении уравнений пятой степени / Пер. с нем.; Под. ред. А.Н. Тюрин. М.: Наука, 1989. 336 с.
2. Михалкин Е.Н. О решении уравнения пятой степени // Известия вузов. Математика. 2009. № 6. С. 20–30.
3. Ростовцев Н.А. Об итерационном решении уравнений нечетных степеней с положительными коэффициентами // УМН, 1952. Т. 7. Вып. 3(49). С. 135–138.
4. Несмеев Ю.А. Решение уравнения пятой степени разложением левой части на произведение многочленов второй и третьей степени // Вестник Пермского университета. Сер.: Математика. Механика. Информатика. Вып. 1 (36), 2017. С. 21–28.
5. Гусак А.А., Гусак Г.М., Бричкова Е.А. Справочник по высшей математике. Минск: ТетраСистемс, 1999. 640 с.
6. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М.: Наука, 1973. 720 с.
7. Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 296 с.
8. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 636 с.
9. Кудрявцев К.Я., Прудников А.М. Методы оптимизации. М.: НИЯУ МИФИ, 2015, 140 с.

10. Шмойлов В.И., Кириченко Г.А. Решение алгебраических уравнений непрерывными дробями Никипорца // Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер.: Математика. Механика. Информатика, 2014. Т. 14. Вып. 4. Ч. 1. С. 428–439. DOI: 10.18500/1816-9791-2014-14-4-428-439.

11. Абызов А.Н. Метод Фаньяно решения алгебраических уравнений: исторический обзор и его развитие // Ученые записки Казанского университета. Сер.: Физико-математические науки, 2021. Т. 163. Кн. 3–4. С. 304–348. DOI: 10.26907/2541-7746.2021.3-4.304-348.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 141–148

Approximate solution of a parametric equation of the fifth degree

K. Ya. Kudryavtsev 

National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

 KYKudryavtsev@mephi.ru

Received December 24, 2024; revised March 19, 2025; accepted March 25, 2025

The problem of finding the roots of high-degree polynomials is complex and generally unsolvable. However, in a number of special cases, the roots can be found. The article proposes an original approach to finding the roots of a partial fifth-degree polynomial containing a parameter as a free term. An attempt to find the roots of a parametric fifth-degree polynomial by representing this polynomial as a product of third- and second-degree polynomials, with the subsequent compilation of a system of equations for finding the coefficients of third- and second-degree polynomials, leads to very cumbersome equations, the complexity of solving which is very high. Therefore, an approach is proposed, the idea of which is that the roots are first found for fixed values of the parameter. Then, by setting a small increment to the parameter value, an analysis is carried out for changes in the values of the roots of the polynomial. This becomes possible due to the fact that the parameter is a free term of the polynomial and its increment leads to a shift in the polynomial graph along the vertical axis. This approach allows finding approximate values of roots without using iterative numerical methods.

Keywords: polynomials of high degrees, parametric polynomial of the fifth degree, roots of the polynomial.

References

1. Klein F. Lekcii ob ikosaedre i reshenii uravnenij pyatoj stepeni / Per. s nem., pod. red. A.N. Tyurina [Lectures on the icosahedron and the solution of equations of the fifth degree / translated from German, edited by A.N. Tyurin]. Moscow, Nauka Publ., 1989. 336 p.
2. Mikhalkin E.N. O reshenii uravneniya pyatoj stepeni [On the solution of the equation of the fifth degree]. Izvestiya vuzov. Matematika, 2009. No. 6. Pp. 20–30 (in Russian).
3. Rostovtsev N.A. Ob iteracionnom reshenii uravnenij nechetnyj stepenij s polozhitel'nymi koefficientami [On the iterative solution of equations of odd degrees with positive coefficients]. UMN, 1952. Vol. 7. Iss. 3 (49). Pp. 135–138 (in Russian).
4. Nesmeev Yu.A. Reshenie uravneniya pyatoj stepeni razlozheniem levoj chasti na proizvedenie mnogochlenov vtoroj i tret'ej stepeni [Solution of the equation of the fifth degree by decomposing the left-hand side into a product of polynomials of the second and third degrees]. Vestnik Permskogo universiteta. Matematika. Mekhanika. Informatika, 2017. Iss. 1 (36). Pp. 21–28 (in Russian).
5. Gusak A.A., Gusak G.M., Brichikova E.A. Spravochnik po vysšej matematike [Handbook of Higher Mathematics]. Minsk, Tetrasystems Publ., 1999. 640 p. (in Russian).

6. Korn G., Korn T. Spravochnik po matematike (dlya nauchnyh rabotnikov i inzhenerov) [Handbook of Mathematics (for scientists and engineers)]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 720 p. (in Russian).
7. Lebedev V.I. Funkcional'nyj analiz i vychislitel'naya matematika [Functional analysis and computational mathematics]. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2005. 296 p. (in Russian).
8. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobelkov G.M. Chislennyye metody [Numerical methods]. Moscow, BINOM. Laboratoriya znaniy Publ., 2008. 636 p. (in Russian).
9. Kudryavtsev K.Ya., Prudnikov A.M. Metody optimizatsii [Optimization methods]. Moscow, NIYAU MIFI Publ., 2015, 140 p. (in Russian).
10. Shmoilov V.I., Kirichenko G.A. Reshenie algebraicheskikh uravnenij nepreryvnymi drobyami Nikiporca [Solution of algebraic equations by Nikiports continued fractions]. Izvestiya Saratovskogo universiteta. Novaya seriya. Seriya: Matematika. Mekhanika. Informatika, 2014. Vol. 14. Iss. 4. Part 1. Pp. 428–439. DOI: 10.18500/1816-9791-2014-14-4-428-439 (in Russian).
11. Abyzov A.N. Metod Fan'vano resheniya algebraicheskikh uravnenij: istoricheskij obzor i ego razvitie [Fagnano method for solving algebraic equations: historical review and its development]. Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Seriya Fiziko-matematicheskie nauki, 2021. Vol. 163. Book 3. Pp. 304–348. DOI: 10.26907/2541-7746.2021.3-4.304-348 (in Russian).

УДК 621.039.5

Математическое моделирование и стратегия использования остаточного ресурса расходомеров остановленных энергоблоков РБМК в процессе вывода АЭС из эксплуатации

© 2025 г. А. М. Загребяев¹, Е. В. Евстюхина¹, А. С. Ястребов¹, М. Г. Андреев²

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

² Курская АЭС – филиал АО «Концерн Росэнергоатом», Курская область, г. Курчатова, 307250, Россия

В процессе вывода из эксплуатации ядерных энергоблоков с реакторами РБМК в остановленных энергоблоках (помимо энергоресурса невыгоревшего топлива) остается невыработанный рабочий ресурс (ресурс по наработке) приборов, элементов оборудования и др. При определенных условиях этот ресурс может быть использован в работающих энергоблоках. Примером этому является ресурс по наработке расходомеров теплоносителя. Возникает задача о наилучшем использовании этого ресурса. В работе приводится математическая модель прогнозирования изменения ресурса расходомеров с учетом вероятности их выхода из строя и технологические ограничения на максимальную наработку. Рассматриваются различные стратегии использования ресурса расходомеров в соответствии с планом последовательного вывода энергоблоков из эксплуатации. В результате численных исследований выбирается наилучшая стратегия. Показано, что эффект экономии новых расходомеров зависит от назначенного максимального времени эксплуатации расходомера и может составлять от 40 до 100 %.

Ключевые слова: расходомер, ядерный энергоблок, вывод из эксплуатации, наработка, математическая модель, РБМК, планово-предупредительный ремонт.

Введение

При выводе из эксплуатации ядерных энергоблоков АЭС возникает целый комплекс задач, связанных с обеспечением безопасности процесса вывода из эксплуатации, а также оптимизацией использования остаточных ресурсов с целью экономии затрат на остающихся в работе энергоблоках [1–3].

К остаточным ресурсам относятся как энергоресурсы топлива в остановленном реакторе, так и невыработанный рабочий ресурс различного оборудования и приборов.

Чаще всего рассматриваются задачи экономии энергоресурса топлива за счет дожигания топлива в продолжающих работу реакторах. Например, в работах [4, 5] рассмотрен весь жизненный цикл РБМК от начальной загрузки до его остановки и использования недогоревшего топлива в других реакторах этой же АЭС. Показано, что повторное использование отработавшего топлива позволяет сэкономить значительное количество свежего топлива, от десятков до сотен и даже тысяч топливных сборок.

Вместе с тем, на остановленных энергоблоках может находиться оборудование, приборы, различного рода комплектующие, датчики и др., которые могут быть использованы в работающих энергоблоках, но имеющие определенный лимит на наработку или сроки годности. В этом случае возникает задача об оптимальной стратегии использования ресурса с учетом имеющегося графика вывода из эксплуатации оставшихся энергоблоков.

✉ А.С. Ястребов: yastrebostuff@gmail.com

Поступила в редакцию: 27.02.2025

После доработки: 12.03.2025

Принята к публикации: 18.03.2025

Для этой цели необходимо разработать математическую модель, которая позволяла бы прогнозировать изменение ресурса конкретного типа оборудования (или его элементов), приборов и др. в работающих энергоблоках и на основе использования математической модели решать задачи по наилучшему использованию ресурса.

В данной работе в качестве примера рассматривается постановка и решение задачи о наилучшем использовании расходомеров из остановленного реактора РБМК в продолжающих работу энергоблоках (отметим, что расходомеры остановленного реактора не являются радиоактивными, и технически возможно их использование).

Расход теплоносителя в реакторах типа РБМК является важнейшим лимитирующим параметром, определяющим безопасную работу реактора [5]. В реакторах канального типа, к которым относится реактор РБМК, контроль расхода теплоносителя осуществляется в каждом канале. Для работы при высоких температурах теплоносителя в технологических каналах контура многократной принудительной циркуляции разработан шариковый аксиальный расходомер ШТОРМ-32М, для измерения расхода в каналах системы управления и защиты – ШТОРМ-8А [6, 7]. В настоящее время на действующих энергоблоках АЭС с реакторами РБМК находятся в эксплуатации более 8000 расходомеров типа ШТОРМ-32М и около 1200 расходомеров типа ШТОРМ-8А. На рис. 1 представлена принципиальная конструкция шарикового расходомера ШТОРМ.

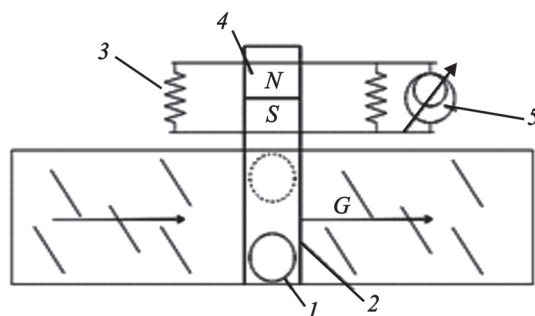


Рис. 1. Принципиальная конструкция расходомера ШТОРМ: 1 – ферромагнитный шарик; 2 – дорожка качения; 3 – индукционная катушка; 4 – магнит; 5 – измеритель тока

В состав комплектов расходомеров ШТОРМ входят датчики расхода ШАДР (упрощенно шарик и дорожка качения), МИП – магнитоиндукционные преобразователи частоты вращения шарика в электрический сигнал (магнит, индукционная катушка, измеритель сигнала).

Принцип измерения расхода заключается в следующем. Поток жидкости, проходя закручивающий аппарат с переменным по длине винтовым шагом, приобретает вращательное движение и обеспечивает вращение шара 1 по дорожке качения 2. При пересечении силовых линий магнита 4 шариком 1 в катушке 3 возникает ЭДС индукции, амплитуда сигнала зависит от скорости вращения шарика, а, следовательно, от расхода теплоносителя. Средний срок службы ШТОРМ-32М – 50000 ч, ШТОРМ-8А – 30000 ч¹. Шариковые расходомеры имеют ряд достоинств по сравнению с расходомерами переменного перепада давления.

Однако имеются и недостатки: необходимость индивидуальной градуировки, зависимость показаний шарикового расходомера от вязкости жидкости, деформации шарика, изношенности дорожки качения и др. [7]. При длительной эксплуатации расходомеров встает вопрос об их надежности с точки зрения временной стабильности их метрологических характеристик и безотказности работы. На практике проверка правильности работы расходомеров производится четыре раза между ППР (плано-

¹ Описание типа средства измерений. Расходомеры шариковые ШТОРМ-8А и ШТОРМ 32-М. Приложение к Свидетельству № 51060 об утверждении типа средств измерений. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.ktopoverit.ru/prof/opisanie/5706-13.pdf> (дата обращения: 20.12.2024).

во-предупредительными ремонтами) штатным средством «Измерительно-вычислительным комплексом диагностики шариковых расходомеров» (ИВК ДШР) в соответствии с выбранными критериям отбраковки. Отбракованные расходомеры заменяются на новые во время проведения ППР. Во время проведения ППР происходит также замена расходомеров, исчерпавших ресурс по наработке. Во время проведения ППР энергоблока в среднем из почти 1700 расходомеров заменяется порядка 100. В силу того, что за время эксплуатации ежегодно происходит замена десятков расходомеров во время ППР, одновременно в энергоблоке находятся расходомеры, имеющие разное время эксплуатации (наработки).

На рис. 2 приведены гистограммы распределения количества расходомеров по наработке в часах для разных энергоблоков АЭС с реакторами РБМК.

На рис. 3 приведены доли отбракованных по результатам диагностики расходомеров в зависимости от наработки в часах.

Из приведенных эксплуатационных данных видно, что распределение расходомеров по наработке неравномерно и зависит от конкретного энергоблока. Вероятность замены расходомера по неисправности при этом в среднем порядка 0.2.



Рис. 2. Распределение числа расходомеров по наработке для разных энергоблоков АЭС с реакторами РБМК

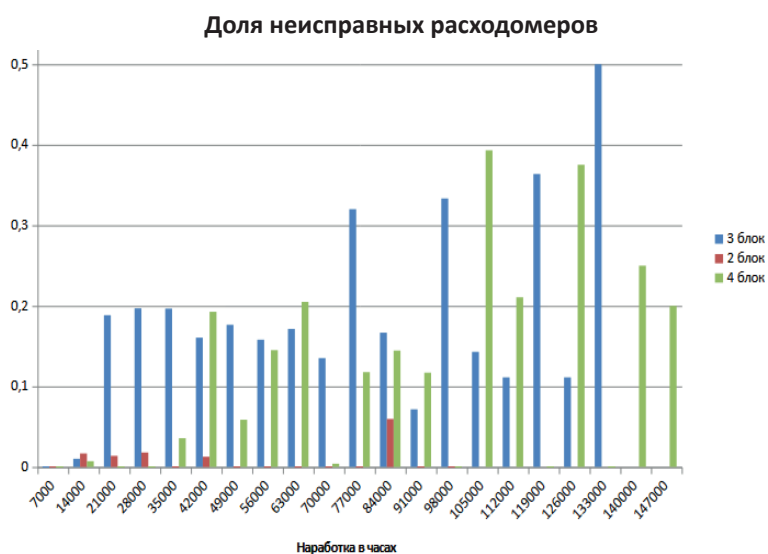


Рис. 3. Доля неисправных расходомеров для разных энергоблоков

Постановка задачи

Известен график вывода из эксплуатации энергоблоков с реакторами РБМК, например, 2 блок – 2028 г., 3 блок – 2033 г. (1 блок выведен из эксплуатации в 2023 г.). В выводимых из эксплуатации энергоблоках у расходомеров имеется ресурс по наработке. Отсюда возникает задача: каким образом использовать ресурс по наработке расходомеров, чтобы суммарная наработка расходомеров на момент вывода АЭС из эксплуатации была максимальна? Это равнозначно экономии новых расходомеров (с нулевой наработкой) в процессе вывода энергоблоков АЭС из эксплуатации. Для решения этой задачи необходимо создать математическую модель для прогноза распределения расходомеров по наработке (или в дальнейшем «спектра расходомеров по наработке») в действующих энергоблоках.

Математическая модель динамики спектра расходомеров по наработке

Пусть ядерный энергоблок с начала эксплуатации проработал k лет, а значит, был проведено k планово-предупредительных ремонтов, при которых часть расходомеров заменялась новыми. Рассмотрим спектр расходомеров по наработке на момент выхода в эксплуатацию после ППР (см. рис. 2). Судя по приведенным данным, максимальная наработка $\tau_{\max}$ 150000 ч. Разобьем эту ось на M интервалов (рис. 4). Величина каждого интервала равна числу часов работы реактора между ППР (порядка 8000) ч.

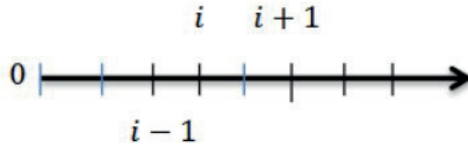


Рис. 4. Ось наработок

Баланс расходомеров в i -м внутреннем интервале наработок $2 \leq i < M$ в момент начала работы после k -го ППР будет

$$N_i^{(k)} = N_{i-1}^{(k-1)} - p_i^{(k-1)} N_{i-1}^{(k-1)} = (1 - p_i^{(k-1)}) N_{i-1}^{(k-1)}. \quad (1)$$

Смысл формулы следующий.

В i -й интервал наработки после k -го ППР перейдут за счет увеличения наработки расходомеры из $(i-1)$ интервала после $(k-1)$ ППР, за исключением тех, которые были извлечены как неисправные после $(k-1)$ ППР, а именно: $p_i^{(k-1)} N_{i-1}^{(k-1)}$, где $p_i^{(k-1)}$ – вероятность выгрузки по неисправности.

Для $i=1$ будет прибыль расходомеров с нулевой наработкой:

$$N_1^{(k)} = \Delta N^{(k)}. \quad (2)$$

Для последнего интервала $i=M$:

$$N_M^{(k)} = (1 - p_M^{(k)}) N_M^{(k-1)}. \quad (3)$$

Причем, $p_M^k = 1$, для всех k все расходомеры настолько выработали ресурс, что в этом интервале наработок их нет. Отметим, реальный ресурс значительно превышает средний (как видно из рис. 2), и расходомеры меняются по результатам диагностики.

Исходя из условия сохранения числа расходомеров, получим, что число расходомеров с нулевой наработкой должно равняться числу удаленных по результатам диагностики, т.е.:

$$N_1^{(k)} = \sum_{i=2}^M p_i^{(k-1)} N_{i-1}^{(k-1)}. \quad (4)$$

Таким образом, получим следующую систему уравнений для определения спектра на k -м ППР:

$$\begin{cases} N_1^{(k)} = \sum_{i=2}^M p_i^{(k-1)} N_{i-1}^{(k-1)} \\ N_i^{(k)} = (1 - p_i^{(k-1)}) N_{i-1}^{(k-1)} & 2 \leq i \leq M \\ N_M^{(k)} = (1 - p_M^{(k)}) N_M^{(k-1)} & p_M^{(k)} = 1 \text{ для } \forall k. \end{cases} \quad (5)$$

Начальное условие: $N_i^{(k-1)} = N_i^{(0)}$.

Численные исследования различных стратегий использования ресурсов расходомеров

Разработанная математическая модель легла в основу программного комплекса, позволяющего оценивать различные стратегии использования расходомеров из остановленного энергоблока в работающих. Созданный на базе математической модели программный комплекс позволяет реализовать различные стратегии использования ресурсов расходомеров при реализации заданного графика вывода из эксплуатации АЭС. Рассматривались следующие варианты (рис. 5):

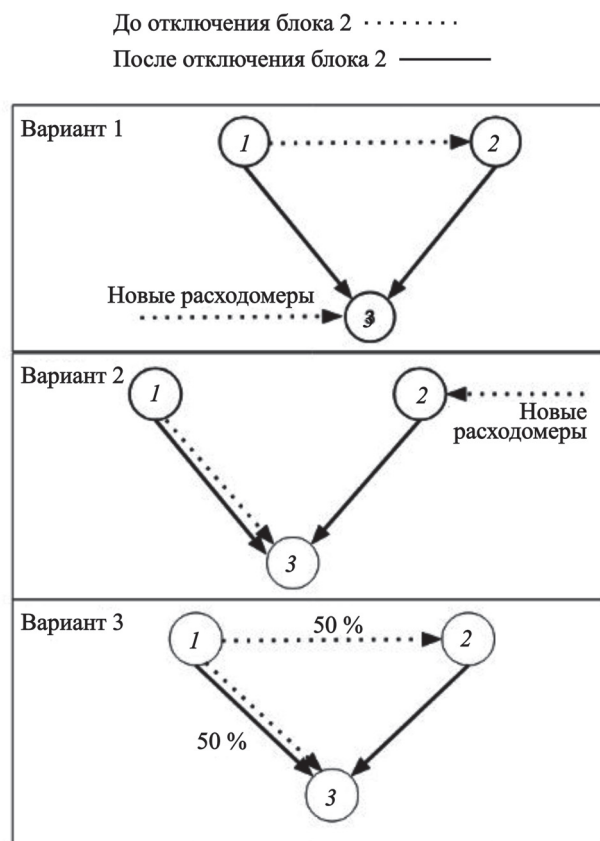


Рис. 5. Визуализация стратегий

Вариант 1

1. Расходомеры из блока 1 загружаются в блок 2.
2. Расходомеры в блоке 3 заменяются только новыми.
3. После отключения блока 2 исправные расходомеры из него вместе с оставшимися расходомерами из блока 1 начинают подгружаться в блок 3.

Вариант 2

1. Расходомеры из блока 1 сразу направляются в блок 3.
2. Для блока 2 применяются только новые расходомеры.
3. После отключения блока 2 исправные расходомеры из него продолжают использоваться в блоке 3 вместе с расходомерами из блока 1.

Вариант 3

1. Расходомеры из блока 1 распределяются на две равные части между блоками 2 и 3.
2. После отключения блока 2 оставшиеся исправные расходомеры из него начинают подгружаться в блок 3.

На начало планирования блок 1 остановлен, блоки 2 и 3 предполагается остановить, соответственно через 5 и 10 лет. Отметим, что во всех случаях из остановленных энергоблоков извлекаются на замену расходомеры с наименьшей наработкой к моменту замены. Если в остановленных энергоблоках 1 и 2 расходомеры заканчиваются раньше, чем иссякает потребность в расходомерах из этих блоков для использования в блоке 3, то вместо них используются новые расходомеры.

Для каждой стратегии были проведены расчеты, при этом предполагалось, что вероятность выхода расходомера из строя линейно зависит от наработки. Основные результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1. Итоги численных расчетов для трех стратегий при различных ограничениях на наработку $T_{\max}$

Номер стратегии	Экономия расходомеров, %		
	$T_{\max} = 50$ тыс. ч	$T_{\max} = 75$ тыс. ч	$T_{\max} = 100$ тыс. ч
1	31	61	66
2	31	66	60
3	12	30	100

Заключение

В данной работе исследована возможность использования ресурса по наработке расходомеров в энергоблоках с реакторами РБМК-1000 при выводе АЭС из эксплуатации. Разработана математическая модель прогноза изменения спектра по наработке расходомеров с учетом вероятности выхода расходомеров из строя. Поставлена задача по поиску наилучшей стратегии использования остаточного ресурса расходомеров при выводе АЭС из эксплуатации. Рассмотрены три возможные стратегии, и показана их эффективность в плане экономии новых расходомеров. Каждый из рассмотренных вариантов дает экономию в среднем порядка 40–60 % новых расходомеров, что составляет величину около 600 расходомеров. Разработанная математическая модель может быть применена для исследования эффективности использования остаточного ресурса по наработке и других приборов и устройств при выводе АЭС из эксплуатации.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Загребаев А. М. – разработка математической модели; формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; подбор литературных источников.

Евстюхина Е. В. – анализ нормативной базы; постановка эксперимента; разработка концепции исследования.

Ястребов А. С. – анализ нормативной базы; выполнение экспериментальных работ, обработка результатов; проведение численных расчетов; редактирование текста статьи.

Андреев М. Г. – первичная обработка результатов исследования; участие в проведении исследования

Список литературы

1. Кузнецов В.М., Юрчевский Е.Б., Амерханов Р.А., Спиридонов В.П. Вопросы обеспечения безопасности и технические аспекты вывода из эксплуатации объектов использования атомной энергии // Энергосбережение и водоподготовка, 2022. № 2 (136). С. 57–69.
2. Хомяков Д.Н., Меньшиков В.Ф. Снятие с эксплуатации энергоблоков АЭС // Сб. докладов Всероссийской конференции «Энергетика России в 21 веке: проблемы и научные основы устойчивого и безопасного развития», Иркутск, 14–17 сентября 2000 г. Иркутск, 2000.
3. Канашов Б.А., Кузьмин И.В., Костюченко А.Н., Перепелкин С.О., Чесанов В.В. Оценка остаточного ресурса ТВС из остановленных энергоблоков РБМК-1000 для дожигания на действующих энергоблоках АЭС // Сб. докладов X Международного форума «Безопасность ядерных технологий: транспортирование радиоактивных материалов – «Атомтранс-2015», С.-Петербург, 5–9 октября 2015 г. СПб., 2015.
4. Федосов А.М. Оптимальное использование топлива при выводе АЭС с РБМК из эксплуатации // Атомная энергия, Т. 102. Вып. 5. С. 284–290.
5. Краюшкин А.В., Новиков В.Г., Федосов А.М., Ушпурас Е., Римкявичус С., Кривошеин Г.С. Оптимальное дожигание топлива 1-го энергоблока в реакторе 2-го энергоблока Игналинской станции // Физические проблемы топливных циклов ядерных реакторов. Материалы XIV семинара по проблемам физики реакторов. Москва, 4–8 сентября 2006 г. М.: МИФИ, 2006. С. 100–102.
6. Абрамов М.А., Авдеев В.И., Адамов Е.О. и др. Канальный ядерный энергетический реактор РБМК. М.: ГУП НИКИЭТ, 2006. С. 632.
7. Лысков Б.В., Прозоров В.К. Термометрия и расходомерия ядерных реакторов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 120 с.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 149–156

Mathematical modeling and strategy for utilizing the remaining resource of flow meters in shutdown RBMK power units during the decommissioning of nuclear power plants

A. M. Zagrebaev¹, E. V. Evstyukhina¹, A. S. Yastrebov^{1,✉}, M. G. Andreev²

¹ National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

² Kursk NPP – Branch of JSC «Rosenergoatom Concern», Kurchatov, Kursk Region, 307250, Russia

✉ yastrebovstuff@gmail.com

Received February 27, 2025; revised March 12, 2025; accepted March 18, 2025

During the decommissioning of nuclear power units with RBMK reactors, in addition to the energy resource of unburned fuel, there remains an unutilized operational resource (service life) of instruments, equipment elements, and other components in the shutdown units. Under certain conditions, this resource can be used in operating power units. An example of this is the remaining service life of coolant flow meters. The problem arises of optimizing the utilization of this resource. This study presents a mathematical model for predicting changes in the service life of flow meters, considering the probability of their failure and technological constraints on maximum operating hours. Various

strategies for using the flow meter resource are examined in accordance with the planned sequential decommissioning of power units. Numerical studies allow the selection of the optimal strategy. It is shown that the savings effect from reusing flow meters depends on the assigned maximum operational time and can range from 40 to 100 %.

Keywords: flow meter, nuclear power unit, decommissioning, service life, mathematical model, RBMK, preventive maintenance.

References

1. *Kuznetsov V.M., Yurchevsky E.B., Amerkhanov R.A., Spiridonov V.P.* Voprosy obespecheniya bezopasnosti i tekhnicheskie aspekty vyvoda iz ekspluatatsii ob'ektov ispol'zovaniya atomnoy energetiki [Issues of safety assurance and technical aspects of decommissioning nuclear energy facilities]. *Energoberezhenie i vodopodgotovka*, 2022. No. 2 (136). Pp. 57–69 (in Russian).
2. *Khomyakov D.N., Menshikov V.F.* Snyatie s ekspluatatsii energoblokov AES [Decommissioning of nuclear power plant units]. *Sbornik dokladov Vserossiyskoy konferentsii «Energetika Rossii v XXI veke: problemy i nauchnye osnovy ustoychivogo i bezopasnogo razvitiya»*, Irkutsk, 14–17 sentyabrya 2000. [Collection of reports of the All-Russian conference «Energy of Russia in the 21st century: problems and scientific foundations of sustainable and safe development», Irkutsk, September 14–17, 2000], Irkutsk. 2000 (in Russian).
3. *Kanashov B.A., Kuzmin I.V., Kostyuchenko A.N., Perepelkin S.O., Chesanov V.V.* Otsenka ostatochnogo resursa TVS iz ostanovlennykh energoblokov RBMK-1000 dlya dozhiganiya na deystvuyushchikh energobloках AES [Assessment of the remaining resource of fuel assemblies from shutdown RBMK-1000 power units for further burning in operating NPP units]. *Sbornik dokladov X Mezhdunarodnogo foruma «Bezopasnost' yadernykh tekhnologiy: transportirovanie radioaktivnykh materialov – Atomtrans-2015»*, S.-Peterburg, 5–9 oktyabrya 2015 g. [Collection of reports of the X International Forum «Safety of Nuclear Technologies: Transportation of Radioactive Materials – «Atomtrans-2015», St. Petersburg, October 5–9, 2015]. St. Petersburg, 2015 (in Russian).
4. *Fedosov A.M.* Optimal'noe ispol'zovanie topliva pri vyvode AES s RBMK iz ekspluatatsii [Optimal fuel utilization during the decommissioning of RBMK nuclear power plants]. *Atomnaya energiya*, Vol. 102, Iss. 5. Pp. 284–290 (in Russian).
5. *Krayushkin A.V., Novikov V.G., Fedosov A.M., Ushpuras E., Rimkyavichus S., Krivoshein G.S.* Optimal'noe dozhiganie topliva 1-go energobloka v reaktore 2-go energobloka Ignalinskoy stantsii [Optimal fuel burning of the first unit in the reactor of the second unit of the Ignalina NPP]. *Fizicheskie problemy toplivnykh tsiklov yadernykh reaktorov. Materialy XIV seminar po problemam fiziki reaktorov*, Moskva, 4–8 sentyabrya 2006 g. [Physical Problems of Nuclear Reactor Fuel Cycles. Proceedings of the XIV Seminar on Reactor Physics Problems. Moscow, September 4–8, 2006]. MEPhI, 2006. Pp. 100–102 (in Russian).
6. *Abramov M.A., Avdeev V.I., Adamov E.O., et al.* Kanal'nyy yadernyy energeticheskiy reaktor RBMK [RBMK Channel-Type Nuclear Power Reactor]. Moscow, GUP NIKIET Publ., 2006. P. 632 (in Russian).
7. *Lysikov B.V., Prozorov V.K.* Termometriya i raskhodometriya yadernykh reaktorov [Thermometry and Flow Measurement of Nuclear Reactors]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1985. P. 120 (in Russian).

УДК 681.516.33

Алгоритм автоматического управления нейтронными параметрами и теплотехническим оборудованием реакторной установки со свинцовым теплоносителем в пусковых режимах

© 2025 г. С. В. Епифанов, А. О. Толоконский

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

По мере развития уровня автоматизации ядерных реакторов, постепенно автоматические регуляторы от уровня поддержания отдельных параметров перешли к групповому и затем к функционально-групповому управлению. Алгоритмы управления современных реакторных установок используют функционально-групповое управление, позволяющее вместо прямых команд формировать команды общеблочного уровня. На данный момент ведется проектирование и строительство новой реакторной установки со свинцовым теплоносителем. Для отработки алгоритмов нормальной эксплуатации и алгоритмов безопасности был создан стенд моделирования, позволяющий установить на него разработанные модели реакторной установки (технологический объект управления), модели аппаратуры, технологического оборудования и объединить их в единой среде взаимодействия. В данной статье рассматривается возможность применения и реализации алгоритма управления новой реакторной установкой со свинцовым теплоносителем, которая дополняет штатные алгоритмы системы управления и защиты (СУЗ) по нейтронным и технологическим параметрам. Для этого на стенде моделирования была установлена подготовленная заранее модель реакторной установки (РУ) и модели аппаратуры СУЗ. Модели объекта управления и СУЗ были дополнены интерфейсом обмена и алгоритмом, позволяющим управлять режимами работы технологического оборудования на предпусковой и пусковой стадиях работы РУ. В результате был разработан алгоритм, позволяющий исключить непосредственное воздействие оператора РУ на технологические операции при нормальной эксплуатации с возможностью перехода в ручной режим при появлении условий, запрещающих дальнейшее выполнение операций.

Ключевые слова: реакторная установка, автоматическое регулирование, подкритический уровень, оборудование, пуск.

Введение

В современном мире основное строительство энергоблоков атомных электростанций ведется с ядерными энергетическими реакторными установками водо-водяного типа. В Российской Федерации такими установками являются реакторы поколения 3+ типа ВВЭР [1], технология разработки и изготовления которых достаточно хорошо отработана [2], но все равно требует целевой финальной проработки для каждого энергоблока. На данный момент есть понимание, что для оптимального использования всех запасов уранового топлива необходимо вовлекать в оборот природный или обедненный уран-238 [3]. Так как для деления этого изотопа требуются нейтроны с энергией более 1 МэВ, принято решение о разработке и строительстве реакторов со спектром нейтронов, в основном находящихся в нужном диапазоне энергий (реакторов на быстрых нейтронах), и проработаны вопросы двухкомпонентной энергетики [4].

✉ С.В. Епифанов: serpiph@yandex.ru

Поступила в редакцию: 23.02.2025

После доработки: 11.03.2025

Принята к публикации: 25.03.2025

В России в настоящее время успешно работают реакторы с натриевым теплоносителем (БН-600, БН-800), но для более безопасной работы, а также для реализации возможности маневрирования мощностью реактора ведется строительство реакторной установки поколения 4 со свинцовым теплоносителем (БРЕСТ-ОД-300) [5–7]. При работе на энергетическом уровне для данной реакторной установки разработаны схемы автоматического и ручного управления, включающие поддержание параметров всей реакторной установки, как нейтронных, так и теплотехнических. Для повышения уровня автоматизации реакторов со свинцовым теплоносителем предложен дополнительный уровень исполнения алгоритмов на этапе пуска, включающий не только поддержание заданных параметров работы, но и управление режимами оборудования, включая подготовку и пуск агрегатов энергоблока [8].

Материалы и методы

В качестве технологического объекта управления (ТОУ) выбрана реакторная установка со свинцовым теплоносителем средней мощности. В разработанной математической компьютерной модели установки на базе расчетных алгоритмов FACS-BR [9] реализованы следующие подмодели:

- активная зона реакторной установки;
- первый контур со свинцовым теплоносителем и главными циркуляционными насосными агрегатами (ГЦНА) и парогенераторами;
- второй контур с упрощенной моделью турбогенератора и основным технологическим оборудованием (клапаны, задвижки, насосы).

Для управления сервоприводами стержней-поглотителей в активной зоне и технологическим оборудованием первого и второго контура в модели предусмотрены точки управления и контроля, позволяющие изменять работу элементов и имитировать показания датчиков контроля.

Модель ТОУ запускается совместно с моделями системы управления и защиты для замыкания контура управления. Совместная работа моделей ТОУ и СУЗ выполняется в среде обмена данными КРОСС [10], позволяющая обеспечить передачу и диагностику исполняемых моделей в реальном времени.

Результаты

Для создания автоматического управления состоянием технологического оборудования было решено разработать внешний модуль управления, взаимодействующий с рабочими моделями ТОУ и СУЗ, чтобы уменьшить объем изменений основных схем управления и исключить этап верификации существующих алгоритмов.

В штатные модели были добавлены дополнительные интерфейсы, дополнившие штатные алгоритмы возможностью автоматического включения, отключения или установки различных режимов технологического оборудования. После изменения конфигурации интерфейсов обмена распределенная база данных реального времени была расширена новыми переменными и добавлена передача новых данных между компьютерными узлами, на которых исполняются компьютерные модели. Общая схема взаимодействия алгоритмов между собой представлена на рис. 1.

На следующем этапе подготовлены алгоритмы передачи команд в рабочие модели ТОУ и СУЗ и получения данных из моделей для анализа, с использованием среды РБДРВ. Данные алгоритмы позволяют контролировать состояние оборудования с учетом различных временных задержек при прохождении команд и интервалов времени, необходимых для достижения ожидаемого состояния в моделях.

После подготовки необходимых алгоритмических блоков разработан алгоритм, описывающий требуемые при выводе реактора в критическое состояние операции по управлению оборудованием. Данный алгоритм дополнен командами управления штатными автоматическими регуляторами, имеющимися в модели системы управления и защиты. В полученном алгоритме учтены необходимости в выполнении промежуточных этапов, при которых работа штатных автоматических алгоритмов приостанавливается, выполняются переключения на оборудовании с контролем выполнения операций. После подтверждения успешного выполнения операций дается команды на продолжение работы штатных автоматических регуляторов.

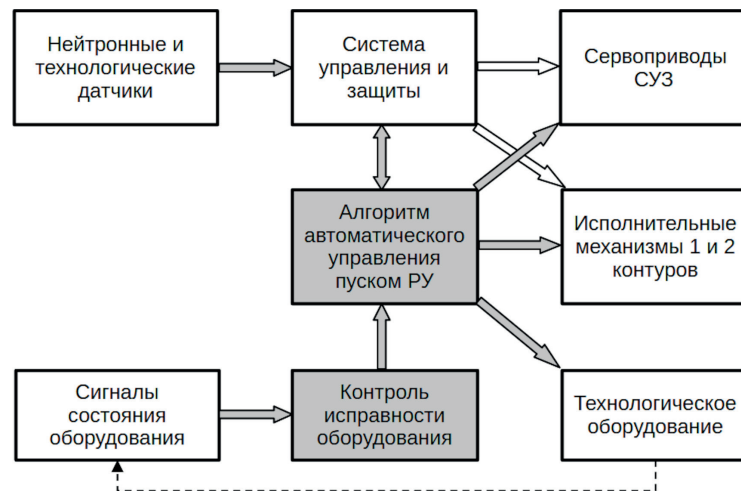


Рис. 1. Общая схема взаимодействия моделей штатных регуляторов, модели РУ и алгоритма управления пуском РУ. Используемые сигналы и разработанные алгоритмы выделены серым цветом

Разработанный алгоритм проверен в различных режимах:

- штатное выполнение всех операций по выводу реакторной установки на уровень 1 % от номинального уровня мощности;
- несанкционированное изменение режимов работы оборудования путем подачи ручных команд на изменение их режимов работы;
- ручное частичное включение оборудования с последующим включением разработанного автоматического алгоритма в работу.

В процессе выполненных проверок замечаний в работе алгоритмов не обнаружено. Пример работы алгоритма при подъеме мощности РУ приведен на рис. 2.

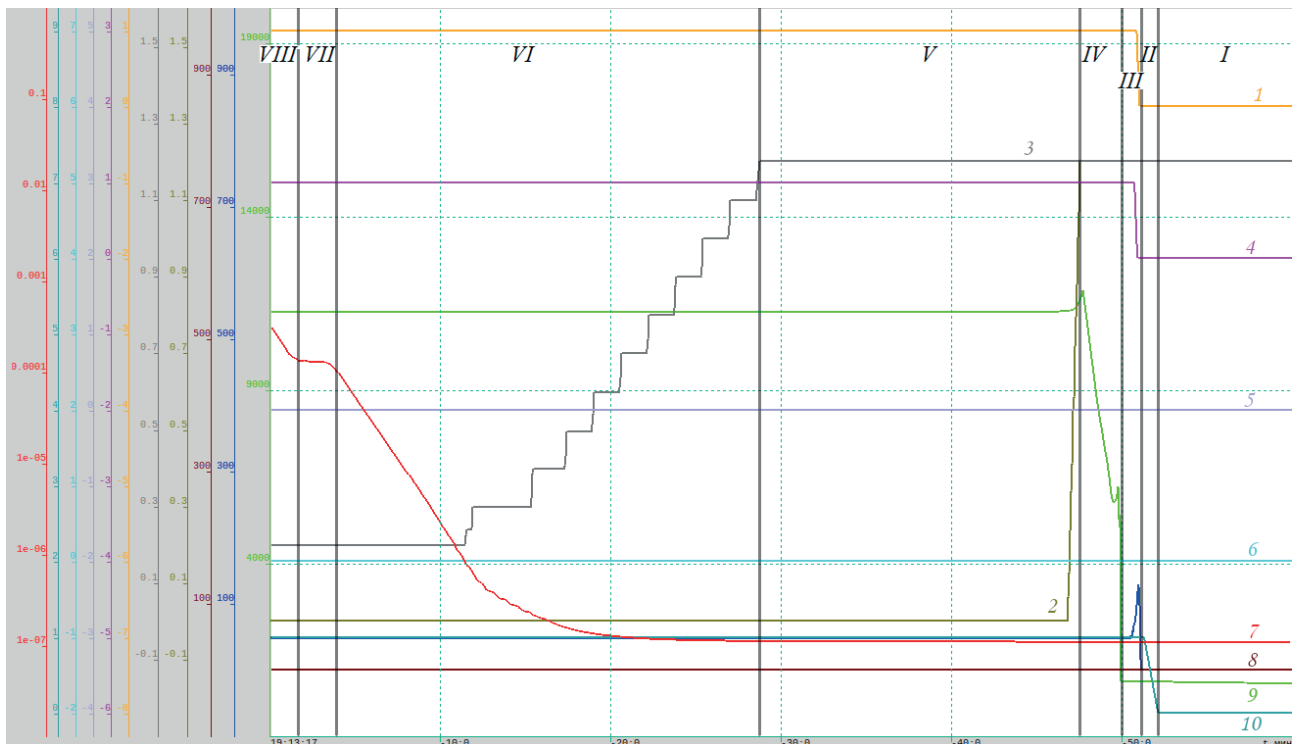


Рис. 2. Пример работы модели автоматического управления технологическим оборудованием: 1 – степень открытия ОЗПВ1 петли 1; 2 – положение стержня 1А3; 3 – положение стержня 1 КР; 4 – степень открытия ОЗПВ2 петли 1; 5 – положение РПК 1ПГ петли 1; 6 – положение РПК 2ПГ петли 1; 7 – нейтронная мощность РУ; 8 – расход через ПЭН1; 9 – расход через ГЦНА; 10 – положение клапана рециркуляции

На рисунке указаны следующие этапы:

- I – проверка состояния аппаратуры;
- II – открытие клапана рециркуляции питательной воды;
- III – включение насосов циркуляции второго контура;
- IV – включение насосов первого контура;
- V – взвод системы АЗ и проверка готовности оборудования к началу подъема мощности;
- VI – включение пускового регулятора;
- VII – выход на промежуточный уровень и проверка оборудования;
- VIII – включение пускового регулятора.

Заключение

В настоящей работе получена модель автоматического управления технологическим оборудованием реакторной установки со свинцовым теплоносителем. Данная модель дополнила штатные алгоритмы поддержания уровня нейтронной мощности реактора и режимов работы технологического оборудования возможностью изменения режимов работы по заданному алгоритму и контролем параметров оборудования в процессе его управления. В ходе испытаний разработанный алгоритм показал устойчивую работу.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Епифанов С.В. – анализ нормативной базы, постановка эксперимента; выполнение экспериментальных работ, обработка результатов; проведение численных расчетов; разработка математической модели; выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подбор литературных источников, редактирование текста статьи; первичная обработка результатов исследования, выявление закономерностей, проведение расчетов и подготовка заключения; подготовка текста статьи; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Толоконский А.О. – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; разработка концепции исследования, разработка методик измерения; первичная обработка результатов исследования, выявление закономерностей, проведение расчетов и подготовка заключения; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. *Альмасри Х.Ф.* Оценка качества регулирования и оптимизация настроек автоматического регулятора мощности реактора ВВЭР-1000 // Глобальная ядерная безопасность, 2016. № 4(21). С. 61–68.
2. *Salman A.E., Kandil M.M., Ateya A.A.E., Roman M.R.* Control of the VVER-1000 core power using optimized T-S fuzzy controller based on nonlinear point kinetic model // Progress in Nuclear Energy, 2025. V. 180. P. 105560. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2024.105560>.
3. *Шаповаленко В.В.* Реализация замкнутого ядерного топливного цикла в России // Энергетические установки и технологии, 2022. Т. 8. № 1. С. 38–42.
4. *Андреанов А.А., Купцов И.С., Осипова Т.А. и др.* Оптимизационные модели двухкомпонентной ядерной энергетики с тепловыми и быстрыми реакторами в замкнутом ядерном топливном цикле // Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. 2018. № 3. С. 100–112. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2018.3.09>.
5. *Адамов Е.О., Каплиенко А.В., Орлов В.В. и др.* Быстрый реактор со свинцовым теплоносителем БРЕСТ: от концепции к реализации технологии // Атомная энергия, 2020. Т. 129. № 4. С. 185–194.
6. *Драгунов Ю.Г., Лемехов В.В., Моисеев А.В., Смирнов В.С.* Реактор на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем (БРЕСТ) // Проблемы машиностроения и автоматизации. 2015. № 3. С. 97–103.

7. Прец А.А., Санар А.Д. Возможность реализации замкнутого ядерного топливного цикла на основе РУ БРЕСТ-ОД-300 // Инновации в технологиях и образовании: сборник статей участников XI Международной научно-практической конференции, Белово, 27–28 апреля 2018 г. Белово: КГТУ им. Т.Ф. Горбачева, 2018. Ч. 1. С. 214–216.

8. Епифанов С.В., Колибас Г.В., Толоконский А.О. Особенности автоматического регулятора мощности РУ со свинцовым теплоносителем // Физико-технические интеллектуальные системы (ФТИС-2023): Сборник тезисов II Научно-практической конференции, Москва, 07–09 февраля 2023 г. Тамбов: Юлис, 2023. С. 23.

9. Баловнев А.В., Кузнецов П.Б., Журнов А.П. FАСТ-BR. Патент РФ № 2021611743. 2021.

10. Корблев А.В., Трифонов А.А., Санарин Д.Б. и др. Программный комплекс распределенных средств сетевой обработки «КРОСС» (ПК «КРОСС»). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021681282. РФ, 2021.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 157–162

Algorithm for automatic control of neutron parameters and nuclear power plant equipment of a nuclear power plant with lead coolant in start-up modes

S. V. Epifanov [✉], A. O. Tolokonskiy

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[✉] ruserpip@yandex.ru

Received February 23, 2025; revised March 11, 2025; accepted March 25, 2025

As the level of automation of nuclear reactors developed, gradually automatic regulators changed from the level of maintaining individual parameters to group and then to functional-group control. Control algorithms of modern nuclear power plants use functional-group control, which allows to send commands of the common unit level instead of direct commands. Nowadays, design and construction of a new nuclear power plant with lead coolant is underway. To work out the normal operation algorithms and safety algorithms, a simulation system was created that allows installing the developed models of the nuclear power plant (process control object), models of equipment, process equipment on it and combining them in a single interaction environment. This article considers the possibility of using and implementing the control algorithm of a new nuclear power plant with lead coolant, which complements the standard algorithms of the control and protection system for neutron and technological parameters. For this purpose, a pre-prepared model of the reactor plant and models of the CPS equipment were installed on the simulation stand. The models of the control object and the CPS were supplemented with an exchange interface and an algorithm that allows controlling the operating modes of the process equipment at the pre-start and start-up stages of the RP. The result was a developed algorithm that eliminates the direct impact of the RP operator on technological operations during normal operation with the possibility of switching to manual mode when conditions appear that prohibit further operations.

Keywords: nuclear reactor, automatic control, subcritical level, equipment, start-up.

References

1. Almasri H.F. Ocenka kachestva regulirovaniya i optimizaciya nastroek avtomaticheskogo regul'yatora moshchnosti reaktora VVER-1000. [Quality Assessment of Regulation and Optimization of the Power Automatic Regulator Settings of PWR-1000 Reactor]. Global Nuclear safety, 2016. Iss. 4(21). Pp. 61–68 (in Russian).

2. Salman A.E., Kandil M.M., Ateya A.A.E., Roman M.R. Control of the VVER-1000 core power using optimized T-S fuzzy controller based on nonlinear point kinetic model. Progress in Nuclear Energy, 2025. Vol. 180. P. 105560. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2024.105560>.

3. *Shapovalenko V.V.* Realizaciya zamknutogo yadernogo toplivnogo cikla v Rossii [Implementation of the closed nuclear fuel cycle in Russia]. *Energeticheskie ustanovki i tekhnologii*, 2022. Vol. 8. Iss. 1. Pp. 38–42 (in Russian).
4. *Andrianov A.A., Kuptsov I.S., Osipova T.A. [et al.]*. Optimizacionnye modeli dvuhkomponentnoj yadernoj energetiki s teplovymi i bystryimi reaktorami v zamknutom yadernom toplivnom cikle [Optimization models of two-component nuclear power with thermal and fast reactors in a closed nuclear fuel cycle]. *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Yadernaya energetika*, 2018. Iss. 3. Pp. 100–112. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2018.3.09> (in Russian).
5. *Adamov E.O., Kaplienko A.V., Orlov V.V. [et al.]*. Bystryj reaktor so svincovym teplonositelem BREST: ot koncepcii k realizacii tekhnologii [Fast reactor with lead coolant BREST: from Concept to Technology Implementation]. *Atomnaya energiya*, 2020. Vol. 129. Iss. 4. Pp. 185–194 (in Russian).
6. *Dragunov Yu.G., Lemekhov V.V., Moiseev A.V., Smirnov V.S.* [Fast neutron reactor with lead coolant (BREST)]. *Problemy mashinostroeniya i avtomatizacii*, 2015. No. 3. Pp. 97–103 (in Russian).
7. *Peretz A.A., Canap A.D.* [The possibility of implementing a closed nuclear fuel cycle based on BREST-OD-300]. *Innovacii v tekhnologiyah i obrazovanii: sbornik statej uchastnikov XI mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferencii*, Belovo, 27–28 aprelya 2018 goda. [Collection of articles by participants of the XI International Scientific and Practical Conference «Innovations in technology and education». Belovo, April 28–29, 2018]. Belovo, KGTU im. T.F. Gorbacheva Publ., 2018. part 1. Pp. 214–216 (in Russian).
8. *Epifanov S.V., Kolibas G.V., Tolokonsky A.O.* [Features of automatic power controller of RP with lead coolant]. *Fiziko-tekhnicheskie intellektual'nye sistemy (FTIS-2023): Sbornik tezisov II Nauchno-prakticheskoy konferencii*. Moskva, 07–09 fevralya 2023 goda [Collection of abstracts of the II Scientific and Practical Conference «Physical and technical intellectual systems (FTIS-2023)». Moscow, February 07–09, 2023]. Tambov, Yulis Publ., 2023. Pp. 23 (in Russian).
9. *Balownev A.F., Kusnetsov P.B., Zhirnov A.P., e.a.* FACT-BR [FACT-BR]. Patent RF, no. 2021611743, 2021.
10. *Korablev A.V., Trifonov A.A., Sanarin D.B., e.a.* Programmnyj kompleks raspredelennyh sredstv setevoy obrabotki «KROSS» (PK «KROSS») [Software package of distributed network processing facilities «KROSS» (SP «KROSS»)]. Certificate RF of state registration of the computer program. No. 2021681282, 2021.

УДК 681.516.33

Система информационной поддержки для реакторных установок, выводимых из эксплуатации

© 2025 г. Г. В. Колибас, А. О. Толоконский

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Москва, 115409, Россия

В статье рассмотрены принципы построения системы информационной поддержки для реакторов, выводимых из эксплуатации, на примере АЭС с реактором типа РБМК-1000. В материале приведено описание подходов к построению структуры алгоритмов такой системы, рассмотрены функции безопасности, которые имеют важность их исполнения, для учета при построении системы информационной поддержки. Авторами были изучены нейтронные и технологические параметры, которые позволяют осуществлять контроль и аварийную защиту реактора вплоть до полной выгрузки топлива из активной зоны реактора, остановленного для вывода из эксплуатации. Особое внимание в статье уделено тому, что система информационной поддержки, должна соответствовать всем нормам и правилам, предъявляемым к системам, функционирующим на энергоблоках. Полученные данные позволяют выработать единообразный подход, в виде системы информационной поддержки, который позволяет осуществлять функции контроля и защиты реактора используя меньшее количество оборудования по сравнению со штатными системами, действующими на энергоблоках, которые эксплуатируются в режиме генерации электроэнергии.

Ключевые слова: алгоритм, АЭС, параметры, поддержка, РБМК, система, энергоблок.

Введение

Первый энергоблок атомной электростанции с реактором РБМК-1000 был введен в эксплуатацию в 1973 г., далее в период с 1975 по 1990 гг., на территории современной Российской Федерации были введены в строй еще десять энергоблоков АЭС с реактором РБМК-1000. Проектный срок эксплуатации энергоблоков с реакторами РБМК-1000 составляет 30 лет, но своевременное проведение работ по модернизации систем энергоблоков позволило увеличить срок эксплуатации реакторной установки до 45 лет. По достижении продленного срока эксплуатации, в силу изношенности оборудования, устаревания материальной базы, строительных конструкций и учитывая увеличение затрат на содержание и обеспечение работоспособности штатных систем энергоблоков, было принято решение об окончании срока эксплуатации таких энергоблоков первого поколения, как первые и вторые энергоблоки Ленинградской и Курской АЭС. С 2018 г. начинается подготовка к выводу из эксплуатации этих энергоблоков.

В настоящее время в рамках работ по выводу из эксплуатации на первом и втором энергоблоках Ленинградской и первом энергоблоке Курской АЭС из активной зоны реактора топливо выгружено полностью¹. Работы по выгрузке топлива из активной зоны второго энергоблока Курской АЭС продолжаются. Однако возникает вопрос: каким образом осуществляется информационная поддержка, учитывая,

¹ Росэнергоатом. Станции и проекты. Сайт Ленинградской АЭС: https://www.rosenergoatom.ru/stations_projects/sayt-leningradskoy-aes/ (дата обращения: 21.12.2024).

✉ Г.В. Колибас: gkolibas@yandex.ru

Поступила в редакцию: 03.03.2025

После доработки: 25.03.2025

Принята к публикации: 08.04.2025

EDN OHPPHW

что большинство штатных систем, задействованных при работе энергоблока в режиме генерации электроэнергии в состоянии энергоблока, остановленном для вывода из эксплуатации, не задействованы? Чтобы дать ответ на этот вопрос, необходимо выработать подход к построению структуры системы информационной поддержки, ее алгоритмам, учесть функции безопасности и соблюдение требований норм и правил, действующих в атомной энергетике.

Режимы работы энергоблока. Системы и защиты, задействованные в разных режимах работы

Рассмотрим штатный состав систем энергоблока с реакторной установкой РБМК-1000 [1]. Общий вид реакторной установки представлен на рис. 1.

В состав энергоблока входят следующие системы [2], [3]:

- реактор;
- система контроля, управления и защиты;
- контур многократной принудительной циркуляции;
- контур охлаждения каналов системы управления и защиты (СУЗ), каналов деления (КД), каналов охлаждения отражателя (КОО);
- система подачи питательной воды;
- система аварийной подачи питательной воды;
- система аварийного охлаждения реактора;
- система аварийного приема пара;
- система аварийной конденсации пара;
- система удаления водорода;

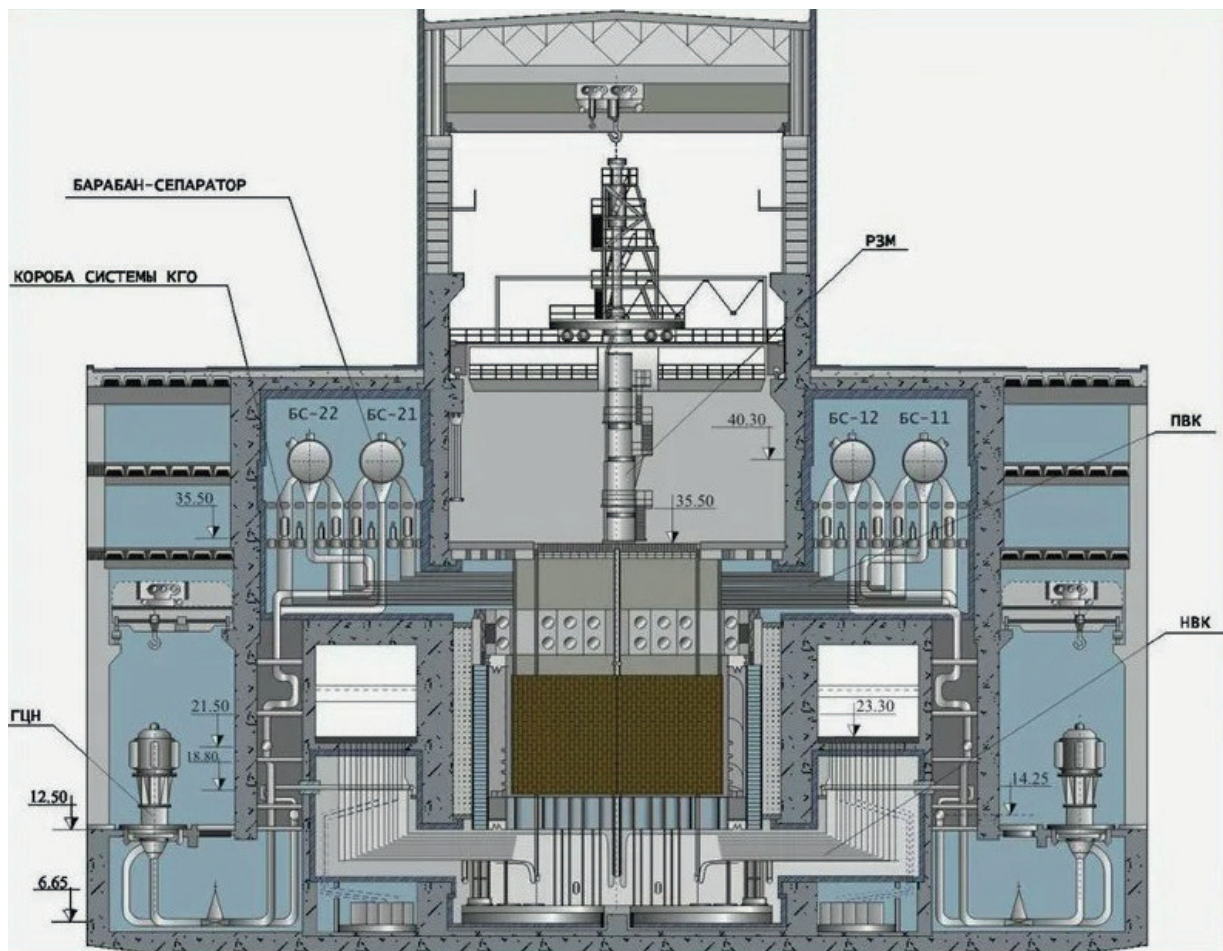


Рис. 1. Общий вид реакторной установки РБМК-1000

- система защиты контура многократной принудительной циркуляции от превышения давления;
- система защиты реакторного пространства от превышения давления;
- система технического водоснабжения;
- система аварийного электроснабжения;
- система продувки и расхолаживания реактора и контур многократной принудительной циркуляции (КМПЦ);
- комплекс систем обращения с ядерным топливом;
- система охлаждения бассейнов выдержки отработавшего топлива;
- рабочие органы регулирования системы контроля, управления и защиты;
- система пожаротушения в помещениях систем безопасности;
- информационно-измерительная система «Скала-микро»;
- автоматизированная система обнаружения течей теплоносителя;
- система сейсмической защиты;
- управляющая система безопасности;
- аварийные контрольно-измерительные приборы.

Однако стоит учитывать, что на энергоблоке, находящемся в режиме вывода из эксплуатации, не все вышеперечисленные системы востребованы, также сокращается количество используемых датчиков разного рода систем. Это обусловлено тем, что реактор в критическое состояние выводится не будет, контур СУЗ обезвожен, а топливо будет полностью выгружено из активной зоны реактора. Нейтронно-физические расчеты показывают, что с течением времени нейтронный поток в активной зоне реактора будет снижаться. Этот вывод подтверждается показаниями датчиков нейтронного потока энергоблока № 1 Курской АЭС, график изменения показаний датчиков с течением времени представлен на рис. 2.

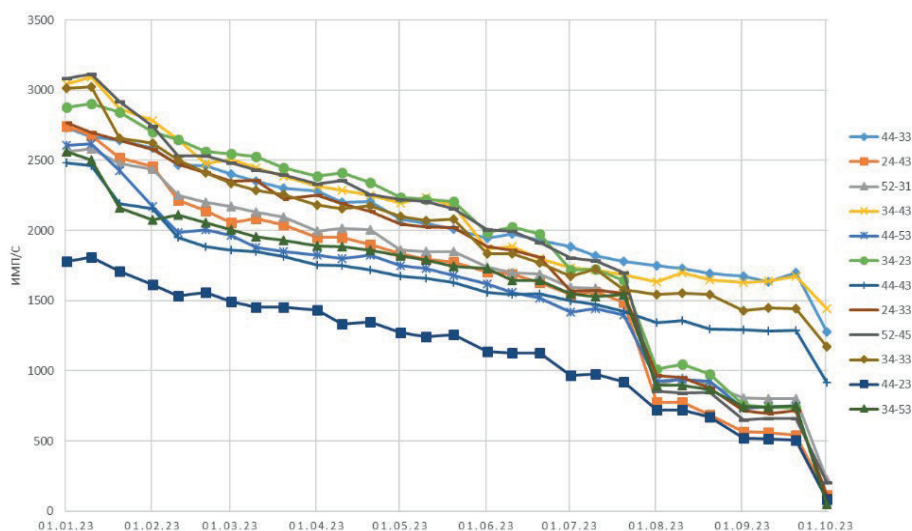


Рис. 2. Показания нейтронных датчиков в процессе выгрузки ТВС²

Проанализировав требования к обеспечению безопасной эксплуатации энергоблока как в режиме генерации электроэнергии, так и в режиме работы энергоблока, остановленном для вывода из эксплуатации, можно определить, какие именно защиты должны остаться в работе, а какие можно исключить.

Для сравнения, в табл. 1 приведена информация, какие системы эксплуатировались на энергоблоке в режиме генерации и какие системы должны эксплуатироваться далее.

Также необходимо отметить, что сокращается перечень защит (аварийных режимов) реактора, с учетом того, что исключается возможность вывода реактора в критическое состояние. Для сравнения, в табл. 2 приведена информация о том, какие защиты действуют при работе реактора на мощности и какие при работе реактора в процессе вывода из эксплуатации.

² Росэнергоатом. Станции и проекты. Сайт Курской АЭС: https://www.rosenergoatom.ru/stations_projects/sayt-kurskoy-aes/ (дата обращения: 21.12.2024).

Таблица 1. Перечень систем, задействованных на энергоблоке при разных режимах работы [4]

Энергоблок в режиме генерации электроэнергии	Энергоблок в режиме, остановленном для вывода из эксплуатации
Задействованные системы	
реактор	реактор
система контроля, управления и защиты	система контроля, управления и защиты
контур многократной принудительной циркуляции	—
контур охлаждения каналов СУЗ, КД и КОО	—
система подачи питательной воды	система подачи питательной воды
система аварийной подачи питательной воды	система аварийной подачи питательной воды
система аварийного охлаждения реактора	система аварийного охлаждения реактора
система аварийного приема пара	система аварийного приема пара
система аварийной конденсации пара	—
система удаления водорода	—
система защиты контура многократной принудительной циркуляции от превышения давления	—
система защиты реакторного пространства от превышения давления	система защиты реакторного пространства от превышения давления
система технического водоснабжения	система технического водоснабжения
система аварийного электроснабжения	система аварийного электроснабжения
система продувки и расхолаживания реактора и КМПЦ	—
комплекс систем обращения с ядерным топливом	—
система охлаждения бассейнов выдержки отработавшего топлива	—
рабочие органы регулирования системы контроля, управления и защиты	рабочие органы регулирования системы контроля, управления и защиты
(только органы аварийной защиты)	
система пожаротушения в помещениях систем безопасности	система пожаротушения в помещениях систем безопасности
информационно-измерительная система «Скала-микро»	информационно-измерительная система «Скала-микро»
автоматизированная система обнаружения течей теплоносителя	—
система сейсмической защиты	—
управляющая система безопасности	управляющая система безопасности
аварийные контрольно-измерительные приборы	аварийные контрольно-измерительные приборы

Проанализировав информацию, представленную выше, можно сказать, что в режиме работы реакторной установки (РУ), остановленном для вывода из эксплуатации, остается в действии аварийная защита, формируемая по следующим первопричинам:

- сигналам датчиков контроля нейтронного потока;
- превышению уровня мощности реактора;
- уменьшению периода разгона реактора;
- неисправности двух из трех каналов аппаратуры;
- повышению избыточного давления в полости РП;
- исчезновению напряжения на всех секциях 6 кВ рабочего электроснабжения собственных нужд энергоблока.

Также осуществляется контроль уровней в барабан-сепараторе, контроль включенного состояния главных циркуляционных насосов и формирование команды на запуск дизель-генератора по факту обесточения собственных нужд энергоблока.

Таблица 2. Перечень защит, действующих при работе реакторной установки в разных режимах эксплуатации

Эксплуатация РУ в режиме генерации электроэнергии	Эксплуатация РУ в режиме, остановленном для вывода из эксплуатации
аварийная защита (АЗ) реактора по нейтронным и технологическим параметрам, в этом режиме задействованы стержни АЗ (уменьшение периода разгона до 60 с по сигналам датчиков, снижение запаса реактивности, общее превышение мощности на 5 % $N_T^{\text{НОМ}}$, локальное превышение мощности на 10 % $N_T^{\text{НОМ}}$, снижение уровня воды в аварийном баке контура СУЗ, аварийное снижение давление в КМПЦ и т.д.)	АЗ реактора по нейтронным и технологическим параметрам, в этом режиме задействованы стержни АЗ (увеличение мощности реактора, уменьшение периода разгона до 60 с по сигналам датчиков, повышение избыточного давления в полости РП, снижение уровня воды в аварийном баке контура СУЗ)
обесточивание муфт рабочих органов регулирования (КОМ), в этом режиме задействованы все стержни СУЗ (кроме стержней УСП) по команде от ключа	обесточивание муфт рабочих органов регулирования (КОМ), в этом режиме задействованы все стержни СУЗ (кроме стержней УСП) по команде от ключа
быстрое снижение мощности до полного заглушения реактора (БСМ), в этом режиме задействованы стержни СУЗ (кроме стержней АЗ)	—
быстрое управляемое снижение мощности (БУСМ-1), снижение мощности до 50 % $N_T^{\text{НОМ}}$	—
—	—
быстрое управляемое снижение мощности (БУСМ-2), снижение мощности до 60 % $N_T^{\text{НОМ}}$	—
—	—
быстрое управляемое снижение мощности (БУСМ-3), снижение мощности до 60 % $N_T^{\text{НОМ}}$	—

Структура системы информационной поддержки

В соответствии с «Общими положениями обеспечения безопасности атомных станций» НП-001-15³ и «Правилами ядерной безопасности реакторных установок атомных станций» НП-082-07⁴, действие которых распространяется на все этапы жизненного цикла АЭС, энергоблок АЭС, остановленный для вывода из эксплуатации, находится в эксплуатации весь период до удаления с блока отработавшего ядерного топлива. В этот период сохраняются все требования к персоналу и документации, как для действующего блока АЭС. Таким образом, на энергоблоке, остановленном для вывода из эксплуатации, необходимо обеспечить контроль и аварийную защиту реактора.

Рассмотрим штатную структуру системы управления и защиты энергоблока с реактором РБМК-1000 [5]. Структура представлена на рис. 3.

Штатная система управления и защиты представляет собой сложную систему, состоящую из двух систем остановки реактора, двух комплектов аппаратуры контроля и преобразования информации от датчиков выполняет логическую обработку всей информации по заданным алгоритмам (каждый комплект со своим набором датчиков) также имеет в своем составе аппаратуру общей (внекомплектной) части системы.

Учитывая, что на энергоблоке, остановленном для вывода из эксплуатации, не требуется система в своем полном составе, а также то, что штатная система за период эксплуатации имеет признаки изношенности оборудования и сложности в пополнении запасных элементов, предлагается разработать новую структуру и алгоритмы системы контроля и защиты. При этом для снижения стоимости работ используется оборудование из состава штатной системы после небольшой доработки и установки более новых компьютерных плат.

Выполняя требования НП-001-15, учитывая сокращение количества оборудования, разработана новая структура, которая представлена на рис. 4.

³ НП-001-15. Общие положения обеспечения безопасности атомных станций.

⁴ НП-082-07. Правила ядерной безопасности реакторных установок атомных станций.

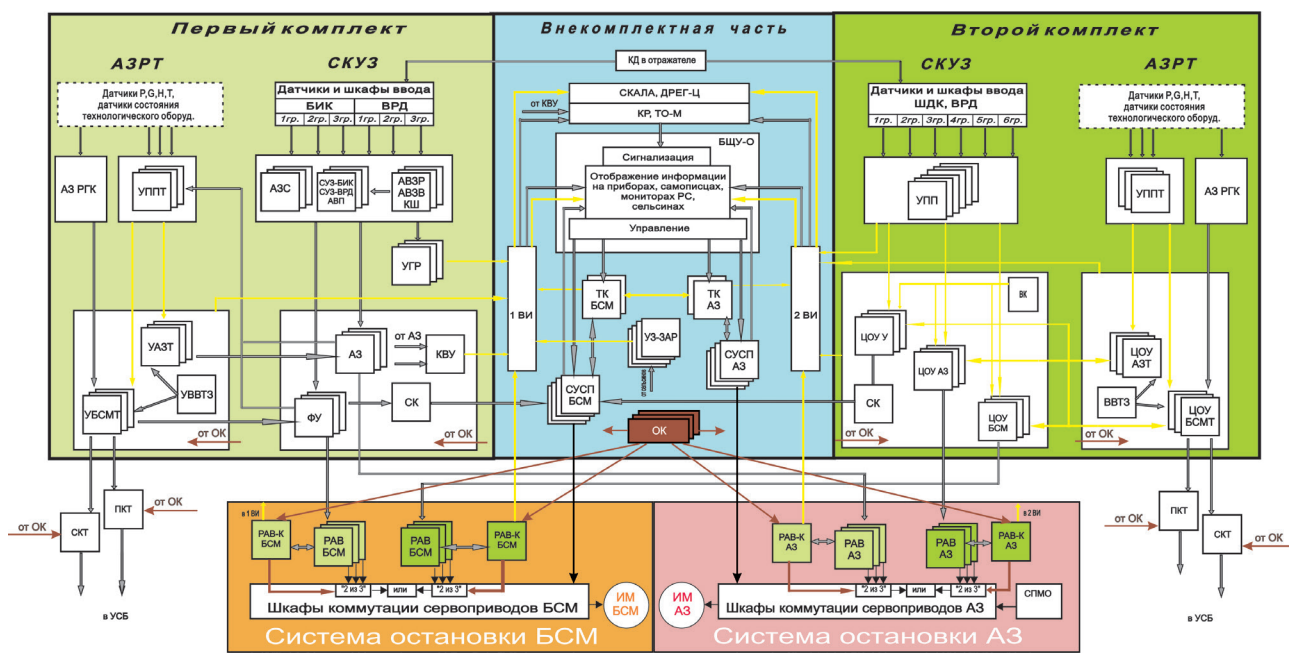


Рис. 3. Структура штатной системы управления и защиты

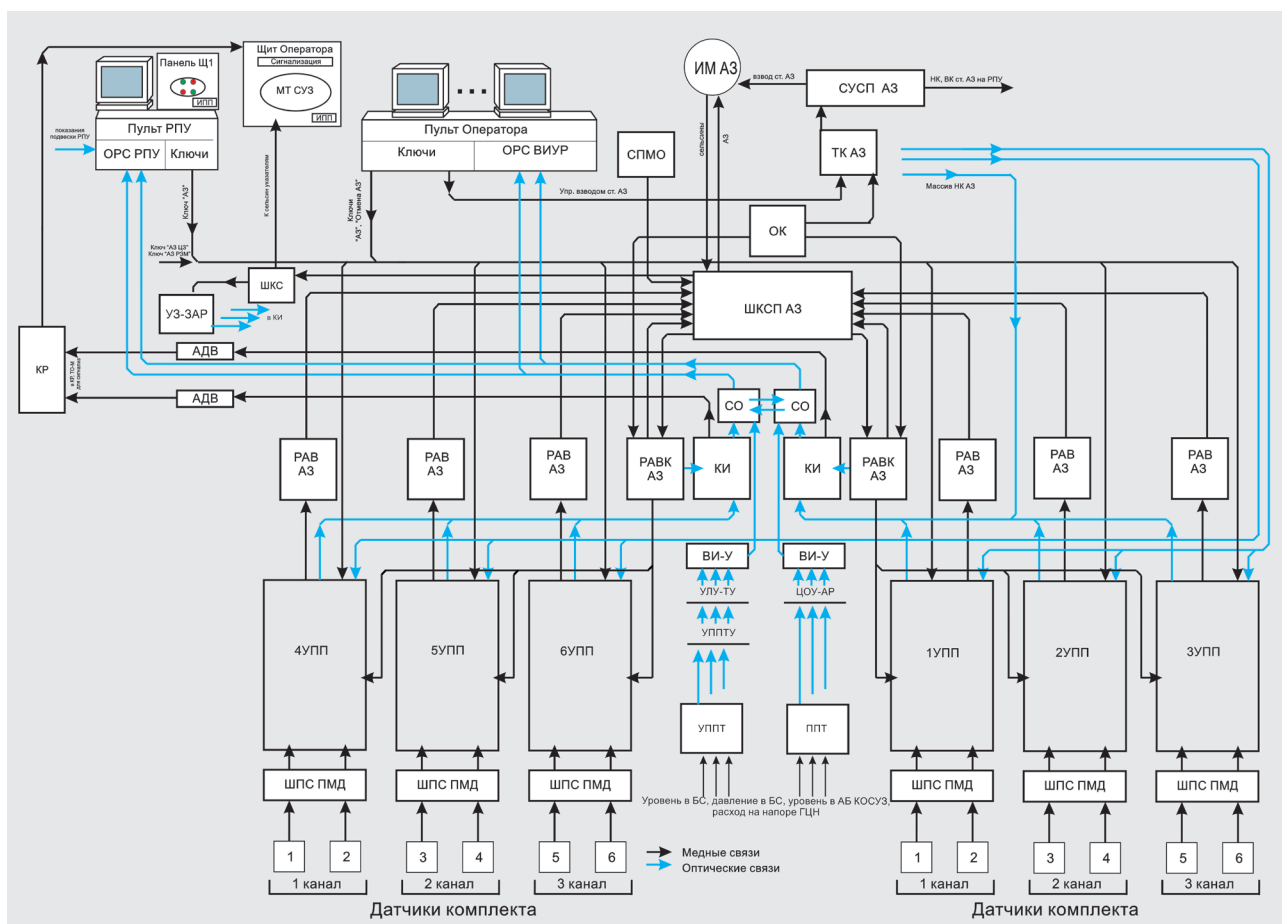


Рис. 4. Структура системы информационной поддержки

Система представляет собой два трехканальных комплекта аппаратуры на микропроцессорной элементной базе. Если в штатной структуре один из комплектов построен на жесткой логике, а второй является микропроцессорным, то в новой структуре оба комплекта построены на микропроцессорной базе. Уникальное отличие штатной и новой структуры заключается в том, что в новой структуре функции обработки алгоритмов и выдача сигналов на исполнение переданы устройствам первичного преобразования (УПП) сигналов от датчиков нейтронного потока, ранее алгоритмические функции выполняла аппаратура среднего уровня. Изначально устройства первичного преобразования сигналов датчиков выполняли функции приема сигналов датчиков и их последующей оцифровке, далее сигналы передавались в алгоритмическую аппаратуру. Из штатных устройств УПП организуются два комплекта, каждый со своим набором датчиков. При сравнении двух структур на рис. 3 и 4 видно, что большая часть оборудования не требуется. Также не требуется обслуживание и замена кабельных медных и оптических связей между этим оборудованием.

Стоит отметить, что с учетом того, что реактор расхоложен, возникает возможность установки датчиков непосредственно в активную зону, вместо стержней СУЗ, что позволяет контролировать нейтронный поток с большей точностью, по мере выгрузки топлива. Нейтронно-физические расчеты показали, что для контроля достаточно установки 12 датчиков, вместо 148 штатных [6].

Для модернизированных стоек УПП разработан новый алгоритм формирования исполнительных сигналов, он представлен на рис. 5.

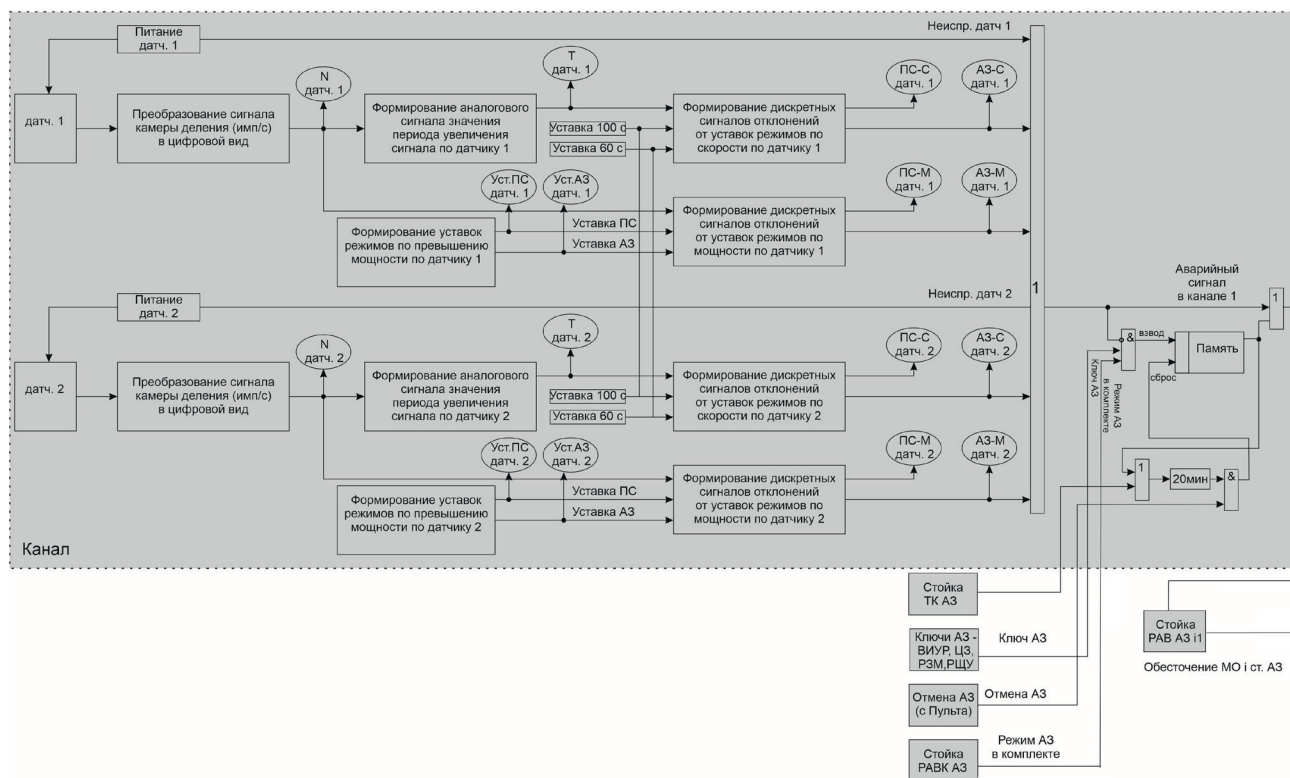


Рис. 5. Алгоритм формирования исполнительных сигналов

Данный алгоритм позволяет обработать сигналы датчиков своего канала, канал принимает сигналы от двух датчиков, далее следует сравнение с уставками по увеличению мощности (более чем на два порядка от текущего значения) и по скорости уменьшения периода разгона (60 с). При превышении уставок в двух из трех каналов своего комплекта формируется сигнал на исполнительные механизмы стержней АЗ.

Стоит отметить, что с учетом модернизации элементной базы, в том числе замены процессорных плат на новые, увеличивается надежность системы, с точки зрения наработки на отказ. Расчет надежности показал, что наработка на отказ типа «ложное срабатывание АЗ» элементной базы системы оценивается величиной 75 200 ч, что говорит о ее достаточно высокой надежности.

Функции безопасности

Рассмотрим функции безопасности, которые имеют важность исполнения на энергоблоке, остановленном для вывода из эксплуатации. В качестве таких функций выступают функции нормальной эксплуатации и функции безопасности.

В состав функций нормальной эксплуатации входят:

- контроль и регистрация информации о нейтронной мощности реактора и периоде (скорости) ее увеличения в диапазоне от 10^{-11} и до $10^{-5} \% N_{\text{ном}}$;
- контроль и регистрация подкритичности;
- контроль технологических параметров (уровни в барабан-сепараторе, давление в барабан-сепараторе, расход на напоре главных циркуляционных насосов, уровень в аварийном баке СУЗ);
- контроль положения стержней АЗ;
- ввод всех стержней АЗ в активную зону (при необходимости) в ручном режиме с пульта оператора;
- взвод всех стержней АЗ после срабатывания аварийной защиты.

В режиме нормальной эксплуатации стержни АЗ взведены в крайнее верхнее положение до верхних концевиков.

В состав функций безопасности входят:

- автоматическое или инициируемое оператором заглушение (аварийная защита), основанная на введении в активную зону реактора всех стержней АЗ (под действием силы тяжести в газовой среде);
- инициируемое оператором заглушение реактора, при котором производится обесточивание муфт сервоприводов и введение в активную зону всех стержней аварийной защиты под действием силы тяжести.

Соответствие нормам и правилам

Необходимо отметить, что важным моментом является соответствие всех систем эксплуатирующихся на энергоблоке нормам и правилам, действующим в атомной энергетике. Основными документами являются:

- НП-001-15 «Общие положения обеспечения безопасности атомных станций»,
- НП-026-16 «Требования к управляющим системам, важным для безопасности атомных станций».

Согласно НП-001-15, система информационной поддержки соответствует по влиянию на безопасность классу «ЗНУ», система нормальной эксплуатации с управляющим воздействием.

Согласно НП-026-15, система соответствует категории «А», т.е. предоставляет информацию и возможность управления для выполнения действий, направленных на достижение контролируемого безопасного состояния АС.

Заключение

Разработка системы информационной поддержки для реакторов, остановленных для вывода из эксплуатации, позволяет выработать подход, который, в свою очередь, позволяет обеспечить безопасную эксплуатацию реактора, и при превышении безопасных пределов эксплуатации заглушить реактор. Решение практической задачи, вывода из эксплуатации энергоблоков с реактором РБМК-1000, представляет собой возможность определить аппаратный состав новой системы, разработать алгоритмы формирования исполнительных сигналов. При этом решается сопутствующая задача по снижению финансовых затрат по поддержанию в работоспособном состоянии оборудования и кабельных связей по причине сокращения самого используемого оборудования. Также минимальная модернизация микропроцессорной техники позволяет повысить надежность системы и ее работоспособность.

Решая вышеуказанную задачу, формируется определенная последовательность действий на основе осознанного плана. Следовательно, определяется набор действующих защит энергоблока, исходя из этого составляется перечень необходимого оборудования в виде системы, далее разрабатываются алгоритмы, исполнение которых должно обеспечить заглушение реактора в случае нарушения безо-

пасных пределов эксплуатации энергоблока. Таким образом, на основе решения практической задачи формируется метод построения систем информационной поддержки для энергоблоков, выводимых из эксплуатации, и в дальнейшем подобный метод может иметь повсеместное применение, и не будет потребности в разработке уникального проекта под вывод из эксплуатации конкретного энергоблока с реактором РБМК-1000 или энергоблока с реактором другого типа.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Колибас Г.В. – разработка концепции исследования, разработка методик измерения; анализ нормативной базы, постановка эксперимента, выполнение экспериментальных работ, обработка результатов; анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, проведение численных расчетов; разработка математической модели; первичная обработка результатов исследования, проведение расчетов, обсуждении результатов, подбор литературных источников, подготовка текста статьи; редактирование текста статьи; подготовка заключения.

Толоконский А.О. – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; разработка концепции исследования, разработка методик измерения; первичная обработка результатов исследования, выявление закономерностей, проведение расчетов и подготовка заключения; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. *Абрамов М.И., Авдеев В.И., Адамов Е.О. и др.* Канальный ядерный реактор / Под общей редакцией Ю.М. Черкашова. М.: ГУП НИКИЭТ, 2006. С. 86–165.
2. *Андрюшечко С.А., Васильев Б.Ю.* ВВЭР-1200: эволюция классики. М.: Логос, 2019 г. 672 с.
3. *Морозов А.В., Сахипгареев А.Р.* Экспериментальная оценка влияния контактной конденсации парогазовой смеси на работу пассивных систем безопасности ВВЭР // Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика, 2017. № 1. С. 17–285.
4. *Асмолов В.Г., Блинков В.Н., Поваров В.П., Черников О.Г.* Основы обеспечения безопасности АЭС: учебное пособие для студентов вузов. М.: НИЯУ МИФИ, 2025 г. 296 с.
5. *Кулаков А.В., Михайлов М.Н.* Современные управляющие системы для объектов повышенной техногенной опасности на примере атомной энергетики: опыт создания и перспективы применения // Известия Российской Академии наук. Энергетика, 2013. № 1. С. 107–115.
6. *Филипчук Е.В., Потапенко П.Т., Постников В.В.* Управление нейтронном полем ядерного реактора. М.: Энергоиздат, 1981. 280 с.

Information support system for reactor installations decommissioned

G. V. Kolibas[✉], A. O. Tolokonskiy

National research nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

[✉] gkolibas@yandex.ru

Received March 03, 2025; revised March 25, 2025; accepted April 08, 2025

The article discusses the principles of building an information support system for decommissioned reactors, using the example of a nuclear power plant with an RBMK-1000 reactor. The article describes approaches to building the structure of algorithms for such a system, and discusses security functions that are important for their implementation, to be taken into account when building an information support system. The authors studied the neutron and technological parameters that allow monitoring and emergency protection of the reactor until the fuel is completely discharged from the reactor core, which has been shut down for decommissioning. Special attention in the article is paid to the fact that the information support system must comply with all the norms and rules applicable to systems operating at power units. The data obtained make it possible to develop a uniform approach, in the form of an information support system, which allows monitoring and protecting the reactor using fewer equipment compared to standard systems operating at power units that are operated in the power generation mode.

Keywords: algorithm, NPP, parameters, support, RBMK, system, power unit.

References

1. Abramov M.I., Avdeev V.I., Adamov E.O. *e.a.* Kanal'nyy yadernyy reaktor / Pod obshchej redakciej Yu.M. Cherkashova [Ducted nuclear reactor. Under the general editorship of Yu.M. Cherkashov]. Moscow, GUP NIKIET Publ., 2006. Pp. 86–165.
2. Andryushechko S.A., Vasiliev B.Yu. VVER-1200: evolyuciya klassiki [VVER-1200: evolution of classics]. Moscow, Logos Publ., 2019, 672 p.
3. Morozov A.V., Sakhipgareev A.R. Eksperimental'naya ocenka vliyaniya kontaktnoj kondensacii parogazovoj smesi na rabotu passivnyh sistem bezopasnosti VVER [Experimental assessment of the effect of contact condensation of a combined-cycle gas mixture on the operation of passive VVER safety systems]. Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Yadernaya energetika, 2017. No. 1. Pp. 17–28 (in Russian).
4. Asmolov V.G., Blinkov V.N., Povarov V.P., Chernikov O.G. Osnovy obespecheniya bezopasnosti AES: uchebnoe posobie dlya studentov vuzov [Fundamentals of NPP safety: a textbook for university students]. Moscow, NIYaU MIFI Publ., 2025. 296 p.
5. Kulakov A.V., Mikhailov M.N. Sovremennye upravlyayushchie sistemy dlya ob'ektov povyshennoj tekhnogennoj opasnosti na primere atomnoj energetiki: opyt sozdaniya i perspektivy primeneniya [Modern control systems for facilities of increased technogenic hazards on the example of nuclear energy: creation experience and application prospects] // Izvestiya Rossijskoj Akademii nauk. Energetika, 2013. No. 1. Pp. 107–115 (in Russian).
6. Filipchuk E.V., Potapenko P.T., Postnikov V.V. Upravlenie nejtronnom polem yadernogo reaktora [Control of the neutron field of a nuclear reactor]. Moscow, Energoizdat Publ., 1981. 280 p.

УДК: 371.3

Начальные этапы формирования системного мышления у школьников

© 2025 г. Е. Г. Врублевская¹, С. В. Генисаретская², А. А. Соловьев²

¹ Смоленский государственный университет, Смоленск, 214000, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Процессы, происходящие сегодня в обществе, науке, на высокотехнологических производствах, в промышленности можно охарактеризовать как сложные системы. Для решения все усложняющихся проблем нужны новые кадры с системным мышлением. Одним из ключевых вопросов современной педагогики является поиск инструментов для развития системного мышления. При этом ключевым моментом обучения системному мышлению должно стать формирование такого мышления, когда целеполагание, ответственность за результат и за последствия тех или иных решений естественным образом формировались бы в процессе обучения. В школе и вузе такими инструментами могут быть отдельные курсы, проектные формы обучения и т.п., направленные на развитие у учащихся системного мышления, тяги к знаниям, ответственности за принимаемые решения. В статье описывается экспериментальный интерактивный курс по решению кейс-ориентированных задач, разработанный и реализованный в НИЯУ МИФИ. Курс был разработан для школьников старших классов лицея-предуниверситария НИЯУ МИФИ. Особенность курса – его интерактивный характер: преподаватель выступает в роли модератора, взаимодействуя с учениками и организуя их взаимодействие между собой. Данный методологический подход не только формирует системное мышление как таковое, но и развивает навык самостоятельного поиска, способствует вовлеченности в учебный процесс, повышает мотивацию к обучению.

Ключевые слова: мышление, системное мышление, кейсы, кейс-ориентированные задачи, проектные формы обучения, НИЯУ МИФИ, предуниверситарий НИЯУ МИФИ.

Введение

Процессы, происходящие сегодня в обществе, в первую очередь в науке, на высокотехнологических производствах, в промышленности, можно охарактеризовать как сложные системы. В.С. Степин в книге «Классика, неклассика, постнеклассика: критерии различения» [1] обозначил их как сложные саморазвивающиеся системы, в которых каждый последующий уровень перестраивает предыдущие, формируя новые подсистемы. В.С. Степин утверждает, что освоение такого рода сложных систем определяет технологическое развитие, которое в нынешних политических условиях является актуальной задачей государства.

Для решения все усложняющихся проблем нужны кадры. Сегодняшние реалии показывают, что уже недостаточно подготовить специалиста, вооруженного большим объемом знаний. Каждый работник, будь то ученый, инженер, квалифицированный рабочий, должен уметь применять полученные знания с учетом большого количества факторов в их целостности и взаимодействии, т.е. фактически обладать системным мышлением.

Под «системным мышлением» понимается способность учитывать связи между объектами, предметами, явлениями, а также целостно их рассматривать. Наличие системного мышления подразумевает

✉ С.В. Генисаретская: SVGenisaretskaya@mephi.ru
А.А. Соловьев: ASolovev@mephi.ru

Поступила в редакцию: 17.03.2025
После доработки: 10.04.2025
Принята к публикации: 11.04.2025

обладание развитым логическим мышлением и высоким уровнем ответственности за принимаемые решения.

Ключевым моментом обучения системному мышлению должно стать формирование такого мышления, когда целеполагание, ответственность за результат и за последствия тех или иных решений естественным образом формировались бы в процессе обучения.

В качестве примера можно привести Советский атомный проект (САП), решение о реализации которого было принято 28 сентября 1942 г. на государственном уровне. САП был крупномасштабным наукоемким проектом, в котором было задействовано огромное количество физиков-теоретиков, исследователей, инженеров, рабочих разных специальностей. Трудностей было много, иногда работа шла на износ. Тем не менее, все участники проекта демонстрировали не только высокий уровень знаний и умений, о чем говорят полученные результаты, но и высочайший уровень ответственности и понимания важности проекта. Вся система, включая образование, была построена таким образом, что на всех этапах формировались знания и умения, присутствовало четкое понимание целей, их осознание и ответственность за результат.

С точки зрения методологического подхода, задача формирования системного мышления должна реализовываться с самого детства – в детском саду, средней школе, вузе – и продолжаться на протяжении всей жизни. О важности для человека навыка обучения в течение всей жизни говорил еще С.И. Гессен [2], но сейчас он актуален как никогда.

При этом одним из ключевых вопросов современной педагогики является поиск инструментов для развития системного мышления.

В качестве одного из таких инструментов может рассматриваться подготовка специальных курсов, основанных на использовании в учебном процессе специализированных заданий, игровых форм, дидактических приемов, проблемно-поисковых подходов [3], целью которых является развитие познавательной мотивации, повышение уровня активности обучения и любознательности. Например, в детском саду в ходе игр педагогу-воспитателю необходимо прививать ребенку любознательность, тягу к познанию нового, проявлению самостоятельности.

В школе и вузе может оказаться целесообразным введение отдельных курсов, как, например, описанных в [4], проектных форм обучения и т.п., направленных на развитие у учащихся системного мышления, тяги к знаниям, ответственности за принимаемые решения.

В качестве эксперимента в НИЯУ МИФИ был разработан курс для школьников старших классов лицея-предуниверситария НИЯУ МИФИ, опытом реализации которого мы хотим поделиться.

Курс рассчитан на 16 занятий по 90 мин каждое. Оптимальное количество участников – от 15 до 20 человек. Цель курса – развитие системного мышления, творческих способностей, навыков командной работы и способности к непрерывному обучению и самообучению, а также воспитание ответственности за принимаемые решения. Особенность курса – его интерактивный характер: преподаватель выступает в роли модератора, взаимодействуя с учениками и организуя их взаимодействие между собой.

В рамках каждого занятия школьникам предлагается кейс-ориентированная задача, не имеющая очевидного или, в ряде задач, единственно правильного решения. Поиск ответа на задачу требует от обучающегося провести анализ входных данных, сопоставить их друг с другом, каждое решение должно быть аргументированно обосновано.

Ниже дано краткое описание некоторых задач.

Основная часть

Кейс-ориентированная задача 1

Ученикам предлагается инфографическая карточка, содержащая аэрофотоснимок военной базы на Кубе (рис. 1 и 2). Основываясь на этом снимке, начальник аналитического отдела Национального центра интерпретации фотографий США Дино Бругиони в 1962 г. сделал вывод о наличии советских ракет средней дальности Р-12 на Кубе, хотя на самом снимке ракет нет. Ученикам необходимо восстановить логическую цепочку, которая привела начальника аналитического отдела к такому выводу, т.е. эта задача с известным результатом, но с неясным ходом мышления.



Рис. 1. Первичная инфографическая карточка, формулирующая вопрос «Кубинский ракетный кризис», связанный с обнаружением ракет Р-12 на территории Кубы в 1962 г.



Рис. 2. Вторичная инфографическая карточка, представляющая ответ на вопрос «Кубинский ракетный кризис», связанный с обнаружением ракет Р-12 на территории Кубы в 1962 г.

В ходе решения задачи учащиеся анализируют различные факторы в их взаимодействии, которые могут привести к конечному результату. Например, в ходе анализа снимков они оценивают, что длина грузовика ГАЗ-51, который видно на фотографии, составляет примерно 7 м. Это позволяет им правильно определить радиус разворота около 30 м, следы которого также видно на снимке. Но на начало 60-х гг. XX в. на территории Кубы не было автотранспорта, длина которого превышала бы 7–8 м. Данную информацию необходимо найти в сторонних источниках, или ее предоставляет в устной форме преподаватель. Учитывая, что длина ракеты Р-12 примерно 22 м, а с тягачом у данного «автопоезда» радиус

разворота будет примерно 30 м, можно выстроить логическую цепочку, которой руководствовался Дино Бругиони.

Данная задача возбуждает интерес у школьников к поиску ответа как таковому. А именно с вопроса «Почему это так?» начинается научный поиск.

Кейс-ориентированная задача 2

На рис. 3 представлена инфографическая карточка, на которой учащимся предлагается на основе имеющихся данных сформулировать проблематику и выявить набор факторов, влияющих на конечный результат задачи.



Рис. 3. Инфографическая карточка, включающая два формата информации о возможном объекте исследования

На карточке две независимые ситуации: о дорожных пробках и об интересном инженерном решении.

В левой части изображен полигон, в центре которого находится пушка с закрепленной на ее стволе винтовкой. Возникает вопрос: для чего предназначена такая конструкция? Ответ достаточно простой, но школьники часто дают разные трактовки, редко кто находит правильный ответ.

Дело в том, что эта группа солдат находится на учебном полигоне, о чем свидетельствует свободная, расслабленная атмосфера. Однозначно можно сделать вывод, что на фотографии не запечатлены реальные боевые действия. На начальном этапе обучения вместо боевых снарядов использовалось специальное устройство, в котором ствол пушки был соединен (спарен) со стволом винтовки. Таким образом выстрел производился из «пушки», но фактически стрельба велась трассирующим патроном из винтовки. Это позволяло наблюдать, куда попадает «снаряд». Т.е. исследование, например, может быть сформулировано следующим образом: «Изучение эффективности использования специальных тренировочных устройств, совмещающих пушку и винтовку, для обучения стрельбе и отработки навыков».

В правой части инфографической карточки описана ситуация образования дорожных заторов на некотором заметном расстоянии от их предполагаемого эпицентра. Замедление движения и самая медленная скорость автомобилей наблюдается именно на этом расстоянии. Это интересная задача – когда мы подъезжаем к эпицентру, причина пробки как будто исчезает. В этом случае проблематика может быть сформулирована следующим образом: «Определение причин, обуславливающих возникновение дорожных заторов на определенном удалении от эпицентра их возникновения».

Но формулирование исследования – это начальный этап, далее обучающимся предлагается сформулировать возможный эксперимент, результаты которого позволили бы разрешить проблему. В случае, если формулирование эксперимента на данном этапе представляется затруднительным, обучающимся рекомендуется выявить потенциальные факторы, обуславливающие возникновение той или иной проблемы.

В рамках выполнения задания у обучающихся наблюдается значительный познавательный интерес к разрешению «загадок» соответствующего характера.

Кейс-ориентированная задача 3

Задания на инфографической карточке учат школьников формулировать задачи исследования.

Цели и задачи

Задание №1

Неотъемлемой частью нашей планеты являются растения. В качестве источника для обеспечения жизнедеятельности они используют в том числе энергию солнечного света. Солнечный свет поглощается хлорофиллом (зеленым пигментом), находящимся в листьях. Под воздействием излучения в видимом диапазоне света происходит процесс фотосинтеза – образование углеводов из CO_2 и H_2O . Побочным продуктом реакции является O_2 , необходимый для существования млекопитающих, в том числе и людей. Спектр солнечного излучения имеет достаточно широкий диапазон. Однако для обеспечения жизни растениям необходимы только два диапазона длин волн: 590-720 нм (оранжевый и красный цвет) и 400-470 нм (синий цвет). Для выращивания рассады зачастую используют искусственное освещение, которое имеет постоянный световой спектр и постоянную величину освещенности.

1. Сформулируйте название проекта/исследования.
2. Определите цель проекта/исследования.
3. Сформулируйте задачи, необходимые для достижения цели проекта/исследования.

Задание №2

Кейс 1: Применение лазеров в археологии

Археологи часто используют лазерные технологии, такие как ЛИДАР и лазерное сканирование, для обнаружения и изучения археологических объектов и памятников. Проведение исследования, чтобы понять, как лазеры помогают археологам раскрывать тайны прошлого.

Кейс 2: Исследование воздействия музыки на человеческий мозг

Музыка оказывает глубокое воздействие на человеческий мозг и эмоциональное состояние. В этом исследовании предлагается изучить, как различные жанры музыки влияют на мозговую активность и эмоции.

Кейс 3: Биомасса и ее роль в биоэнергетике

Биомасса, к примеру сельскохозяйственные отходы, представляет собой важный источник биоэнергии. В этом кейсе предлагается исследовать, как биомасса может быть использована для производства тепла и электроэнергии, а также исследовать ее устойчивость.

Определите, какие кейсы реальны для реализации в рамках школьной проектной деятельности. Дайте пояснения: почему кейсы реальны или нереальны для реализации.

Рис. 4. Инфографическая карточка, включающая два задания

В левой части карточки в тексте описывается необходимость процесса фотосинтеза для растений, наиболее эффективного в определенном диапазоне освещения. Тем не менее, при выращивании рассады в теплицах освещение часто является искусственным. Целью проекта описанной ситуации может являться создание спектрометра для исследования спектра искусственных источников света, а задачами исследования могут стать изучение физиологических особенностей процесса фотосинтеза у растений и определение оптимального спектрального диапазона освещения; исследование спектральных характеристик искусственных источников света, применяемых в тепличном хозяйстве; разработка и апробация спектрометрической системы для анализа спектра искусственного освещения; разработка рекомендаций по подбору и использованию оптимальных источников искусственного освещения для повышения эффективности фотосинтеза в тепличных условиях.

Важно, чтобы цели и задачи были достижимы для учеников 10–11 классов, так как зачастую школьники предлагают слишком сложные и нереализуемые в школьных условиях проекты. Здесь демонстрируется, что перед началом проекта необходимо тщательно продумывать, какие шаги будут предприниматься, и возможно ли достичь результата с имеющимися знаниями и инструментарием.

Кейс-ориентированная задача 4

В задаче школьникам предлагается организовать экспедицию в Карелию, длительность которой составляет 3–4 дня. Само задание имеет ряд лимитирующих условий. Школьникам необходимо разработать подробный график и маршрут, максимально повторяющий описанный в исходном материале. Для этого требуется определить последовательность действий, этапы планирования, а также провести всесторонний анализ возможных рисков. Особое внимание уделяется временным ограничениям, большому количеству участников, не имеющих необходимого опыта, а также конкретным требованиям по сбору фото- и видеоматериалов к определенной дате.

Кейс-ориентированная задача 5

Планирование является ключевым этапом в научно-исследовательской и проектной деятельности. Яркий пример ошибок в планировании – город Сонгдо в Южной Корее, на строительство которого было потрачено более 40 млрд дол., но в итоге он стал городом-призраком.

Существует ряд методов, упрощающих процесс планирования, такие как морфологический ящик, «пять почему», диаграмма Исикавы, ленточная диаграмма Ганта. Эти инструменты помогают структурировать план, сделать его более наглядным и прозрачным. Тем не менее, на наш взгляд, наиболее эффективным способом научиться планировать является решение реальных задач, в ходе которых методом проб и ошибок достигаются конкретные результаты.

Но данная задача учит не только планированию: вследствие своей комплексности, она учит именно системному мышлению.

В рамках кейс-ориентированной задачи школьникам предлагается выполнить задание по проектированию микрорайона, причем входные условия максимально приближены к реальным. Задание рассчитано на группы по 5–6 человек и занимает 4 академических часа. На первом занятии происходит основной этап расчета и планирования, а на втором – презентация кейса.

Представленный кейс характеризуется объемной структурой, включающей в себя 16 инфографических карточек, в рамках которых содержится обширный объем необходимой информации, начиная от постановки задачи и заканчивая глоссарием.

Ключевой характеристикой данного кейса является отсутствие единственного и однозначно правильного решения. Второй особенностью является размытость исходных данных и граничных условий, что приводит к ситуациям, когда количественные величины, полученные в ходе расчетов, не соответствуют заранее определенным нормам, указанным в кейсе. Возникает противоречие: с одной стороны, проведены численные расчеты, с другой – они не соответствуют техническому заданию. Поскольку данное задание ориентировано на практическое применение и приближено к реальным условиям, перед учащимися появляется незапланированная задача найти решение, которое бы устраняло возникшие противоречия.

При этом школьникам дается возможность устранить противоречие посредством применения различных решений, таких как, например, корректировка граничных условий в техническом задании, введение новых параметров, а также введение дополнительных условий. Предлагаемые решения должны быть надлежащим образом аргументированы и согласованы с модератором-преподавателем.

Задание включает в себя несколько ключевых пунктов: расчет жилого фонда и численности населения микрорайона на основе предоставленных демографических данных. Далее следует распределение жилых домов различной этажности и планирование инфраструктуры: размещение объектов повседневного обслуживания, транспортной сети, парковок и зон отдыха. При этом необходимо учитывать нормативные требования к доступности и взаимному расположению объектов.

Основной сложностью является необходимость согласования различных элементов планирования, таких как жилой фонд, количество семей, учреждения и объекты инфраструктуры.

В качестве примеров обустройства микрорайона предлагаются варианты планировочных решений, обучающимся предоставляется возможность как использовать предложенные варианты, так и разработать собственное решение. На защите проекта команды представляют детальный план планирования микрорайона, подкрепленный соответствующими расчетами (рис. 5).

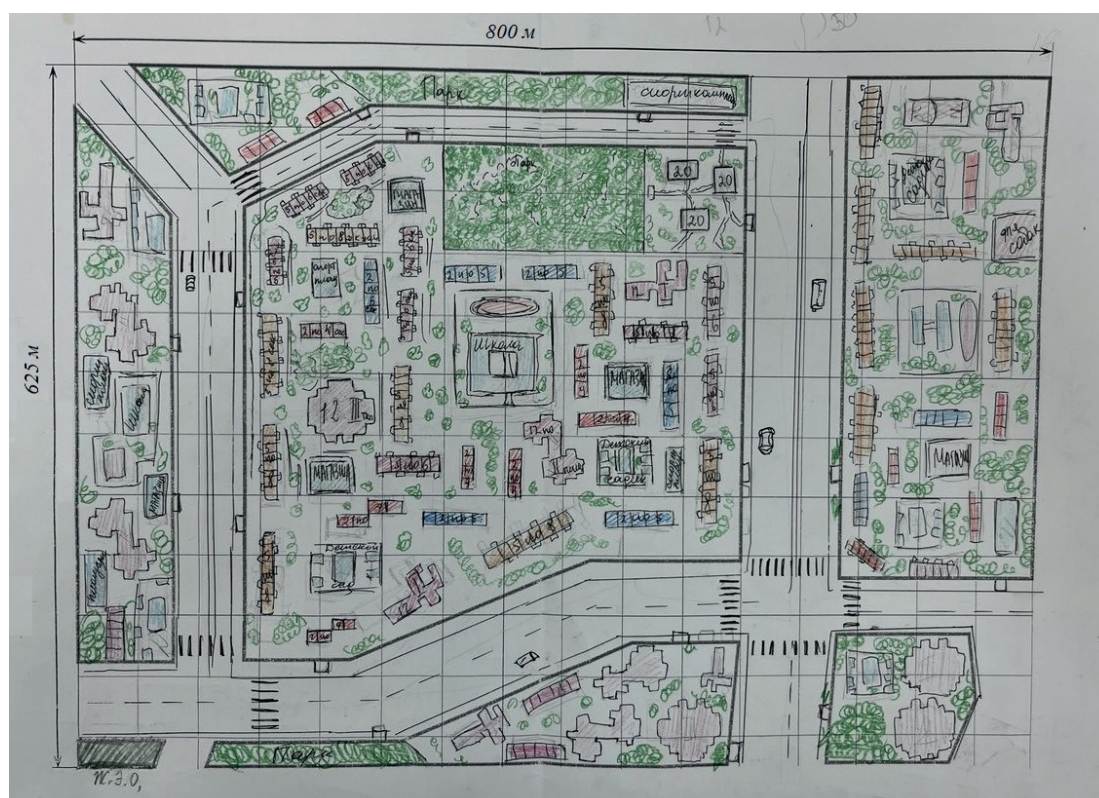


Рис. 5. Пример визуализации решения кейс-ориентированного задания «Проектирование микрорайона»

Еще стоит отметить, что решение именно этой задачи заставляет обучающихся комплексно использовать ранее полученные знания из школьной программы, как, например, геометрию и математику – для определения нужного количества зданий и их размещения, обществознание – для определения инфраструктуры микрорайона, взаимоувязывая их в целостную систему.

Представленный кейс был предложен не только учащимся старших классов лицея-предуниверситария НИЯУ МИФИ, но и в ходе проведения предпрофессиональных каникул, в которых приняли участие более 15 московских школ, при этом общее количество учеников, решавших данный кейс, превысило 190 человек. Этот опыт иллюстрирует возможность масштабирования подобного рода заданий с вовлечением значительного числа участников.

Выводы

Как показал опыт реализации курса по решению кейс-ориентированных задач, такого рода методологические подходы развивают навык самостоятельного поиска, способствуют вовлеченности в учебный процесс, повышают мотивацию к обучению, что в итоге приводит не только к более высоким академическим результатам¹ [5, 6], но и к формированию навыков системного мышления, именно эта задача решалась разработчиками курса. Разработчики курса отмечают, что самостоятельный поиск решения кейс-ориентированных задач также вырабатывает чувство ответственности за результат, поскольку достигнут он был не с помощью литературных источников или педагогов, а с помощью самостоятельного подбора и анализа разных вариантов.

Безусловно, предстоит еще разработать критерии для будущей оценки эффективности курса, но уже сейчас можно сделать вывод, что решение кейс-ориентированных задач является эффективным инструментом для развития именно системного мышления, предоставляя учащимся возможность самостоятельно решать задачи в условиях неопределенности.

¹ Интервью Министра просвещения Российской Федерации Сергея Кравцова телеканалу «Россия 24» 08 июня 2022. Сайт Министерства просвещения РФ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://edu.gov.ru/> (дата обращения 10.02.2025).

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Врублевская Е.Г. – постановка задачи исследования, анализ содержания описываемого курса, редактирование текста статьи.

Генисаретская С.В. – формирование описываемого курса, анализ содержания курса, редактирование текста статьи.

Соловьев А.А. – формирование и реализация описываемого курса, обработка результатов.

Список литературы

1. Постнеклассика: философия, наука, культура: Коллективная монография / Отв. ред. Л.П. Киященко и В.С. Степин. СПб.: Издательский дом «Миръ», 2009. 672 с.

2. Гессен С.И. Основы педагогики. Введение в прикладную философию: Учебное пособие для вузов. М.: Школа Пресс, 1995. 448 с.

3. Ворончихина Т.В., Ивонин А.О. Развитие познавательной активности студентов в процессе обучения в современном вузе // Современные модели подготовки научных и научно-педагогических кадров в высшей школе, 2012. С. 39–41.

4. Генисаретская С.В. Опыт построения курса [Электронный ресурс] «Критическое мышление и основы научной коммуникации» в техническом университете // Письма в Эмиссия. Оффлайн (The Emissia.Offline Letters): электронный научный журнал. 2022. № 2 (февраль). ART 3037. Режим доступа: <http://emissia.org/offline/2022/3037.htm> (дата обращения: 10.02.2025).

5. Косикова С.В. О сущности учебной самостоятельности школьников и уровнях ее развития // Проблемы современного образования. 2018. № 4. С. 143–150. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.pmedu.ru> (дата обращения: 10.02.2025).

6. Апиш Ф.Н. Самостоятельная работа как способ развития мотивации и самоорганизации учебной деятельности студента // Культурная жизнь юга России, 2008. № 2 (27). С. 45–47.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 2, pp. 173–181

Initial stages of formation of systems thinking among schoolchildren

Е. Г. Vrublevskaya¹, S. V. Genisaretskaya^{2, ✉}, A. A. Solovyov^{2, ✉}

¹ Smolensk State University, Smolensk, 214000, Russia

² National Research Nuclear University “MEPhI”, Moscow, 115409, Russia

✉ SVGenisaretskaya@mephi.ru

✉ ASolovev@mephi.ru

Received March 17, 2025; revised April 10, 2025; accepted April 11, 2025

Today the processes that take place in society, science, high-tech production, and industry can be characterized as complex systems. In order to solve complex problems, new employees with systemic thinking are needed. One of the key issues of modern pedagogy is the search for tools for the development of systems thinking. At the same time, the key point of teaching systems thinking

should be the formation of such thinking, when goal-setting, responsibility for the result and for the consequences of certain decisions would be naturally formed in the process of learning. In schools and universities, separate courses, project-based forms of learning, etc., can be used as such tools aimed at the development of students' systems thinking, desire for knowledge, responsibility for decision-making. The article describes an experimental interactive course on solving case-oriented problems developed and implemented in MEPhI. The course was developed for high school students of the high school lyceum-preduniversitarium of MEPhI. The peculiarity of the course is its interactive character; the teacher acts as a moderator, interacting both with students and organising their interaction among themselves. This methodological approach not only forms systemic thinking as such, but also develops the skill of independent search, promotes involvement in the learning process, and increases motivation for learning.

Keywords: thinking, systems thinking, cases, case-oriented tasks, project forms of education, MEPhI, MEPhI Pre-University.

References

1. Postneklassika: filosofiya, nauka, kul'tura [Postneclassics: Philosophy, Science, Culture], SPb.: Izdatel'skij dom "Mir" Publ., 2009. 672 p. (in Russian).
2. Gessen S.I. Osnovy pedagogiki. Vvedenie v prikladnuyu filosofiyu [Fundamentals of Pedagogy. Introduction to Applied Philosophy]. Moscow, Shkola Press Publ., 1995. 448 p. (in Russian).
3. Voronchihina T.V., Ivonin A.O. Razvitie poznavatel'noj aktivnosti studentov v processe obucheniya v sovremennom vuze [Development of cognitive activity of students in the process of learning in a modern university]. *Sovremennye modeli podgotovki nauchnyh i nauchno-pedagogicheskikh kadrov v vysshej shkole*, 2012. Pp. 39–41 (in Russian).
4. Genisaretskaya S.V. Opyt postroeniya kursa «Kriticheskoe myshlenie i osnovy nauchnoj kommunikacii» v tekhnicheskom universitete [Experience of building the course «Critical thinking and the basics of scientific communication» in a technical university]. *Pis'ma v Emissiya.Offline* (The Emissia.Offline Letters): elektronnyj nauchnyj zhurnal. 2022. № 2 (fevral'). ART 3037. Available at: <http://emissia.org/offline/2022/3037.html> (accessed 10.02.2025).
5. Kosikova S.V. O sushchnosti uchebnoj samostoyatel'nosti shkol'nikov i urovnyah ee razvitiya. [About the essence of educational independence of schoolchildren and levels of its development]. *Problemy sovremennogo obrazovaniya*, 2018. No. 4. Pp. 143–150. Available at: <http://www.pmedu.ru> (accessed 10.02.2025).
6. Apish F.N. Samostoyatel'naya rabota kak sposob razvitiya motivacii i samoorganizacii uchebnoj deyatel'nosti studenta [Independent work as a way to develop motivation and self-organization of student's learning activity]. *Kul'turnaya zhizn' yuga Rossii*, 2008. No. 2 (27). Pp. 45–47 (in Russian).