

УДК 004.942 + 629.039.58

О. О. Кряжич¹, О. В. Коваленко²

ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЦІЙНОГО ЗАБРУДНЕННЯ ТЕХНОГЕННИМ ТРИТІЄМ

¹Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України, м. Київ²Інститут ядерних досліджень НАН України, м. Київ

Анотація. Запропоновано підхід до моделювання радіаційного забруднення оточуючого середовища радіоізотопом водню – тритієм. При моделюванні враховано особливості тритію. Моделювання виконано за допомогою просторів пов'язаних різномасштабних моделей стану системи. Адекватність визначено за допомогою критеріїв часу та повноти інформації за результатами моніторингу системи, що досліджується. Задача мінімізації помилок при ітераціях вирішується розкладанням функцій за нев'язками. Теоретичні викладки підтверджено комп'ютерним експериментом.

Ключові слова: модель, система, техногенний тритій, інформація, час.

Анотация. Предложен подход к моделированию радиационного загрязнения окружающей среды радиоизотопом водорода - тритием. При моделировании учтены особенности трития. Моделирование выполнено с помощью пространств связанных разномасштабных моделей состояний системы. Адекватность определена с помощью критериев времени и полноты информации по результатам мониторинга исследуемой системы. Задача минимизации ошибок при итерациях решается разложением функций по невязкам. Теоретические основы подтверждены результатами компьютерного эксперимента.

Ключевые слова: модель, система, техногенный тритий, информация, время.

Abstract. The approach to the simulation of radiation pollution by the radioisotope of hydrogen - tritium. In the simulation include the peculiarities of the tritium. The simulation is performed using the associated spaces of different scale models of the States of the system. The adequacy is defined by using the criteria time and completeness of the information on the monitoring results of the system which is investigated. The problem of minimizing the errors in the iteration is solved by a decomposition of functions with residuals. Theoretical bases confirmed by the results of computer experiment.

Key words: model, system, technogenic tritium, information, time.

Вступ

В практичній діяльності із забезпечення функціонування техногенної системи за її регламентом часто виникає задача розрахунку вірогідності використання компонентів системи, що забезпечать функціонування на деякому відрізку часу t без помилок. У разі аварії з викидом радіонуклідів обмеженість інформації про подію часто не дозволяє створити адекватну (безпомилкову) модель системи, а ситуація вимагає термінових оперативних дій в перші хвилини розвитку надзвичайної події. Тривалий час викидам радіоізотопу водню – тритію (Т), – не приділяли значної уваги через низький рівень його проникнення через зовнішні покриви і шкіру, поки не було виявлено, що тритій заміщує атоми водню і здатен опромінювати організм із середини.

Актуальність

Через відсутність моделей, що описують міграцію тритію у різних площинах оточуючого середовища, дії з мінімізації потрапляння техногенного тритію, що викидається під час роботи АЕС і підприємств ядерного синтезу, є малоефективними. Останнім часом спостерігається стрімке забруднення екосистем різних країн світу [1, 2, 3].

Більшість існуючих моделей міграції тритію описують цей процес у водному середовищі «за ланцюгом «сховище відходів – ґрунтові води – водойми – питна вода» [4] та накопичення тритію в технологічних середовищах атомних електростанцій з реакторами ВВЕР [5]. Деякі моделі мають досить спрощене представлення і потребують подальших детальних розрахунків по гідрогеології досліджуваного елемента [6]. Окремі елементи міграції тритію у оточуючому середовищі представлені у [1].

Підвищення рівня накопичення тритію у вигляді оксиду тритію (НТО) та органічно зв'язаного тритію (ОЗТ) в оточуючому середовищі ядерних установок, а також активізація робіт з використання термо-ядерних установок з тритієм, призводять до необхідності дослідження процесів міграції тритію у екосистемі в цілому, а не лише у водних об'єктах. Розвиток атомної енергетики та активізації процесів переробки відпрацьованого ядерного палива призвів до значного збільшення техногенного тритію в гідросфері, атмосфері, у підземних водах.

Дослідники мають відносно незначні досягнення у зазначеній сфері: радіобіологічні властивості тритію вивчені недостатньо, оцінки концентрацій тритію у питній воді за даними та методиками ВООЗ, ЕАТОМ та МАГАТЕ, а також згідно наукових публікацій різних країн світу є протилежними та суперечливими. Існуючі програми моделювання розповсюдження радіонуклідів (наприклад, FEFLOW, Flow3D) не забезпечують можливості моделювання руху тритію.

Актуальність досліджуваної теми полягає в тому, що фізико-хімічні властивості тритію значно відрізняються від властивостей інших радіонуклідів і, навіть, від інших ізотопів водню. Саме тому міграція дейтерію – важкого ізотопу водню, – добре досліджена, на відміну від міграції тритію, за якою ще не представлено цілісної моделі. Унаслідок малої енергії випромінювання, тритій не призводить до зовнішнього опромінювання, проте надходить за харчовими ланцюгами в організм людини з їжею та водою, проникає з повітрям, що вдихається, та швидко замінює атоми водню, бо у процесах хімічного обміну цей радіонуклід має всі властивості атому водню. Тритій, що потрапив усередину клітин організму, спричиняє більші uszkodження, ніж прямий вплив радіації, бо продукти розпаду стають джерелами внутрішнього опромінювання, призводять до uszkodження органічних комплексів та ДНК, порушення кровотворення та виникнення злоякісних утворень. Це потребує визначення нових підходів до моделювання зазначеного радіонукліду з метою створення моделей міграції тритію при радіаційному забрудненні.

Мета

Метою даної роботи є розвиток підходу до моделювання міграції радіоізотопу водню – тритію, з врахуванням критеріїв часу, що дозволить створити перехід від статичних до динамічних моделей просторів станів середовища з мінімізацією помилок через обмеженість інформації про подію шляхом розкладення функцій за нев'язками, що дозволить чітко визначати кордони розповсюдження радіонукліду в залежності від часу з моменту настання небезпечної події.

Задачі

1. Розглянути особливості, які слід враховувати при моделюванні міграції радіоізотопу водню – тритію.
2. Обґрунтувати підхід до визначення адекватності моделі з врахуванням критеріїв часу та повноти інформації, при описуванні стану системи.
3. Запропонувати метод мінімізації помилок при моделюванні радіаційного забруднення техногенним тритієм.

Особливості моделювання міграції тритію

Проблема виявлення і прогнозування розповсюдження тритію в оточуючому середовищі полягає в фізико-хімічних особливостях водню, який знаходиться у оточуючому середовищі та організмі живих істот майже лише у вигляді сполук. Чистий водень у незначній кількості знаходиться в атмосфері і збільшується з висотою. Найпоширенішою сполукою водню є вода.

Водень – H_2 є двоатомним найлегшим газом без кольору, запаху і смаку. Електронна конфігурація атому водню ($1s^1$) визначає його основні властивості. Атом має один електрон з $Z = (-1)$, який обертається по орбіті навколо ядра, що містить один протон з одиничною масою і позитивним зарядом (+1). Процес віддачі електрону ріднить водень з металами, а маленька маса і розмір атомів обґрунтовують його здатність проникати через різні речовини. Фізичні властивості водню найбільш яскраво проявляються особливостями речовин, до яких входять різні ізотопи водню. Зокрема, якщо до води замість найпоширенішого атому 1H , входить 2H , - його ізотоп з двома елементарними частинками (позитивною і незарядженою), то утворюється важка дейтерована вода. Тритій (Т) 3H має в ядрі два нейтрона і один протон, є радіоактивним елементом і, відповідно, утворює тритійовану воду. Тритій може розпадатися до моноатомного газу з випромінюванням β -частинки і антинейтрино із свого ядра.

Накопичення і міграція тритію визначається часом перебування, місцем знаходження і інтенсивністю обміну у повітряних масах, а також концентрацією тритію у стратосфері протягом обмінних процесів. Обмін відбувається взимку та восени у барокліматичних зонах та тропопаузі середніх широт. Щорічно кількість тритію у тропосфері зменшується на 5,5% через радіоактивний розпад та переміщення у вигляді опадів на земну поверхню. Тривалість перебування пари тритію в нижніх шарах тропосфери становить 5-20 діб. Влітку над землею концентрація тритію нижче від 2 км підвищується через випаровування весняних і зимових атмосферних опадів, а над морями на ту ж відстань – зменшується через поглинання тритію водою. Кругообіг атмосферної води через повітряно-океанічний обмін відбувається дуже швидко, тому внаслідок швидкого обміну ізотопів між краплями води й паром, дощі переносять тритій у нижні шари тропосфери [1].

Завдяки високому коефіцієнту дифузії, тритій легко проникає крізь пористі матеріали, а також метали, з утворенням тритидів металів. Різна глибина проникнення β -частинок обумовлена їх різною енергією. Електронна конфігурація тритію аналогічна конфігураціям дейтерію і протію, але хімічні властивості мають деякі відмінності, що обумовлене різницею атомних мас. Ця електронна конфігурація сприяє і легкому обміну з атомом водню органічної молекули. А враховуючи те, що атоми водню містяться майже всюди, атоми тритію легко заміщують атоми протію або дейтерію і утворюють тритійовані молекули.

Тритій може існувати у вигляді молекулярного тритію T_2 , утворювати молекули прототритію HT (тритій-газ) з іншими ізотопами, дейтеротритію DT , існувати у формах оксидів тритію DTO , HTO , T_2O ,

ТМе та органічно зв'язаного тритію ОЗТ. Найактивнішими є водні форми. Найбільш розповсюдженою формою існування тритію в оточуючому середовищі є оксид тритію НТО, що утворюється з тритій-газу в результаті обмінних реакцій з водою чи окислення.

Складність моделювання міграції радіонуклідів обумовлена тим, що в атмосфері, де відбувається перенос радіоактивно забруднених часток викиду, процес циркулювання може відбуватися зі значними перепадами. Тому запропоновано [7, 8] перехід до моделювання переносу тритію в інших середовищах за допомогою просторів пов'язаних різномасштабних моделей стану системи з врахуванням того факту, що живий організм мешкає в деякому оточуючому середовищі, на яке впливають різні фактори.

Досліджуючи підприємство, що може стати джерелом викиду тритію в оточуюче середовище, можна визначити деяку ділянку площини R , $\Omega \subset R$, яка представляє собою адміністративно обмежену територію (місто, регіон), $\vec{r} \in R$. Простори для опису стану системи, можна представити наступним чином:

$X = X(\Omega, R^n)$ – простір станів підприємства – множина вектор-функцій $x : \Omega \rightarrow R^n$,

$x(\vec{r}) = (x_1(\vec{r}), \dots, x_n(\vec{r}))$;

$Y = Y(\Omega, R^m)$ – простір станів забруднення оточуючого середовища – тензорний добуток двох векторів стану середовища та стану людини в цьому середовищі, у підсумку чого відбувається композиція двох функцій: $F : Y \rightarrow N$ та $G : F(Y) \subset N \rightarrow Z$. Їх композицією буде функція $G \circ F : Y \rightarrow Z$, яка може бути представлена рівнянням $(G \circ F)(y) = G(F(y))$, $y \in Y$ та описана множиною вектор-функцій $y : \Omega \rightarrow R^m$, $y(\vec{r}) = (y_1(\vec{r}), \dots, y_m(\vec{r}))$;

$V = V(\Omega, R^k)$ – простір станів оточуючого середовища, фактично це – результати моніторингу середовища, що попало під вплив тритію, які можуть бути представлені як множина вектор-функцій $v : \Omega \rightarrow R^k$, $v(\vec{r}) = (v_1(\vec{r}), \dots, v_k(\vec{r}))$;

$W = W(\Omega, R^p)$ – простір небезпечних впливів тритію на оточуюче середовище та людину, які можуть бути представлені як порушення регламенту при оперуванні ресурсами підприємства з виконання поставленого виробничого завдання. Це може бути представлене як множина вектор-функцій $w : \Omega \rightarrow R^p$, $w(\vec{r}) = (w_1(\vec{r}), \dots, w_p(\vec{r}))$.

Простори для опису можливих операцій по мінімізації впливу тритію, що відбуваються у досліджуваній системі, можуть традиційно бути розглянутими, як контрзаходи на подію:

$K(X)$ – простір операцій по відношенню до небезпечного підприємства або окремого підрозділу, де $a = (a_1, \dots, a_r) \in K(X)$;

$K(V \times Y)$ – простір операцій по відношенню до оточуючого середовища, включаючи тензорний добуток двох векторів стану середовища, що забруднене тритієм, та стану людини в цьому середовищі, де $b = (b_1, \dots, b_n) \in K(V \times Y)$;

$\varphi \in \Phi$ – простір інших критеріїв, що мають суттєвий вплив на систему, що досліджується.

Точки просторів операцій $K(X)$, $K(V \times Y)$ у параметричному вигляді задають вплив, який здійснюється на систему. Компоненти векторів можуть бути представлені числовими або логічними змінними. Приклади означення просторів наступне:

$x \in X$ – вплив небезпечного підприємства на оточуюче середовище за кожною компонентою забруднення тритієм;

$y \in Y$ – розсіювання тритію в середовище з впливом на людину.

Зв'язки між просторами визначатимуться наступним чином:

$F : X \times V \rightarrow Y$ визначає стан забруднення середовища за результатами моніторингу стану середовища та стану підприємства;

$J : X \times Y \rightarrow W$ визначає збиток в залежності від стану середовища та стану об'єкта.

Аналогічно будуються й інші зв'язки досліджуваних просторів. А власне визначення величин критеріїв L можна здійснити за моделлю:

$$L : X \times V \times K(X) \times K(V \times Y) \times K(F) \times K(J) \times W \rightarrow \Phi \xrightarrow{U} R, \quad (1)$$

де R виступає керованим режимом функціонування підприємства, на повернення до якого і спрямовані зусилля осіб, що приймають рішення за ситуацією. Частково наведений підхід був представлений у [7-8, 10].

Підхід до визначення адекватності моделі з врахуванням критеріїв часу та повноти інформації

Функціонування складної системи характеризується описом ситуацій (1), які показують її стан, наприклад, S_1, S_2, \dots, S_n , де кожен стан S_n заданий конкретними показниками процесів функціонування системи (Y_n, X_n, U_n), впливом зовнішнього середовища та факторів ризику Ξ_k :

$$S_n = \{(Y_n \in Y) \wedge (X_n \in X) \wedge (U_n \in U) \wedge (\Xi_n \in \Xi)\}, \quad (2)$$

де значення показника в момент часу $T_n \in T^\pm$ визначається з відношення:

$$\begin{aligned} Y_s &= \hat{Y}[T_s]; X_s = \hat{X}[T_s]; U_s = \hat{U}[T_s]; \Xi_s = \hat{\Xi}[T_s]; \\ T_s &= \{t_s | t_s > t_{s-1}\}; T_s \in T^\pm; T^\pm = \{t | t^- \leq t \leq t^+\}; \\ Y &= (Y_i | i = \overline{1, m}); X = (X_j | j = \overline{1, n}); \\ U &= (U_q | q = \overline{1, Q}); \Xi = (\Xi_p | p = \overline{1, P}), \end{aligned} \quad (3)$$

де Y – множина зовнішніх параметрів Y_i , яка утримує всі показники якісного функціонування системи, у тому числі – безпечного функціонування;

X – множина внутрішніх параметрів X_j , до складу якої входять конструктивні, технологічні та інші показники;

U – множина керуючих параметрів U_q ;

Ξ – множина параметрів впливу оточуючого середовища Ξ_p та факторів ризику;

$\hat{Y}[T_s], \hat{X}[T_s], \hat{U}[T_s], \hat{\Xi}[T_s]$ – множина значень відповідних параметрів в час T_s ;

T^\pm – заданий або прогнозований відрізок часу функціонування системи. Для дослідження зв'язків між просторами стану системи у часі слід в моделі, що будується, представити цей відрізок як $t + \Delta t$, з врахуванням можливих змін впливу факторів різномірних середовищ за час Δt .

Наскільки адекватною буде модель переносу тритію, представлена через простори пов'язаних різномасштабних моделей стану, можна визначити через аналіз впливу компонентів системи за критерієм «успіх-відмова». У випадку, що розглядається, під «успіхом» мається на увазі створення моделі певного кругообігу тритію в оточуючому середовищі без втрати окремих компонентів системи, під «відмовою» – адекватність моделі лише в якомусь або декількох просторах, що описують систему.

Індикатор успіху для деякого компоненту – двійкова випадкова змінна X_i , яка вказує статус компонента, що досліджується. $X_i = 1$ є успішною дією компоненту в роботі моделі. Якщо $X_i = 0$, то компонент втрачено, тобто досліджуваний компонент став причиною відмови моделі. Вектор статусу системи – вектор складових індикаторів статусу:

$$X = (X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (4)$$

Є 2_n можливості реалізації вектора (4) у часі для опису адекватності моделі, що описує систему переносу тритію, через статус успіху або відмови:

$$X(t) = (X_1, X_2, \dots, X_n, t) \quad (5)$$

Тобто, в якийсь момент часу модель використовує всі означені компоненти з метою отримання реальної картини стану середовища, що моделюється, або відмови якогось компоненту та отримання хибної картини стану системи.

Враховуючи прийнятну структуру системи, що представлена просторами пов'язаних різномасштабних моделей стану, можна визначити, наскільки вона є адекватною. Адекватність p_i є вірогідністю того, що компоненти моделі підібрані і діють правильно на визначеному відрізку часу. Вірогідність відмови q_i є вірогідністю того, що компоненти різномасштабних моделей підібрані невірно і у випадку змін модель не зможе бути адаптованою на визначеному відрізку часу. Приймаємо умову, що компоненти, які впливають на систему, незалежні. Тоді вірогідність адекватності моделі можна представити наступним чином:

$$p_i(t) = P(t)\{X_{i+\Delta t} = 1\},$$

$$q_i(t) = P(t)\{X_{i+\Delta t} = 0\} = 1 - p_{i+\Delta t}(t). \quad (6)$$

Виходячи з виразу (3) можна зробити висновок, що є можливість представити міграцію тритію за всіма різномірними середовищами екосистеми з врахуванням його фізико-хімічних властивостей у будь-якій точці визначеного часового інтервалу.

Розглядаючи екосистему як деяку складну модель S , можна зазначити, що при її описі використовується і переробляється декілька видів інформації, в тому числі – інформація, що змінюється в часі:

$$J(S, t) = \{J_1(S, t), J_2(S, t), \dots, J_r(S, t)\}. \quad (7)$$

Оскільки адекватність може бути представлена, як функція часу і інформації, що отримується за цей час, то роботу цієї моделі можна представити як задачу моделювання вірогідності розвитку деякої ситуації з переносу тритію на окремі, чітко означеній території, в часі [9].

Загальне рішення цієї задачі буде складатися з вирішення ряду часткових задач, зокрема – ітерації з обробки кожного виду інформації $J_k(S, t)$, $k = 1, \dots, r$ на відрізку часу $[t_1, t_2]$.

Приймаємо, що ітерації з обробки інформації $J'(S, t)$, $J'(S, t) = J_k(S, t)$, $k = 1, \dots, r$ мають вигляд:

$$J'(S, t) = \|i(S_l, t)\|_{l=1}^p, \quad (8)$$

де $i(S_l, t)$ – інформація, що отримана з джерела інформації S_l , $l = 1, \dots, p$.

Враховуючи, що дані моніторингу про стан оточуючого середовища можна отримувати безперервно, можна прийняти, що модель S є адекватною в момент часу t , якщо всі джерела інформації S_l , $l = 1, \dots, p$ надають інформацію, що знаходиться в деякій припустимій області O_l . У разі, якщо хоча б одне джерело інформації S_l надає дані, що виходять за межі області, що досліджується, можна казати, що побудована модель не є адекватною.

Таким чином, адекватність побудованої моделі S в момент часу t буде спостерігатися лише у випадку, коли всі джерела інформації моніторингу реальної системи не будуть виходити за межі відповідних припустимих областей, що використані при створенні моделі.

Досліджуючи зміни в часі показників моніторингу від джерел інформації, можна зробити деякі прогнози відносно адекватності моделі, що побудована.

Нехай припустима область змін показників джерел інформації S_l за результатами моніторингу системи представлена колом (сферою) O_l з центром в деякій точці M_l . Нехай радіус цього кола буде R_l . Якщо в деякий момент часу t' інформація, яка поставляється джерелом S_l , буде відповідати центру інформаційного кола O_l , то вірогідність P_l адекватності моделі S , згідно джерелу S_l , буде оцінена в одиницю. Наближення інформаційних даних до межі припустимої області O_l буде визначати зменшення вірогідності адекватності моделі S . На самій межі припустимої області цю вірогідність приймемо такою, що дорівнює нулю. Час t_l^0 , за який $P(S_l, t) = 0$ буде критичним за джерелом S_l . Якщо прийняти до уваги всю сукупність джерел інформації про адекватну роботу моделі S , то критичним часом роботи моделі S можна вважати:

$$t_{\text{крит}} = \min(t_1^0, t_2^0, \dots, t_p^0), \quad (9)$$

Виходячи із запису (9), можна визначити вірогідність настання критичного стану (відмови) моделі S :

$$P(S, t) = \min(P_1(S, t), P_2(S, t), \dots, P_p(S, t)). \quad (10)$$

Визначення вірогідності настання критичного стану системи за (10) є ітераційним процесом, а модель (1) вимагає з кожним кроком отримувати більш точне наближення з мінімізацією погрешності від обчислень для створення моделі в режимі реального часу. У цьому випадку може бути застосовано підхід розкладання функцій за нев'язками.

Метод мінімізації помилок при моделюванні

Розкладання функцій за нев'язками дозволяє отримати оптимальні по точності ітераційні формули довільного порядку збіжності, узгоджені з використовуваними початковими наближеннями, як за раху-

нок використання найкращих наближень, так шляхом використання спеціальних норм погрішностей, що враховують структуру нев'язки.

Враховуючи, що моделювання стану системи через просторів пов'язаних різномасштабних моделей у більшості випадків виступатиме ітеративним процесом, бо біоміграція тритію є складною та малодослідженою, тож моделювання міграції буде проходити в кожній фазі цикл: планування – реалізація – перевірка – оцінка. А дуже важливим у використанні розкладань функцій по нев'язках являється та обставина, що вони являються досить ефективним способом для розпаралелювання ітеративних процесів. Наприклад, величина нев'язки $Z_0 = F(x, y_0)$ характеризує близькість початкового наближення y_0 до шуканої функції $y = f(x)$. Таким чином параметр y_0 виступає в ролі елементу адаптації до умов застосування. Чим ближче y_0 до шуканої функції, тим величина нев'язки є ближчою до нуля.

У ряді випадків, з метою зменшення погрішностей округлення (особливо при численні великих функцій), є доцільним не робити згортку розкладань за нев'язками (приведення загальних членів), а залишити ці розкладання в початковому вигляді.

Враховуючи поставлену задачу, розглянемо одну з функцій множини вектор-функцій $x: \Omega \rightarrow R^n$, $x(\vec{r}) = (x_1(\vec{r}), \dots, x_n(\vec{r}))$ простору станів підприємства $X = X(\Omega, R^n)$.

Нехай функція задана в неявному виді:

$$F(x, y) = 0 \quad (11)$$

Розглянемо нев'язку:

$$Z_0 = F(x, y_0) \quad (12)$$

де – y_0 наближення функції на заданому інтервалі $[a, b]$ і $\lim_{y_0 \rightarrow y} Z_0 = 0$. Величина погрішності нев'язки може бути отримане шляхом підставки у вираз (12) величини $y_0 = y(1 + \delta_0)$ або $y_0 = y + \Delta_0$, де δ_0, Δ_0 відповідно відносна і абсолютна погрішності.

Запишемо рівняння (11) у вигляді

$$\Phi(x, y_0, z_0) = 0. \quad (13)$$

Запропонуємо, що функція $\Phi(x, y_0, z_0)$ визначена і безперервна в області

$$D = \{x^0 - \Delta_1, x^0 + \Delta_1, y_0^0 - \Delta_2, y_0^0 + \Delta_2, z_0^0 - \Delta_3, z_0^0 + \Delta_3\},$$

- з центром в точці (x_1^0, y_1^0, z_0^0) ;
- приватні похідні $\Phi'_x, \Phi'_y, \Phi'_z$ існують і безперервні в області D;
- функція Φ в точці (x^0, y^0, z_0^0) перетворюється на нуль;
- приватна похідна $\Phi'_x(x^0, y_0^0, z_0^0) \neq 0$.

При цих припущеннях за теоремою про неявну функцію від декількох змінних рівняння (13) визначає x як однозначну функцію від y_0, z_0 , тобто

$$x = \varphi(y_0, z_0) \quad (14)$$

При $y_0 = y_0^0, z_0 = z_0^0$ ця функція набуває значення $x^0 = \varphi(y_0^0, z_0^0)$ і окрім цього, функція $\varphi(y_0, z_0)$ безперервна по сукупності своїх аргументом і має безперервні приватні похідні $\varphi'_{y_0}, \varphi'_{z_0}$.

Грунтуючись на рівнянні (11), можна записати рівність

$$f(x) = f[\varphi(y_0, z_0)],$$

де – $f(x) \equiv y$ шукана функція; $f[\varphi(y_0, z_0)]$ – суперпозиція функцій f і φ .

Розклавши функцію $f[\varphi(y_0, z_0)]$ за ступенями z_0 в межах точки $M_l(y_0, 0)$, враховуючи (10) в кратний ряд Тейлора, отримаємо наступний ряд нев'язок:

$$\begin{aligned} y &= f[\varphi(y_0, 0)] + \frac{\partial}{\partial z_0} (f[\varphi(y_0, z_0)]|_{z_0=0}) z_0 + \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial z_0^2} (f[\varphi(y_0, z_0)]|_{z_0=0}) z_0^2 + \dots + \\ &+ \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial z_0^k} (f[\varphi(y_0, z_0)]|_{z_0=0}) z_0^k + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Відмітимо, що члени розкладання в ряд Тейлора функції $f[\varphi(y_0, z_0)]$ з похідними по y в точці $M_l(y_0, 0)$ дорівнюють нулю, оскільки множаться на величину $(y - y_0)^k|_{y=y_0} = 0$.

В деяких випадках для отримання ряду нев'язок у виді

$$y = \psi(y_0) \sum_{k=0}^{\infty} a_k t_0^k, \quad y = y_0 + \sum_{k=1}^{\infty} b_k t_0^k \quad (16)$$

робиться заміна $t_0 = H(y_0, z_0)$. В окремому випадку можливі рівності $t_0 \equiv z_0$, $\psi(y_0) \equiv y_0$.

Для збіжності отриманого розкладання до функції $f(x)$ в межах точки $M_l(y_0, 0)$ необхідно і достатньо (7), щоб функція $f[\varphi(y_0, z_0)]$ мала область D безперервних приватних похідних будь-якого порядку і $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = 0$, де R_n – залишковий член кратного ряду Тейлора (15).

При значенні y_0 , що дорівнює, розкладання (15) і (16) перетворюються на звичайне розкладання функції в ряд Тейлора.

Розглянемо декілька окремих випадків розкладання в ряд нев'язок для часто вживаних в практичних застосуваннях нев'язок.

Нехай задана нев'язка функції $y = f(x)$ у вигляді $z_0 = x - f^{-1}(y_0)$, де $f(y)$ – функція, зворотна до $f(x)$. При $y_0 = y$ отримуємо $z_0 = 0$. В цьому випадку $x = z_0 + f^{-1}(y_0)$, звідки $f(x) = f(z_0 + f^{-1}(y_0))$

Розклавши функцію $f(z_0 + f^{-1}(y_0))$ в ряд Тейлора, отримаємо

$$f(x) = f(f^{-1}(y_0)) + f^{(1)}(f^{-1}(y_0)) z_0 + \frac{f^{(2)}(f^{-1}(y_0))}{2!} z_0^2 + \frac{f^{(3)}(f^{-1}(y_0))}{3!} z_0^3 + \dots$$

У іншому виді з урахуванням того, що $f(f^{-1}(y_0)) = y_0$, $f^{-1}(y_0) = x_0$, отримаємо

$$f(x) = y_0 + y^{(1)}(x_0) z_0 + \frac{y^{(2)}(x_0)}{2!} z_0^2 + \frac{y^{(3)}(x_0)}{3!} z_0^3 + \dots \quad (17)$$

В деяких випадках виникає необхідність обчислювати функцію $f^{-1}(x)$, взаємно-зворотну до функції $f(x)$. Взявши за нев'язку $z_0 = x - f(y_0)$, де y_0 – наближене значення функції $f^{-1}(x)$ на заданому інтервалі, отримаємо $x = z_0 + f(y_0)$. З останнього рівняння можна записати:

$$\begin{aligned} f^{-1}(x) &= f^{-1}(z_0 + f(y_0)) = y_0 + \frac{1}{f^{(1)}(y_0)} z_0 - \frac{f^{(2)}(y_0)}{2!(f^{(1)}(y_0))^3} z_0^2 + \\ &+ \frac{3(f^{(2)}(y_0))^2 - f^{(1)}(y_0)f^{(3)}(y_0)}{3!(f^{(1)}(y_0))^5} z_0^3 - \\ &- \frac{15(f^{(2)}(y_0))^3 - 10f^{(1)}(y_0)f^{(2)}(y_0)f^{(3)}(y_0) + (f^{(1)}(y_0))^2 f^{(4)}(y_0)}{4!(f^{(1)}(y_0))^7} z_0^4 + \dots \end{aligned} \quad (18)$$

Розкладання (17) і (18) з успіхом можуть бути використані для обчислення ряду елементарних і спеціальних функцій як безпосередньо з використанням розкладання в ряд нев'язок, так і у вигляді ітераційних формул для моделей (1) та (10).

Розкладання такого типу з успіхом можуть бути використані для отримання раціональних наближень і обчислення деяких елементарних і спеціальних функцій у моделях.

Результати комп'ютерного експерименту

До прогнозування розповсюдження тритію на території Інституту ядерних досліджень НАН України (м. Київ), та за її межі, за основу взяті дані щодо питомої активності тритію у талій воді снігового покриву за десять років – з 2004 р. по 2013 р. включно, за найменшим та найбільшим показником, з врахуванням максимальних, мінімальних і середніх відхилень по всім замірам (табл. 1), а також розраховані дані на прогнозний період.

Таблиця 1 – загальнені показники питомої активності тритію у талій воді снігового покриву

Показник	Питома активність, Бк/л	Відхилення макс., Бк/л	Відхилення мін., Бк/л	Середнє відхилення, Бк/л	Показник реперної точки, Бк/л
№	X	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4
1	334,0	91,2	47,6	74,5	69,4
2	179,3	91,2	47,6	74,5	33,0
3	634,8	51,3	23,5	24,1	111,6
4	81,3	51,3	23,5	24,1	66,8
5	1431,2	53,5	22,2	30,3	70,6
6	206,2	53,5	22,2	30,3	42,0
7	1267,0	87,6	16,2	23,5	52,6
8	15,8	87,6	16,2	23,5	10,0
9	748,0	40,3	24,2	30,5	95,7
10	285,7	40,3	24,2	30,5	91,1
11	226,3	12,2	7,9	9,8	74,9
12	99,2	12,2	7,9	9,8	61,9
13	140,0	6,0	4,0	5,0	52,0
14	78,0	6,0	4,0	5,0	44,0
15	169,5	6,8	3,8	4,3	59,4
16	64,3	6,8	3,8	4,3	47,4
17	602,2	15,7	4,1	5,9	56,5
18	73,4	15,7	4,1	5,9	44,1
19	109,2	5,2	4,1	4,2	49,5
20	73,7	5,2	4,1	4,2	39,1
21	-	91,2	47,6	5,9	56,5
22	-	5,2	3,8	5,9	44,1
23	-	51,3	23,5	4,2	49,5
24	-	15,7	4,1	4,2	39,1

У даному випадку, тала вода снігового покриву дає найбільш змістовну картину щодо міграції тритію в оточуючому середовищі: при розтаненні снігу частина ізотопів тритію залишається в ґрунті, частина проникає до підземних вод, а частина піднімається в атмосферу при випаровуванні, що дозволяє побудувати приблизні зони забруднення тритієм підземних вод, ґрунту та повітря.

Приведемо специфікацію моделі до наступного вигляду:

$$X = a_0 + a_1 \cdot Y_1 + a_2 \cdot Y_2 + a_3 \cdot Y_3 + a_4 \cdot Y_4 \quad (19)$$

та знайдемо оцінки параметрів моделі з розрахунками оцінок регресійних коефіцієнтів за формулою:

$$A = (Y'Y)^{-1} \cdot Y'X, \quad (20)$$

де Y' - матриця, транспонована до Y .

В результаті за моделлю (19) було отримано функцію регресії:

$$Y = -127,1 + 2,5 \cdot X_1 + 6,2 \cdot X_2 + 3,2 \cdot X_3 + 2,2 \cdot X_4 \quad (21)$$

Подальша перевірка адекватності моделі за наведеним підходом показує відносно незначну похибку, обумовлену тим, що з усіх замірів беруться лише найбільші та найменші показники, а також дані з реперних точок, що дає досить великий розкид значень показників.

За отриманою функцією (21) були знайдені точкові та інтервальні прогнози питомої активності тритію у талій воді снігового покриву при заданих показниках на перспективу (табл. 2).

Таблиця 2 – Прогноз питомої активності тритію у талій воді снігового покриву на перспективу.

Показник,	Питома активність, Бк/л	Відхилення макс., Бк/л	Відхилення мін., Бк/л	Середнє відхилення, Бк/л	Показник реперної точки, Бк/л
№	(X)	(Y_1)	(Y_2)	(Y_3)	(Y_4)
21	251,314	91,2	47,6	5,9	56,5
22	25,185	5,2	3,8	5,9	44,1
23	124,798	51,3	23,5	4,2	49,5
24	36,731	15,7	4,1	4,2	39,1

Для прогнозних розрахунків з метою отримання певного інтервалу, в якому можуть перебувати показники, взяті максимально і мінімально отримані відхилення за роками досліджень, а також середні показники, отримані у останні роки досліджень. На цій основі змодельовані дані можна співставити з даними реальних замірів за 2014 р. та максимальними і мінімальними значеннями протягом року питомої активності тритію у талій воді снігового покриву за весь період спостережень (табл. 3).

Таблиця 3 Порівняння змодельованих показників з даними моніторингу.

Показники	Прогноз, Бк/л	Факт 2014, Бк/л
макс. 1	251,3	249,5
макс. 2	124,8	-
мін. 1	25,2	21,2
мін. 2	36,7	-

Як видно з таблиці, прогнозовані значення питомої активності тритію у талій воді снігового покриву дуже близькі до фактичних показників вимірів у 2014 р.

Висновки

1. Роботу будь-якої системи можна представити як завдання моделювання вірогідності розвитку певної ситуації в часі. При цьому кожен вид інформації оброблятиметься дискретно, представляючи картину розвитку ситуації у вигляді певного стану системи на часовому інтервалі. Інформація розглядається в межах деякої припустимої області, вихід за межі якої означає використання не істотної для цієї системи інформації, що може призвести до помилки.

2. Розкладання функцій за нев'язками може бути використане не лише для отримання ІФ високого порядку, але і для безпосереднього прорахунку функцій, отримання таблично-алгоритмічних методів табулювання функцій, організації динамічного режиму рахунку для масиву даних, а також використані в адаптивних методах.

3. Розрахунок питомої активності тритію у талій воді снігового покриву за максимальними та мінімальними значеннями вимірів минулих років за наведеним у статті підходом дозволив отримати відносно точний прогноз, що підтвержено реальними даними.

Список літератури

1. Долін В.В., Пушкарьов О.В., Шраменко І.Ф. та ін. Тритій у біосфері. – К.: Науково-виробниче підприємство «Видавництво «Наукова думка» НАН України», 2012. – 224 с.
2. Коваленко Г.Д., Седнев В.А., Турбаєвський В.В. Накопичення і міграція тритію в районах розташування АЕС з реакторами ВВЕР // Ядерна і радіаційна безпека. – 2004. – №2. – С. 47-53.
3. Le tritium [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.villesurterre.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=112&Itemid=170
4. Кабанов В.И., Кочетков В.А., Фомин Г.В., Вайзер В.И., Веселов В.М. К обоснованию контроля органически связанного трития в окружающей среде ядерных установок // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез. – 2012. – Вып. 1. – С. 17-22.
5. Турбаєвський В.В. Міграція тритію в підземних водах у районі розташування Запорізької АЕС [Текст] : Автореферат / В. В. Турбаєвський. – Х.: Український науково-дослідний інститут екологічних проблем, 2006. – 20 с.
6. Eyges L., The Classical Electromagnetic Field, Dover Publications, New York, 1972. – 432 P.
7. Коваленко О.В. Моделювання події радіоактивного забруднення тритієм / О.В. Коваленко // Технічні науки та технології : науковий журнал / Черніг. нац. технол. ун-т. – Чернігів : Черніг. нац. технол. ун-т, 2015. – № 1 (1). – С. 199-205.
8. Кряжич О.О., Коваленко О.В. Моделювання події радіаційного забруднення локальних територій в умовах невизначеності // Екологічна безпека та природокористування: Зб. наук. праць / М-во освіти і науки України, Київ. нац. Ун-т буд-ва і архіт., НАН України, Ін-т телекомунікацій і глобал. інформ. простору; редкол. О.С. Волошкіна, О.М. Трофимчук (голов. ред.) [та ін.]. – К., 2015. – Вип. (3) 19. – С. 100-112.
9. Трофимчук О.М. Забезпечення життєздатності інформації в часі при її обробці / Олександр Миколайович Трофимчук, Ольга Олександрівна Кряжич // Праці VII-а міжнародної школи-семінару «Терорія прийняття рішень». Ужгород, 29 вересня – 4 жовтня 2014 р. – С.251-252.
10. Коваленко О.В. Підходи до моделювання забезпечення безпеки від джерел техногенного тритію / О.В. Коваленко // Штучний інтелект : науковий журнал. – К., 2015, - № 1-2(67-68) – С. № 1-2(67-68) – С. 99-105.

Відомості про авторів

Кряжич Ольга Олександрівна – к. т. н., старший науковий співробітник Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України, м. Київ.

Коваленко Олександр Васильович – к. т. н., в.о. завідувача відділом ядерної фізики, завідувач лабораторією ФТПДЯВ Інституту ядерних досліджень НАН України.