



Софийски университет „Св. Климент Охридски”  
Физически факултет  
катедра Ядрена техника и ядрена енергетика

---

Калоян Караиванов

Изследване на методи за решаване на уравненията  
на точковата кинетика

Дипломна работа за придобиване на образователно-  
квалификационна степен „бакалавър”

*научен ръководител*  
д-р Сребрин Колев

*научни консултанти*  
доц. д-р Йонка Иванова

---

София, септември 2022 г.

## Съдържание

1. Увод .....	3
2. Уравнения на реакторната кинетика .....	4
3. Извод на уравненията на точковата кинетика .....	5
4. Физичен смисъл на параметрите на кинетиката .....	7
5. Постановяне на задачата.....	8
6. Изследване на методи за решаване на кинетичните уравнения .....	10
6.1. Референтно решение .....	10
6.2. Матрична експонента.....	13
6.3. Методи на Грег и Бадер-Дойфелхарт. Метод на Булирш-Щьор .....	15
6.3.1. Метод на Грег .....	15
6.3.2. Метод на Бадер-Дойфелхарт .....	17
6.3.3. Екстраполация на решението.....	18
7. Резултати.....	19
7.1. Сравнение между матричната експонента и референтното решение .....	19
7.2. Сравнение между референтния метод и Булирш-Щьор .....	28
7.3. Решение при променлива във времето реактивност .....	31
8. Заключение и изводи .....	32
Литература .....	33

## 1. Увод

Физиката на ядрените реактори е област на физическите и техническите науки, обхващаща широк набор от разнородни дисциплини. Основен предмет в областта е изучаването на специфични неутроннофизични процеси в активната зона на реактора, които са в пряка връзка с инженерното проектиране и физическата експлоатацията на ядрени реактори. Реакторният анализ, от своя страна, е обособен дял от физиката на ядрените реактори, чийто предмет е изследването на неутроннофизични процеси в реактора на основата на физикоматематични модели. Главна цел на реакторния анализ е намирането на време-пространственото разпределение на скоростите на неутронни реакции в активната зона. За постигането на тази цел е необходимо да се познава разпределението на неутронния поток, което е решение на уравнението на неутронен пренос.

Ако е необходимо единствено да се определи поведението на пълната мощност на реактора във времето, то задачата се свежда до решаването на компактна система от обикновени диференциални уравнения от първи ред. Тези уравнения са известни като уравнения на точковата реакторна кинетика, а коефициентите в тях се наричат параметри на кинетиката и зависят от формата и спектъра на неутронния поток във времето. Точното определяне на кинетичните параметри изисква решаването на правата и спрегнатата условнокритични задачи във физиката на ядрените реактори [Henry, 1975], което ще остане извън обхвата на настоящата дипломна работа.

Условието за критичност в активната зона на един ядрен реактор се изразява в поддържането на такъв неутронен баланс във времето, при който приходите и загубите на неутрони в реакторната среда по всевъзможните канали на тяхното образуване и изчезване се изравняват. Средното време на живот на неутроните в зависимост от типа на ядрения реактор варира между  $10^{-7}$  и  $10^{-4}$  секунди, което прави задачата на реакторната кинетика деликатна от гледна точка на числения анализ и особено важна по отношение на физиката на ядрените реактори.

Основната мотивация зад настоящия труд е да бъдат разгледани математическият извод на уравненията на точковата реакторна кинетика; физическата интерпретация на основните кинетични параметри; както и някои подходи и методи за решаване на уравненията на кинетиката, за да бъдат изследвани техните граници на приложимост и постижима точност.

## 2. Уравнения на реакторната кинетика

Реакторната кинетика се занимава основно с изследване на поведението на неутронния поток във времето и пространството вследствие на нарушаване на критичния неутронен баланс в активната зона на реактора. Отправна точка за извода на уравненията на точковата реакторна кинетика може да бъде нестационарното уравнение на неутронен пренос, в което се отчита явно приносът на закъсняващи неутрони в общия неутронен баланс. Нека за простота предварително това уравнение бъде интегрирано по посоката на разпространение на неутроните (обикновено отбелязвана с  $\Omega$ ) и бъде приложен законът на Фик, който свързва неутронния скаларен поток с неутронния ток. Така се стига до основната за целите на експлоатационната реакторна физика дифузионна задача във физиката на ядрените реактори, чийто запис може да бъде следният [Duderstadt and Hamilton, 1976]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) \right] = & \left[ \chi_p(E) (1 - \beta) \int_0^\infty \Sigma_v(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right] \\ & + \sum_i \chi_i(E) \lambda_i c_i(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) \\ & - \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \end{aligned} \quad (2.1)$$

където  $\mathbf{r}$  е векторът, съдържащ в себе си пространствените координати;  $E$  е енергията на неутроните;  $t$  е времето; скоростта на неутроните  $v(E)$  е еднозначно свързана с енергията;  $\Sigma_v(\mathbf{r}, E, t)$  е сечението за делене, умножено по средния брой неутрони, получени при един акт на делене;  $\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)$  е пълното сечение за извеждане на неутрони от елементарния обем  $dV$  около  $\mathbf{r}$  с енергии в интервала  $dE$  около  $E$ ;  $\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t)$  е сечението за разсейване на неутрони с енергии в интервала  $dE'$  около  $E'$  към енергии в интервала  $dE$  около  $E$ ;  $\chi_p(E)$  е спектърът на мигновените неутрони от делене;  $\chi_i(E)$  е спектърът на закъсняващите неутрони от група  $i$ ;  $\beta = \sum_i \beta_i$  е относителният дял на закъсняващите неутрони в общия неутронен баланс;  $\lambda_i$  е константата на разпадане на ядрата предшественици на закъсняващи неутрони от група  $i$ ;  $c_i(\mathbf{r}, t)$  е концентрацията на ядра предшественици от група  $i$ ;  $\Phi(\mathbf{r}, E, t)$  е скаларният неутронен поток, който чрез коефициента на дифузия  $D(\mathbf{r}, E, t)$  е свързан с нетния неутронен ток:  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t)$  (закон на Фик). Важно е да се отбележи, че в (1) независимият източник е приет за нулев и не се отчита в израза.

Поведението на концентрациите на ядрата предшественици  $c_i$  във времето се определя от уравненията, описващи баланса им за всяка група  $i$ :

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \int_0^\infty \Sigma_v(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE - \lambda_i c_i(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

където  $\beta_i$  е дялът на закъсняващите неутрони от група  $i$ .

За опростяване на записите (2.1) и (2.2) нека бъдат въведени следните интегрални операторите  $A$  и  $F$ , дефинирани върху произволна функция  $f(\mathbf{r}, E, t)$ , в съгласие с конвенцията, приета в [Henry, 1975]:

$$\begin{aligned} Af(\mathbf{r}, E, t) &\equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)f(\mathbf{r}, E, t) - \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t)f(\mathbf{r}, E', t)dE' \\ Ff(\mathbf{r}, E, t) &\equiv \int_0^\infty \Sigma_v(\mathbf{r}, E', t)f(\mathbf{r}, E', t)dE' \end{aligned} \quad (2.3)$$

С използването на (2.3) в изрази (2.1) и (2.2), изпускайки функционалните зависимости на съответните величини, се получава:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= \nabla \cdot D \nabla \Phi - A \Phi + \chi_p (1 - \beta) F \Phi + \sum_i \chi_i \lambda_i c_i \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} &= \beta_i F \Phi - \lambda_i c_i \end{aligned} \quad (2.4)$$

Изразите в (2.4) са обобщен запис на нестационарната дифузионна задача във физиката на ядрените реактори в непрекъснат диапазон от енергии и ще бъдат използвани за основа на математическия извод на точковите уравнения на реакторната кинетика. Предвид дефиницията на операторите  $A$  и  $F$ , членовете  $A\Phi$  и  $F\Phi$  имат смисъла съответно на средната скорост на загуба на неутрони с енергия  $E$  поради стълкновения в елементарния обем  $dV$  от реакторната среда около точката  $\mathbf{r}$ ; и средния брой генерирани неутрони от делене с всякакви енергии в елементарния обем  $dV$  от реакторната среда около точката  $\mathbf{r}$  за секунда. Членовете  $\chi_i \lambda_i c_i$  дават броя на закъсняващите неутрони с енергия  $E$ , получени в елементарен обем за секунда в група  $i$  след разпадане на ядрата предшественици.  $\nabla \cdot D \nabla \Phi$  описва нетната скорост на загуба на неутрони с разглежданата енергия в елементарния обем поради свободно прелитане през стените му (член на утечката).

### 3. Извод на уравненията на точковата кинетика

Нека за целите на следващия извод бъдат дефинирани няколко функции. Първата от тях се нарича *функция на неутронна ценност*  $W(\mathbf{r}, E)$  и е решение на спрегнатото уравнение на неутронен пренос. Дефинира се в същото фазово пространство, в което и неутронния поток, но не зависи от времето. Изборът на тази функция играе съществена роля при оценяването на кинетичните параметри, описани по-долу в настоящата бакалавърска дипломна работа. Пълният ѝ смисъл и определяне обаче остават извън рамките на защитаваната теза.

Втората функция, която се дефинира за целите на точковата реакторна кинетика е т.нар. *амплитудна функция*, която описва еволюцията на интегралния брой неутрони в реактора, претеглени по ценностната функция:

$$T(t) \equiv \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W(\mathbf{r}, E) \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE dV \quad (3.1)$$

Ако  $W(\mathbf{r}, E) = 1$ , то  $T(t)$  ще бъде именно пълният брой неутрони в системата за момента от време  $t$ . За удобство и яснота на изложението се дефинира и функция на формата на неутронния поток, наричана за краткост *формфункция*:

$$S(\mathbf{r}, E, t) \equiv \frac{\Phi(\mathbf{r}, E, t)}{T(t)} \quad (3.2)$$

Така в изразите по-нататък величината  $\Phi(\mathbf{r}, E, t)$  ще бъде заменена от произведението  $S(\mathbf{r}, E, t)T(t)$ .

Придържайки се към общоприетия подход при извода на уравненията на точковата кинетика, най-напред в първото уравнение от израз (2.4) се добавя и изважда следният член:  $\sum_{i=1} \chi_i \beta_i F \Phi$ , който има смисъл на източника на закъсняващи неутрони от група  $i$  с енергии според спектъра на групата,  $\chi_i(E)$ . Допълнително, първото уравнение в (2.4) се умножава по  $W(\mathbf{r}, E)$ , а второто по  $\chi_i(E)W(\mathbf{r}, E)$ , след което уравненията се интегрират в пълния обем на задачата и по всички енергии. Така претеглянето по ценностната функция  $W(\mathbf{r}, E)$  и техническата процедура по интегрирането водят последователно до изразите по-долу.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( T(t) \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \frac{1}{v} S dE dV \right) \\ &= T(t) \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \left\{ \nabla \cdot D \nabla S - AS + \left[ \chi_p (1 - \beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right] FS \right\} dE dV \\ & - T(t) \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \sum_i \chi_i \beta_i F S dE dV + \sum_{i=1} \lambda_i \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i c_i dE dV, \quad (3.3) \\ & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i c_i dE dV \\ &= T(t) \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i \beta_i F S dE dV - \lambda_i \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i c_i dE dV \end{aligned}$$

Важно е да се отбележи, че поради дефиницията на (3.1) и (3.2) естествено следва нормировката:  $\int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W(\mathbf{r}, E) \frac{1}{v(E)} S(\mathbf{r}, E, t) dE dV = 1$ , която е изпълнена за всеки момент от време  $t$  въпреки зависимостта на формфункцията  $S$  от времето. Това позволява левите части в уравненията от израз (3.3) да бъдат преобразувани по следния начин:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( T(t) \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \frac{1}{v} S dE dV \right) = \frac{d}{dt} T(t) \left( \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \frac{1}{v} S dE dV \right) \quad (3.4 \text{ а})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i c_i dE dV = \int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \frac{1}{v} S dE dV \frac{d}{dt} \left( \frac{\int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \chi_i c_i dE dV}{\int_{\text{reactor}} \int_0^\infty W \frac{1}{v} S dE dV} \right) \quad (3.4 \text{ б})$$

След заместване на изрази (3.4) обратно в (3.3) и разделяне на уравненията на интегрално претеглената по ценностната функция форма на пълния източник от делене,

а именно:  $\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \left[ \chi_p (1-\beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right] FSdEdV$ , могат да бъдат дефинирани

помощните величини, познати като *параметри на кинетиката*:

$$\rho(t) \equiv \frac{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \left[ \nabla \cdot D \nabla S - AS + \left( \chi_p (1-\beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right) FS \right] dEdV}{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \left[ \chi_p (1-\beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right] FSdEdV} \quad (3.5 \text{ а})$$

$$\beta_i(t) \equiv \frac{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \chi_i \beta_i FSdEdV}{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \left( \chi_p (1-\beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right) FSdEdV} \quad (3.5 \text{ б})$$

$$\Lambda(t) \equiv \frac{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \frac{1}{v} SdEdV}{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \left( \chi_p (1-\beta) + \sum_i \chi_i \beta_i \right) FSdEdV} \quad (3.5 \text{ в})$$

$$C_i(t) \equiv \frac{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \chi_i c_i dEdV}{\int_{reactor} \int_0^{\infty} W \frac{1}{v} SdEdV} \quad (3.5 \text{ г})$$

Окончателно след използване на изразите за кинетичните параметри (3.5) се стига до т.нар. *уравнения на точковата реакторна кинетика*, които имат следния стандартен запис:

$$\begin{aligned} \frac{dT(t)}{dt} &= \frac{\rho - \beta}{\Lambda} T(t) + \sum_i \lambda_i C_i(t) \\ \frac{dC_i(t)}{dt} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} T(t) + \lambda_i C_i(t), i = 1, 2, \dots, I \end{aligned} \quad (3.6)$$

Очевидно степента на приложимост на кинетичните уравнения (3.6) ще зависи от оценката на неутронния поток  $\Phi(\mathbf{r}, E, t)$  поради зависимостта на кинетичните параметри от формфункцията  $S(\mathbf{r}, E, t)$ . Така полезността на решението на компактната система от ОДУ (3.6) ще е подчинена преди всичко на възможността за адекватна оценка на  $S(\mathbf{r}, E, t)$ . Ако  $W(\mathbf{r}, E)$  е решение на спрегнатата условнокритична задача за определящото за преходния процес състояние на реактора, то с минимална загуба на точност  $S(\mathbf{r}, E, t)$  може да се замени с решението на правата условнокритична задача  $S(\mathbf{r}, E)$  за същото състояние.

#### 4. Физичен смисъл на параметрите на кинетиката

Интерпретацията на кинетичните параметри зависи от избора на неутронната ценност  $W(\mathbf{r}, E)$ , която играе ролята на тегловна функция в изразите за параметрите на кинетиката. Освен това, понеже задачата на кинетиката (3.6) е хомогенна по природа,

ако величините  $\rho(t)$ ,  $\beta_i(t)$ ,  $\Lambda(t)$  бъдат умножени по произволна константа, решението за амплитудната функция  $T(t)$  ще се запази напълно. Това е така, тъй като от уравненията в израза (3.6) следва, че динамиката на процесите в реактора зависи всъщност от отношенията:  $\frac{\rho}{\Lambda}$ ,  $\frac{\beta_i}{\Lambda}$ . Въпреки това на основата на изразите (3.5) ще бъде посочен смисълът на  $\rho(t)$ ,  $\beta_i(t)$ ,  $\Lambda(t)$  и  $C_i(t)$ .

*Реактивността*  $\rho(t)$  е интегрална величина за целия реактор, която характеризира неговата динамика. Тя може да бъде интерпретирана като отклонение от нула на отношението на разликата между претеглените скорости на приходите (от делене) и загубите (поради поглъщане и утечка) на неутроните в системата към претеглената скорост на приходите във всеки момент от време  $t$ . Така, ако приходите на неутрони в системата са повече от загубите в даден момент, то реактивността е положителна и неутронната мощност в такъв *надкритичен* реактор расте. Ако загубите са по-големи от приходите, то реактивността е отрицателна, неутронната мощност намалява и реакторът е *подкритичен*. Ако реактивността е нулева, реакторът е *критичен* и мощността е постоянна във времето.

*Ефективният дял на закъсняващите неутрони* от делене,  $\beta_i(t)$ , за група  $i$  е параметър, който се определя като отношението на претеглената моментна скорост на получаване на закъсняващи неутрони в групата и претеглената моментна скорост на получаване на всякакви неутрони (мигновени и закъсняващи) в цялата система. Типичните стойности за величините  $\beta_i(t)$  обикновено лежат в интервала от няколко стотни от процента до няколко десети от процента.

*Времето на генерация на мигновените неутрони*  $\Lambda(t)$  може да бъде интерпретирано по следния начин. Ако реакторът се приеме за критичен, а ценностната функция за единица и изразът (3.5 в) се преобразува като:

$$\int_{\text{reactor}} \int_0^{\infty} \Sigma_v(\mathbf{r}, E) \Phi_0(\mathbf{r}, E) dEdV = \frac{\int \int_0^{\infty} \frac{1}{v} \Phi_0(\mathbf{r}, E) dEdV}{\Lambda}, \quad (3.7)$$

следва, че скоростта на получаване на неутрони от делене в системата е равна на наличния брой неутрони, разделен на  $\Lambda$ . Според това твърдение  $\Lambda$  може да се интерпретира като средното време, в което неутроните в системата (в случая мигновени и закъсняващи) живеят, преди да бъдат поглънати. Представителна стойност на  $\Lambda$  за реактори на топлинни неутрони е например  $\sim 2 \times 10^{-5}$  s.

Величината  $C_i(t)$  има смисъла на претеглен интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони в даден момент от време  $t$  в реактора.

## 5. Поставяне на задачата

В най-общ план, поради естествената зависимост на параметрите  $\rho(t)$ ,  $\beta_i(t)$ ,  $\Lambda(t)$  от времето, изразите за уравненията на точковата реакторна кинетика (3.6) образуват една хомогенна система от обикновени диференциални уравнения (ОДУ) с



непостоянни коефициенти. Зависимостта от времето на  $\beta_i(t)$  и  $\Lambda(t)$  обаче е достатъчно слаба в повечето случаи и може да бъде пренебрегната, а за широк набор от задачи за реактивността може да се приеме, че се въвежда стъпаловидно в системата, което позволява третирането на коефициентите в системата от ОДУ като постоянни във времето.

Всички решени задачи в настоящата дипломна работа са решени в шест групи закъсняващи неутрони, чиито относителни дялове и константи на разпадане на техните ядра-предшественици са представени в Табл. 1.

Таблица 1. Относителни дялове на закъсняващите неутрони и константи на разпад на техните ядра-предшественици за всяка група

номер на група	$\beta$	$\lambda[s^{-1}]$
1	0.000247	0.0127
2	0.001385	0.0317
3	0.001222	0.1150
4	0.002646	0.3110
5	0.000832	1.4000
6	0.000169	3.8700

Тъй като системата от кинетични уравнения е хомогенна и решението ѝ се получава с точност до множител, е прието амплитудната функция да се нормира към единична стойност в началния момент.

Важно за качеството на получените резултати с конкретен изчислителен метод и алгоритъм е нивото на *твърдост* на решаваната система. Една дефиниция на твърдост на система от ОДУ може да бъде следната. Ако в алгоритъма на даден изчислителен метод за решаване на система от ОДУ е необходимо да се избере сравнително малка стъпка на интегриране, за да се запази числената стабилност на метода дори когато точното решение в близката околност на разглеждания интервал е сравнително гладка функция, то в този интервал системата от ОДУ е твърда [Lambert, 1992]. Поради природата на хомогенните линейни системи от ОДУ с постоянни коефициенти, при които решенията се построяват от линейни комбинации на хиперболични функции, чиито аргументи включват явно собствените стойности на матрицата на коефициентите, една количествена интерпретация на твърдостта за дадена система може да бъде изградена на базата на отношението на максималната и минималната по модул собствени стойности на тази матрица [Lambert, 1992].

Таблица 2. Твърдост на системата в зависимост от стъпаловидно въведената реактивност в началото на процеса

$\rho [\beta]$	$ \lambda _{\max}$	$ \lambda _{\min}$	$ \lambda _{\max}/ \lambda _{\min}$
1	12.80	0.0156	820.51
0.5	163.40	0.0156	10474.36
0	325.49	0.0156	20864.74
-5	1950.37	0.0156	125023.72
-10	3575.59	0.0156	229204.49

За целите на настоящата дипломна работа са решени няколко задачи, които се характеризират със стъпаловидно въвеждане на реактивност според представените стойности в Табл. 2.

Собствените стойности на матрицата на коефициентите в Табл. 2 са намерени по метода на Джон Франсис [Francis, 1961], който е разновидност на класическия QR-алгоритъм и ще бъде разгледан малко по-подробно в следващите раздели.

## **6. Изследване на методи за решаване на кинетичните уравнения**

В следващите части от дипломната работа са представени някои изчислителни методи и алгоритми, които са използвани за решаването на системата от уравнения на точковата реакторна кинетика. Коментирани са техни особености и са представени количествени резултати, както и сравнения между тях.

### **6.1. Референтно решение**

В настоящия подраздел е изложен алгоритъмът, по който е пресметнато референтно решение на задачата на точковата кинетика за сравнение със следващите методи, представени в дипломната работа. Този алгоритъм следва последователността от математически операции при общоприетия подход за аналитично решаване на хомогенна система от ОДУ с постоянни коефициенти  $\frac{dy}{dx} = \mathbf{A}y$  [Polyanin and Zaitsev, 2018]:

1. Намират се собствените стойности на матрицата  $\mathbf{A}$  на коефициентите пред вектор-стълба на зависимите променливи  $y$ .

2. Намират се собствените вектори на матрицата  $\mathbf{A}$ .

3. Решението се построява в следния вид:  $y_i = \sum_j c_j b_j^i \exp(\lambda_j x)$ , където  $\{c_j\}$  са коефициентите, подлежащи на определяне от началните условия на задачата;  $b_j^i$  е  $i$ -тата компонента на  $j$ -тия собствен вектор на матрицата  $\mathbf{A}$ , а  $\lambda_j$  е  $j$ -тата собствена стойност.

4. За намирането на коефициентите  $\{c_j\}$  се изготвя линейна система от алгебрични уравнения според началното условие за всяка от променливите в задачата.

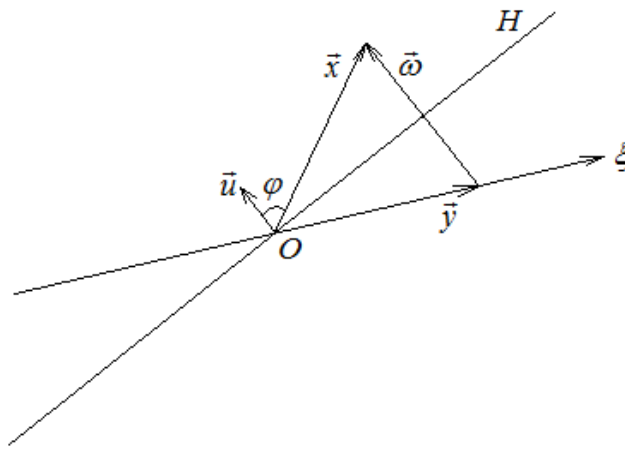
Практическата процедура, реализирана за настоящата дипломна работа, е следната:

1. Собствените стойности на матрицата  $\mathbf{A}$  в задачата на точковата реакторна кинетика имат смисъла на времеконстанти, характеризиращи разглеждания преходен процес. В настоящата дипломна работа е избрано те да бъдат намерени по метода на Джон Франсис [Francis, 1961], който се основава на идеите в класическия QR-алгоритъм за намирането на собствени стойности на матрица. Алгоритъмът се характеризира с висока числена стабилност, като неговата устойчивост се дължи най-вече на факта, че се работи с ортогонални матрици, за които е известно, че имат най-малкото възможно число на обусловеност – единица.

В духа на QR-метода следва всички поддиагонални елементи на матрицата  $\mathbf{A}$  да станат нулеви в хода на итеративна процедура от подобни преобразования от вида

$\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} \equiv \tilde{\mathbf{A}}$ , където матрицата  $\mathbf{Q}$  е ортогонална и се изготвя така, че  $\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \equiv \mathbf{R}$ , където матрицата  $\mathbf{R}$  е горна триъгълна.

За бързодействието на алгоритъма е важно явното сформирание на матриците  $\mathbf{Q}$  да се избегне, което е възможно например при алгоритъма на Франсис [Francis, 1961]. Като първа стъпка от този алгоритъм матрицата  $\mathbf{A}$  се привежда в горна Хесенбергова форма. За тази цел матрицата  $\mathbf{A}$  се умножава последователно по набор от матрици на Хаусхолдер,  $\mathbf{H}$  [Householder, 1958], които са съставени така, че да нулират елементи от вектор стълбове на  $\mathbf{A}$ . Резултатът е матрицата:  $\dots \mathbf{H}_3 \mathbf{H}_2 \mathbf{H}_1 \mathbf{A} \equiv \mathbf{B}$  или окончателно  $\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \equiv \mathbf{B}$ , чийто първи поддиагонал остава ненулев, а всички останали елементи под него са числено равни на нула.



Фиг. 1. Илюстрация на хиперравнината  $H$ , отразяваща вектор  $\mathbf{x}$  върху абсцисата  $\xi$

Матрицата на Хаусхолдер може да се интерпретира като средство за *отражение* на даден вектор върху абсцисата на  $n$ -мерното пространство, в което той е дефиниран. Например, ако с  $H$  бележим хиперравнината, през която вектор  $\mathbf{x}$  се отразява върху абсцисата  $\xi$  във вектора  $\mathbf{y}$  (вж. Фиг. 1), то  $\mathbf{y} = |\mathbf{x}| \mathbf{e}$ , където  $\mathbf{e} = (1, 0, \dots, 0)$ . Съществува вектор  $\boldsymbol{\omega}$ , колинеарен на  $\mathbf{u}$ , за който е изпълнено:  $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\omega}$  или  $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{x} - |\mathbf{x}| \mathbf{e}$ . Ако ъгълът между  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{u}$  е  $\varphi$ , то големината на  $\boldsymbol{\omega}$  ще бъде:  $|\boldsymbol{\omega}| = 2|\mathbf{x}| \cos \varphi$ , а самият вектор може да се изрази по следния начин:

$$\boldsymbol{\omega} = 2 \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} = 2 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}}{|\mathbf{u}|^2} \quad (6.1)$$

Последното равенство в (6.1) е изпълнено, тъй като за всеки произволен индекс  $i$  следва:

$$[(\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u}]_i = u_k x_k u_i = (u_i u_k) x_k = (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})_{ik} x_k = [(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}]_i \quad (6.2)$$

По силата на горните разсъждения може да бъде съставена матрицата на Хаусхолдер  $\mathbf{H}$ , така че да е изпълнено:

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} - 2 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}}{|\mathbf{u}|^2} = \left[ \mathbf{1} - 2 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^2} \right] \cdot \mathbf{x} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{x} \quad (6.3)$$

където  $\mathbf{u}$  може да бъде избран равен на  $\boldsymbol{\omega}$ , а именно:  $\mathbf{u} = \mathbf{x} - |\mathbf{x}| \mathbf{e}$ , тъй като за целите на горните разсъждения е важно единствено посоката на  $\mathbf{u}$  и  $\boldsymbol{\omega}$  да съвпадат.

Сравнително лесно може да се съобрази, че матрицата  $\mathbf{H}$  е симетрична, а ортогоналността ѝ се проверява по следния начин:

$$\mathbf{H}\mathbf{H}^T = \left[ \mathbf{1} - 2 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^2} \right] \cdot \left[ \mathbf{1} - 2 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^2} \right] = \mathbf{1} - 4 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^2} + 4 \frac{(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^4} = \mathbf{1} \quad (6.4)$$

тъй като за всеки два произволни индекса  $i, j$  е изпълнено:

$$\left[ (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right]_{ij} = (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})_{ik} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})_{kj} = u_i u_k u_k u_j = u_i u_j u_k u_k = (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})_{ij} |\mathbf{u}|^2 \quad (6.5)$$

За практически цели матрицата на Хаусхолдер никога не се съставя в явен вид. Това е така, защото броят на умноженията, необходими за получаване на  $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}$  е  $2n^2$ , където  $n$  е размерността на векторите в записа, докато за пресмятането на еквивалентния израз  $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{x})\mathbf{u}$  са необходими  $2n$  на брой умножения, което при все по-голямо  $n$  се превръща в значително предимство.

След като матрицата  $\mathbf{A}$  е приведена в горна Хесенбергова форма, Франсис показва чрез теорема (известна в английската литература под името *Implicit Q theorem*), че за  $\mathbf{A}$  е възможно прилагането на класическия итеративен **QR** метод, но без да е необходимо матриците  $\mathbf{Q}$  и  $\mathbf{R}$  да бъдат съставяни в явния им вид. Процедурата отново е итеративна и е в сила присъщото свойство на поддиагоналните елементи да клонят към нула в хода на итерациите  $k$  като:  $a_{ij}^{(k)} \sim (\lambda_i / \lambda_j)^k$  ( $i > j, |\lambda_i| < |\lambda_j|$ ), където  $\{\lambda_i\}$  са собствените стойности на матрицата. За ускоряване на сходимостта собствените стойности могат да бъдат отмествани, което в алгоритъма на Франсис също се прилага неявно [Francis, 1962].

2. Намирането на собствените вектори на матрицата  $\mathbf{A}$  за целите на дипломната работа е извършено посредством метода на *обратна степенна итерация* [Acton, 1997]:

$$\mathbf{v}^{k+1} = (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-1} \mathbf{v}^k \quad (6.6)$$

където индексът  $k$  указва номера на итерацията. Може да се покаже, че собствените стойности на матрицата  $(\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-1}$  са съответно  $(\lambda - \mu)^{-1}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{v} &= \lambda \mathbf{v} \\ \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{1}\mu\mathbf{v} &= \lambda \mathbf{v} - \mathbf{1}\mu\mathbf{v} \\ (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)\mathbf{v} &= (\lambda - \mu)\mathbf{v} \\ \frac{(\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-1}}{(\lambda - \mu)} (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)\mathbf{v} &= \frac{(\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-1}}{(\lambda - \mu)} (\lambda - \mu)\mathbf{v} \\ (\lambda - \mu)^{-1} \mathbf{v} &= (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-1} \mathbf{v} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Собствените вектори на матрицата  $\mathbf{A}$  обаче се запазват при горните преобразования. Така, ако е в сила предположението, че собствените вектори на матрицата  $\mathbf{A}$  образуват пълен базис, то за произволен ненулев начален вектор  $\mathbf{v}^0$  в хода на обратната степенна итерация ще бъде изпълнено:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^k &= (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-k} \mathbf{v}^0 \text{ или:} \\ \mathbf{v}^k &= (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-k} \mathbf{v}^0 = (\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)^{-k} \sum_j \alpha_j \mathbf{x}_j \\ &= \sum_j \alpha_j (\lambda_j - \mu)^{-k} \mathbf{x}_j = (\lambda_i - \mu)^{-k} \left( \alpha_i \mathbf{x}_i + \sum_{j \neq i} \alpha_j \left( \frac{\lambda_j - \mu}{\lambda_i - \mu} \right)^k \mathbf{x}_j \right) \end{aligned} \quad (6.8)$$

В горния израз с  $\{\mathbf{x}_j\}$  са означени собствените вектори на матрицата  $\mathbf{A}$ . Ясно е, че ако след всяка итерация (6.6) новополученият вектор  $\mathbf{v}^{k+1}$  се нормира (към единичен модул например), то при  $k \rightarrow \infty$  векторът  $\mathbf{v}^{k+1}$  ще клони към собствения вектор  $\mathbf{x}_i$ , съответстващ на собствената стойност  $\lambda_i$ , за която се предполага, че нейно добро приближение  $\mu$  е известно отначало. Това приближение обаче не трябва да бъде твърде близко до  $\lambda_i$ , тъй като от (6.6) се вижда, че методът работи единствено, ако съществува обратна матрица на  $(\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu)$ , т.е.  $\det(\mathbf{A} - \mathbf{1}\mu) \neq 0$ , което изисква  $\lambda_i \neq \mu$ . На практика методът работи отлично при съвпадение на  $\mu$  и  $\lambda_i$  от две-три значещи цифри.

Важно е да се отбележи, че обратната степенна итерация може да се използва и за намирането на комплексни собствени вектори. Добре е в такъв случай нормировката след всяка итерация да бъде:  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}^* = 1$ .

3./4. Окончателно за намирането на коефициентите  $\{c_j\}$  в решението  $y_i = \sum_j c_j b_j^i \exp(\lambda_j x)$  е избрано линейната система от алгебрични уравнения, съставена според началното условие за всяка от променливите  $y_i$  да се реши посредством QR-разлагане на матрицата на задачата. Това прави намирането на  $\{c_j\}$  тривиално – чрез обратно заместване, тъй като окончателният вид на линейната система се характеризира с горна триъгълна матрица.

Така представеният алгоритъм включва в себе си елементи, които притежават отлична числена устойчивост и е подходящ за изготвянето на референтно решение на поставената задача с висока точност.

## 6.2. Матрична експонента

Следващият метод, който ще бъде разгледан за решаване на системата от кинетични уравнения, е методът на *матричната експонента* [Ball and Adams, 1967]. Една линейна система от ОДУ с постоянни коефициенти винаги може да бъде представена компактно чрез следния матрично-векторен запис:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{A}\mathbf{y}, \quad (6.9)$$

където  $\mathbf{y}$  е вектор-стълб на зависимите променливи в системата, а  $\mathbf{A}$  е матрицата на коефициентите. На основата на (6.9) може да се покаже, че:

$$\frac{d^n \mathbf{y}}{dx^n} = \mathbf{A}^n \mathbf{y} \quad (6.10)$$

Това се вижда непосредствено от следния запис по компоненти:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( \frac{dy_i(x)}{dx} \right) &= \frac{d}{dx} \left( \sum_j a_{ij} y_j(x) \right) = \sum_j a_{ij} \frac{dy_j(x)}{dx} = \sum_j a_{ij} \left( \sum_k a_{jk} y_k \right) \\ &= \sum_k \left( \sum_j a_{ij} a_{jk} \right) y_k = \sum_k [\mathbf{A}^2]_{ik} y_k \end{aligned} \quad (6.11)$$

Следователно  $\frac{d^2 \mathbf{y}}{dx^2} = \mathbf{A}^2 \mathbf{y}$ , а ако се положи  $\mathbf{B} = \mathbf{A}^2$ , аналогично може да се покаже, че

$$\frac{d^3 \mathbf{y}}{dx^3} = \mathbf{A}^3 \mathbf{y} \text{ и т.н.}$$

От математическия анализ на функции на една реална променлива е известно, че всяка зависима променлива може да бъде представена чрез т.нар. разложение в ред на Тейлор:

$$y_i(x) = y_i(0) + \frac{dy_i(0)}{dx} x + \frac{1}{2!} \frac{d^2 y_i(0)}{dx^2} x^2 + \dots + \frac{1}{k!} \frac{d^k y_i(0)}{dx^k} x^k + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_i^{(n)}(0)}{n!} x^n \quad (6.12)$$

където развитието е около нулата. Доказателство на твърдението (6.12) може да бъде намерено например в [Тагамлицки, 1971]

Ако изразът (6.12) се приложи за всички променливи във вектор-стълба на решението  $\mathbf{y}$ , се получава следното компактно матрично-векторно представяне:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(x) &= \mathbf{y}(0) + \mathbf{A} \mathbf{y}(0) x + \frac{1}{2!} \mathbf{A}^2 \mathbf{y}(0) x^2 + \dots + \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k \mathbf{y}(0) x^k + \dots \\ &= \left( \mathbf{1} + \mathbf{A}x + \frac{1}{2!} \mathbf{A}^2 x^2 + \dots + \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k x^k + \dots \right) \mathbf{y}_0 = \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^n x^n}{n!} \right) \mathbf{y}_0 \end{aligned} \quad (6.13)$$

Прието е по аналогия на случая с едно ОДУ от вида  $\frac{dy(x)}{dx} = ay$ , където решението е експонента, да се въведе за удобство означението за т.нар. *матрична експонента*:

$$\exp(\mathbf{A}x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^n x^n}{n!} \quad (6.14)$$

Практическата процедура по решаване на системата (6.9) може да се организира в няколко стъпки по следния начин. Тъй като всеки от членовете в реда (6.13) има пряка връзка с предходния, след полагането  $\mathbf{c}^{(0)} \equiv \mathbf{y}_0$  последователните събираеми ще имат вида:

$$\mathbf{c}^{(1)} = x \mathbf{A} \mathbf{c}^{(0)}; \mathbf{c}^{(2)} = \frac{x}{2} \mathbf{A} \mathbf{c}^{(1)}; \mathbf{c}^{(3)} = \frac{x}{3} \mathbf{A} \mathbf{c}^{(2)}; \dots; \mathbf{c}^{(k+1)} = \frac{x}{k+1} \mathbf{A} \mathbf{c}^{(k)}, \quad (6.15)$$

а окончателното решение на системата се построява по следния начин:

$$\mathbf{y} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}^{(k)} \quad (6.16)$$

Разбира се, за практически цели редът (6.16) трябва да бъде прекъснат при някое  $k$ .

Избран е логичният критерий  $\frac{|e^{(k)}|}{|y^{(k-1)}(x)|} \leq \delta$ , където стойността на  $\delta$  се избира от

потребителя. Така, ако приносът на следващия член в реда е сравнително малък спрямо текущата оценка за сумата, то сумирането по индекса  $k$  се прекъсва.

По принцип свойствата на развитието в Тейлоров ред гарантират сходимостта на реда (6.16) в хода на итерациите по  $k$ . При някои задачи обаче и при сравнително твърди системи от ОДУ сходимостта може да бъде бавна, което да доведе до съществено натрупване на грешки от закръгление в хода на итерациите. Това твърдение ще бъде дори по-силно в определени случаи, в които членовете на сумата сменят алтернативно знака си.

### 6.3. Методи на Грег и Бадер-Дойфелхарт. Метод на Булирш-Щьор

Методът на Булирш-Щьор е в същността си метод за екстраполация на серия от решения към нулева стъпка на интегриране на система от ОДУ, като ползата от екстраполацията е значително по-голяма, ако се приложи върху метод, при който грешката от дискретизация в решението зависи само от четни степени на стъпката на интегриране [Stoer and Bulirsch, 1980]. Такива са например методите на Грег [Gragg, 1965] и Бадер-Дойфелхарт [Bader and Deuflhard, 1983].

#### 6.3.1. Метод на Грег

Едно обикновено диференциално уравнение от първи ред може да се запише във вида:

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = f(x, y) \quad (6.3.1)$$

с начално условие:

$$\phi(x_0) = y_0 \quad (6.3.2)$$

Нека  $\phi(x)$  е търсеното решение на задачата в дадена точка  $x = x_0 + H$ , а  $\Phi(x; h)$  е негова числена оценка, получена чрез последователно прилагане на метод, основан на приблизителни централни разлики (Modified Midpoint Rule) със стъпка  $2h$ , като  $2h = H/N$  и  $N$  е цяло число. Нека също така бъдат дефинирани величините:

$$M(x; 2h) = u_N(2h) \quad (6.3.3)$$

$$T(x; 2h) = v_N(2h) - hf(x, u_N), \quad (6.3.4)$$

за които е в сила следната рекурентна връзка:

$$u_0 = y_0 \quad (6.3.5)$$

$$v_0 = y_0 + hf(x_0, y_0) \quad (6.3.6)$$

$$u_{i+1} = u_i + 2hf(x_{2i+1}, v_i) \quad (6.3.7)$$

$$v_{i+1} = v_i + 2hf(x_{2i+2}, u_{i+1}) \quad (6.3.8)$$

за  $i = 0, 1, \dots, N-1$ , като  $x_i = x_0 + ih$ .

От изрази (6.3.3÷6.3.8) и дефиницията на величината  $\Phi$  може да се съобрази, че връзката между  $M$ ,  $T$  и  $\Phi$  е съответно:

$$M(x; 2h) = \Phi(x; h) \quad (6.3.9)$$

$$T(x; 2h) = \Phi(x+h; h) - hf(x, \Phi(x; h)) \quad (6.3.10)$$

Съгласно [Gragg, 1965]  $M$  и  $T$  представляват две отделни оценки на  $\phi(x)$ , чиито разложения в ред по степените на  $h$  съдържат само четните степени на стъпката. Този резултат е особено значим, защото прави алгоритмите за екстраполация към нулева стъпка за произволна поредица от оценки (при различни  $N$ ) на величината  $\phi(x)$  по-ефективни.

Обикновено в практиката се работи с линейна комбинация на  $M$  и  $T$ , като най-често се избира правилото:

$$A(x; 2h) = \frac{1}{2} [M(x; 2h) + T(x; 2h)] \quad (6.3.11)$$

Гореописаната процедура за намиране на числена оценка  $\Phi(x; h)$  на търсеното решение  $\phi(x)$  чрез връзките (6.3.3÷6.3.11) е известна като метод на Грег.

Нека за удобство редиците  $\{u_i\}_{i=0,1,\dots}$  и  $\{v_j\}_{j=0,1,\dots}$  бъдат заменени с една редица  $\{z_m\}_{m=0,1,\dots}$ , така че да бъде изпълнено:

$$z_{2m} = u_m \quad (6.3.12)$$

$$z_{2m+1} = v_m$$

за  $m = 0, 1, 2, \dots$

Имайки предвид (6.3.12), процедурата (6.3.3÷6.3.11) може да се пренапише изцяло относно величините  $\{z_m\}$ . Получава се следният алгоритъм за намиране на числена оценка на решението на поставената задача (6.3.1÷6.3.2) в точката  $x_0 + H$ :

$$z_0 = y_0 \quad (6.3.13)$$

$$z_1 = z_0 + hf(x_0, z_0) \quad (6.3.14)$$

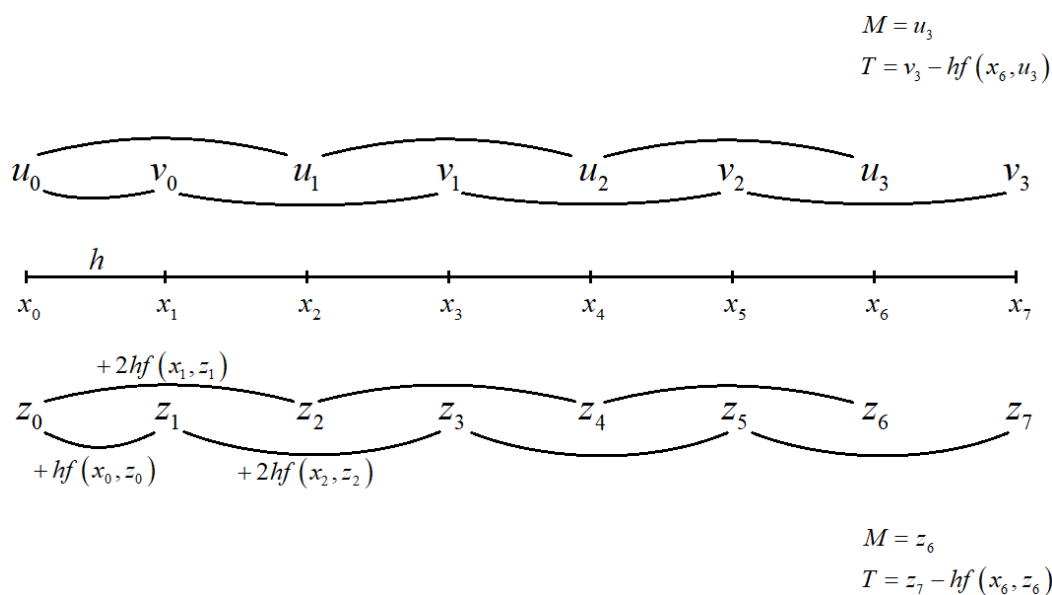
$$z_{m+1} = z_{m-1} + 2hf(x_m, z_m) \quad (6.3.15)$$

$$\begin{aligned} \phi(x_0 + H) &\approx A(x_0 + H; 2h) = \frac{1}{2} [M(x_0 + H; 2h) + T(x_0 + H; 2h)] \\ &= \frac{1}{2} [z_n + z_{n+1} - hf(x_n, z_n)] \\ &= \frac{1}{2} [z_n + z_{n-1} + hf(x_n, z_n)] \end{aligned} \quad (6.3.16)$$

където  $m = 1, 2, \dots, n-1$  и  $n = 2N$ .

Резултатът (6.3.13÷6.3.16) е в пряко съответствие с изрази (16.3.2) от раздел 16.3 на Numerical Recipes in FORTRAN 77 [Press, et al., 1997]. Връзката между (6.3.3÷6.3.11) и (6.3.13÷6.3.16) допълнително е илюстрирана на Фиг. 2 за конкретен пример при  $N = 3$ ,  $n = 6$ .





Фиг. 2. Схематично представяне на метода на Грег при дискретизация със стъпка  $h$  и разделяне на задачата на шест подинтервала

Екстраполация на редица от числени оценки на решението към нулева стъпка  $h$  е възможна след пресмятане на (6.3.16) за различни  $n$ , които съгласно метода на Грег трябва да бъдат задължително четни (поради връзката  $n = 2N$ ).

Методът на Грег е в същината си явна схема за интегриране на системи от ОДУ. Така при решаването на кинетичните уравнения, поради твърдостта на системата, методът демонстрира сериозни отклонения на резултатите спрямо други методи дори при много малки стъпки на интегриране, без значение дали се използва техника за екстраполация, или не.

### 6.3.2. Метод на Бадер-Дойфелхарт

Бадер и Дойфелхарт откриват полуявна схема, която притежава необходимите свойства да бъде подложена ефективно на екстраполацията на Булирш-Щьор [Bader and Deuflhard, 1983]. Отправна точка е неявна формулировка на метода на Ойлер:

$$\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n-1} = 2h\mathbf{f}\left(\frac{\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{y}_{n-1}}{2}\right) \quad (6.3.17)$$

Може да се покаже, че ако дясната страна на (6.3.17) се подложи на линеаризация, се стига до следния израз:

$$\left[\mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\right] \cdot \mathbf{y}_{n+1} = \left[\mathbf{1} + h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}\right] \cdot \mathbf{y}_{n-1} + 2h \left[\mathbf{f}(\mathbf{y}_n) - \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \cdot \mathbf{y}_n\right] \quad (6.3.18)$$

Бадер и Дойфелхарт показват, че развитието на решението, получено чрез (6.3.18), в ред по стъпката на интегриране  $h$  съдържа само четните ѝ степени. Това прави метода подходящ за екстраполацията на Булирш-Щьор.

За практическите цели на програмната реализация на метода е удобно уравненията да се запишат чрез величината  $\Delta_k = \mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k$ . Така, ако се търси решението след стъпка  $N$ , се получава следният алгоритъм.

За първата стъпка:

$$\Delta_0 = \left[ \mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot h \mathbf{f}(\mathbf{y}_0) \quad (6.3.19)$$

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \Delta_0 \quad (6.3.20)$$

За всяка следваща стъпка,  $k = 1, \dots, m-1$ :

$$\Delta_k = \Delta_{k-1} + 2 \left[ \mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot [h \mathbf{f}(\mathbf{y}_k) - \Delta_{k-1}] \quad (6.3.21)$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \Delta_k \quad (6.3.22)$$

За последната стъпка изразите са следните:

$$\Delta_m = \left[ \mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot [h \mathbf{f}(\mathbf{y}_m) - \Delta_{m-1}] \quad (6.3.23)$$

$$\bar{\mathbf{y}}_m = \mathbf{y}_m + \Delta_m \quad (6.3.24)$$

Горната процедура е валидна за системи от ОДУ с постоянни коефициенти. Ако коефициентите са променливи, достатъчно е да се модифицира изразът за първата стъпка:

$$\Delta_0 = \left[ \mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot \left[ h \mathbf{f}(\mathbf{y}_0) + h^2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} \right] \quad (6.3.25)$$

Методът успешно се прилага за твърди системи и се характеризира с висока точност и числена стабилност.

### 6.3.3. Екстраполация на решението

За целите на настоящата дипломна работа е избрано екстраполацията към нулева стъпка на интегриране да се прави на основата на полиномната интерполация. Една интерполираща функция трябва да удовлетворява условията, при които числените ѝ стойности съвпадат със стойностите във възлите  $(x_i, y_i)$ , за  $i = 1, \dots, n$ , през които се интерполира. Един от начините да се построи интерполиращ полином през набор от данни е като се използват полиномите на Лагранж [Acton, 1997]. Видът на полиномите е следният:

$$L_{n-1}^{(i)}(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)} \quad (6.3.26)$$

за  $i = 1, \dots, n$ , където  $n$  броят на интерполационните възли и съответно  $n-1$  е степента на полинома. От (6.3.26) може да се съобрази, че полиномите на Лагранж изпълняват следните свойства:

$$L_{n-1}^{(i)}(x_i) = 1 \text{ и } L_{n-1}^{(i)}(x_j) = 0, j \neq i \quad (6.3.27)$$

Това позволява да се състави една линейна комбинация от полиномите (6.3.26), за която да е изпълнено условието интерполационната крива да минава през възлите на интерполация:

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n y_i L_{n-1}^{(i)}(x) \quad (6.3.28)$$

При численото интегриране на дадена система ОДУ, така че да се получи решение в точката  $x + H$  на основата на известно решение в точката  $x$ , се търси поредица от числени оценки, като задачата се решава последователно с различна стъпка на интегриране  $h = H/n$ , където  $n$  нараства за всяка следваща оценка. Отначало Булирш и Щьор предлагат поредицата от числени оценки да се строи за:

$$n = 2, 4, 6, 8, 12, 16, 24, 32, \dots, [n_j = 2n_{j-2}], \dots$$

На по-късен етап Бадер и Дойфелхарт предлагат друга поредица, за която се твърди, че в общия случай е по-ефективна [Deuflhard, 1983; Deuflhard, 1985]:

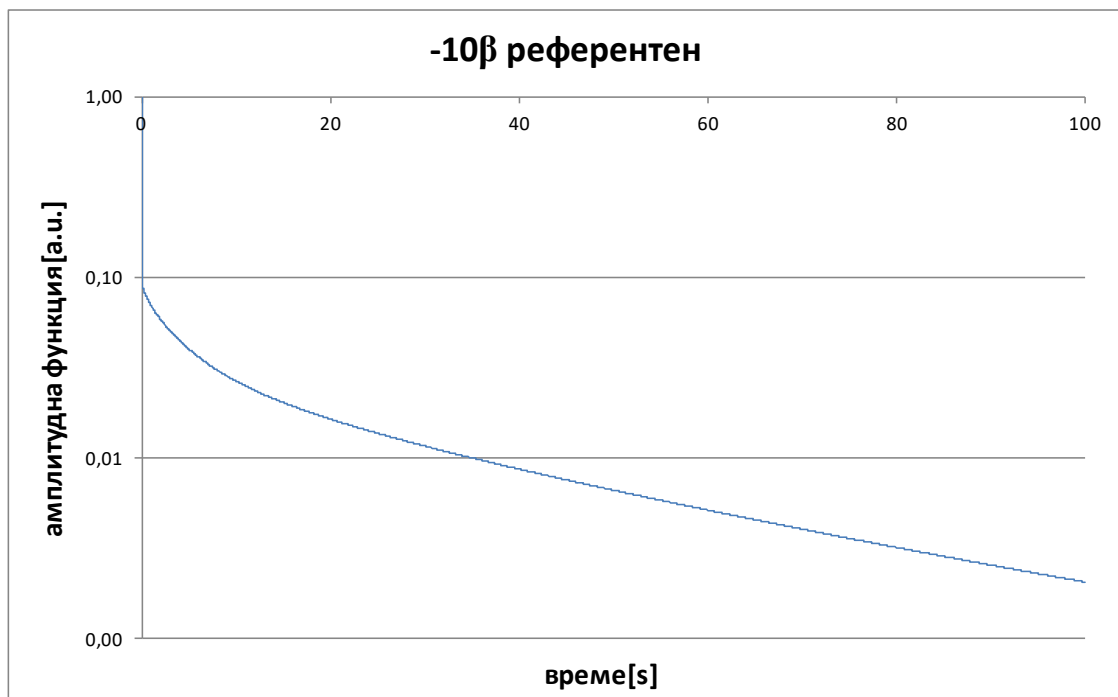
$$n = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, \dots, [n_j = 2j], \dots$$

В решенията на задачата на точковата кинетика, представени в настоящата дипломна работа, за целите на екстраполация е използвана втората поредица.

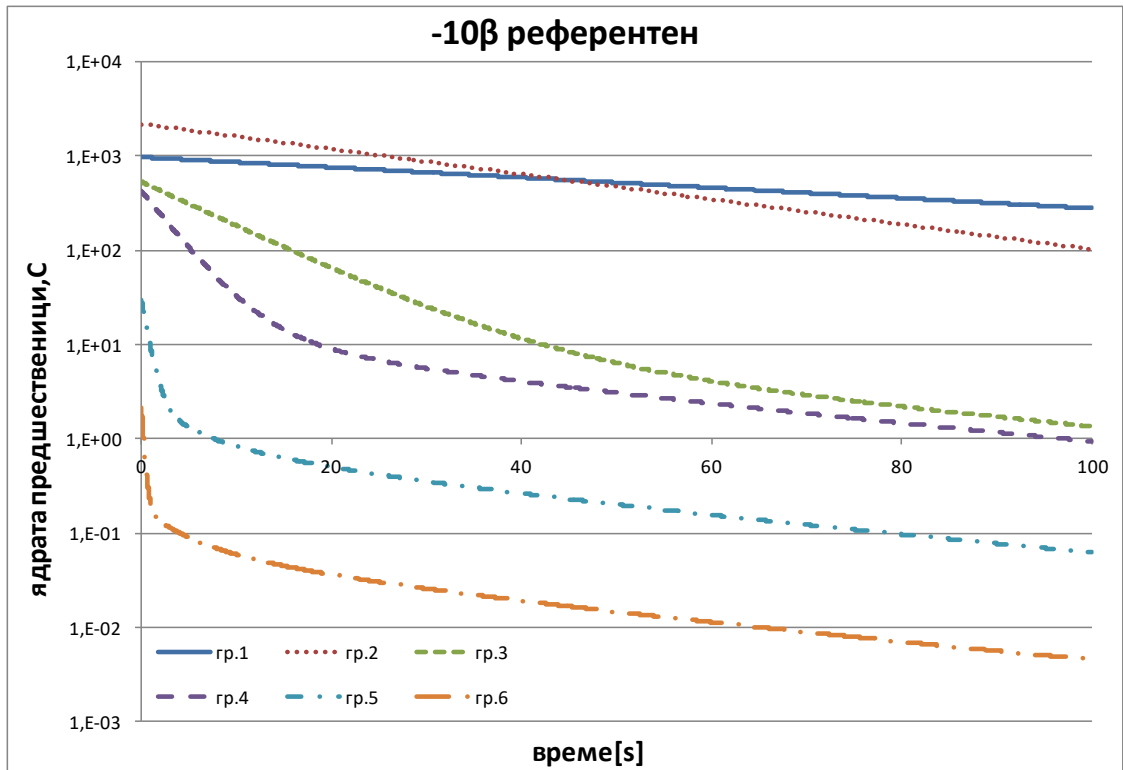
## 7. Резултати

В настоящия раздел са представени резултати от пресмятанията, извършени с различните методи, разгледани в изложението на дипломната работа и използвани за решаването на системата от ОДУ в задачата на точковата реакторна кинетика.

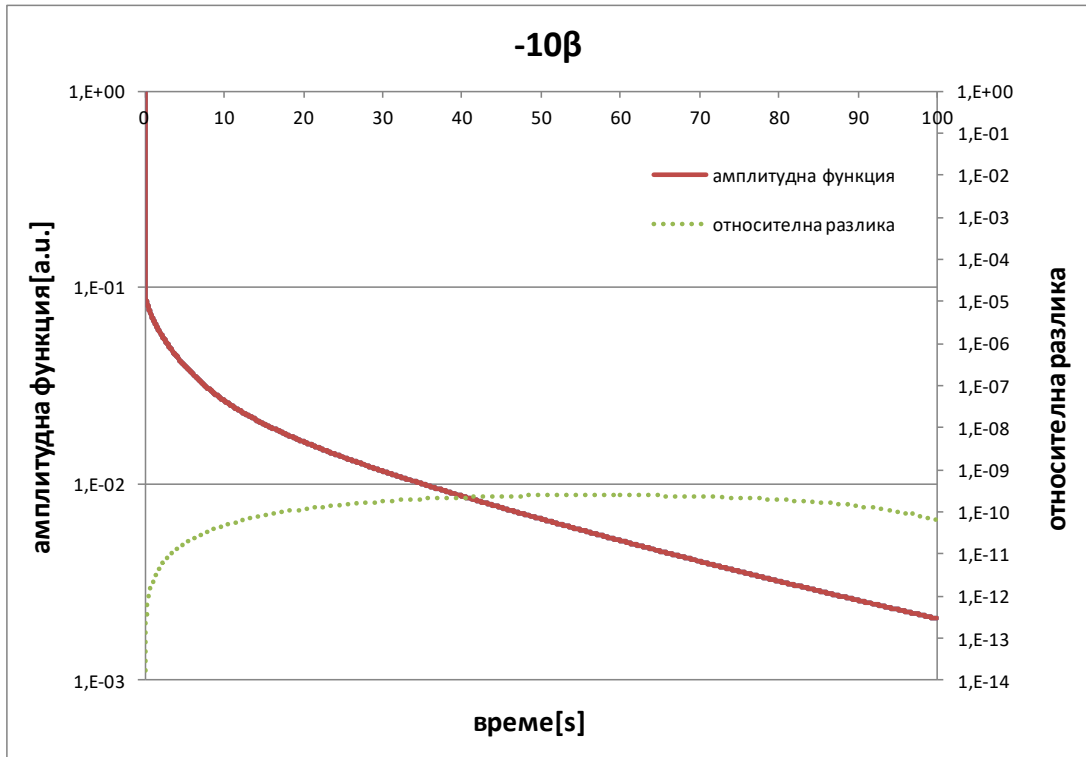
### 7.1. Сравнение между матричната експонента и референтното решение



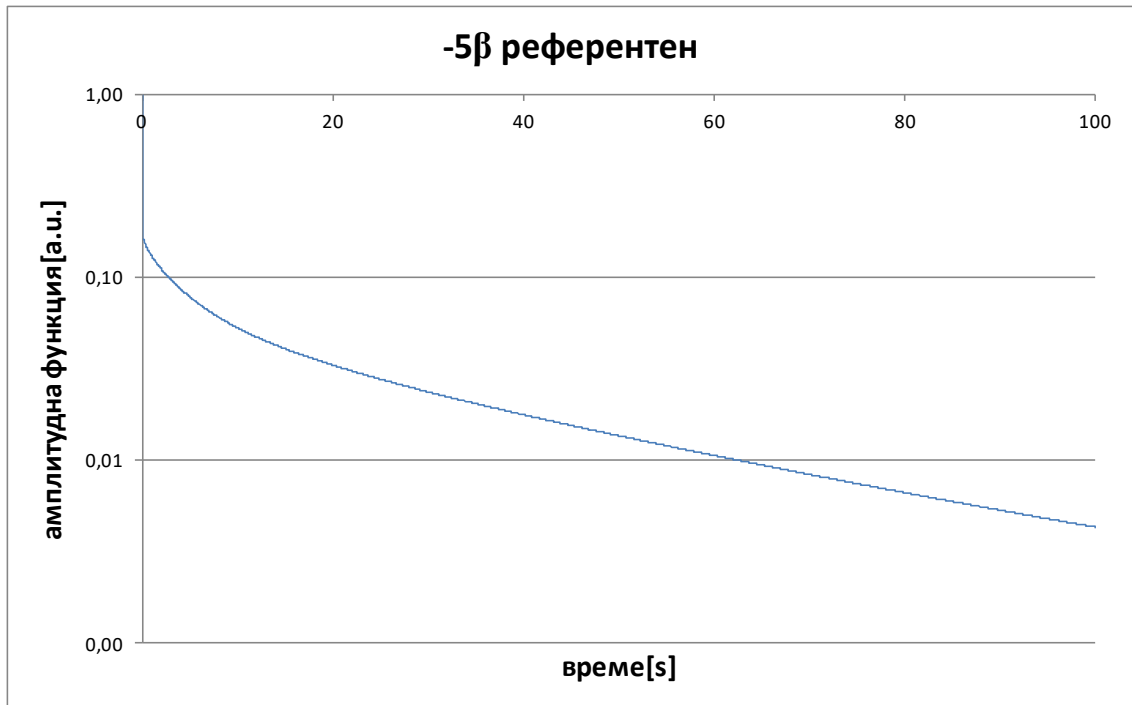
Фиг. 3. Референтен метод. Промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-10\beta$



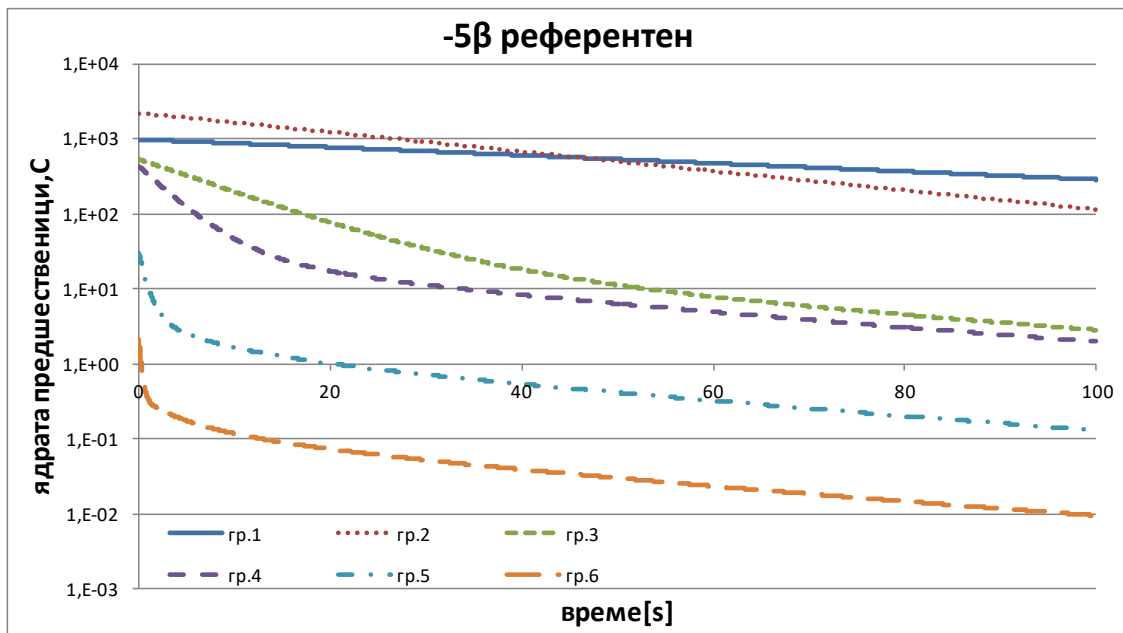
Фиг. 4. Референтен метод. Промяна на претегления интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-10\beta$



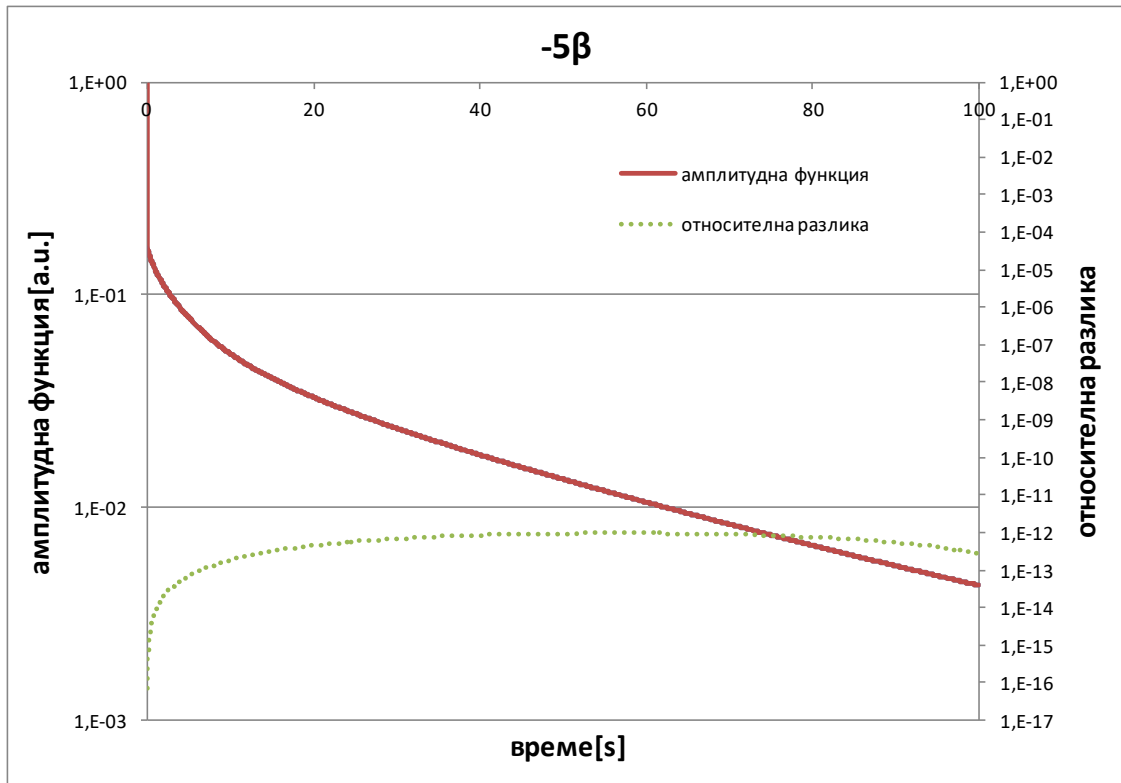
Фиг. 5. Метод на матричната експонента. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-10\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



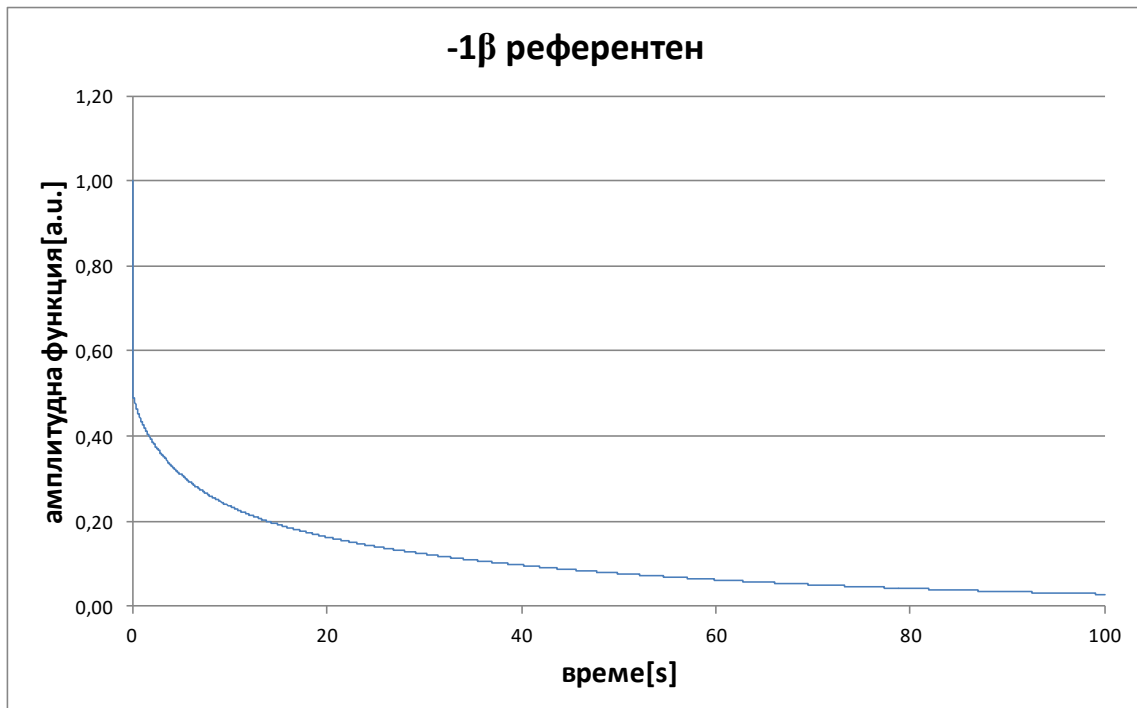
Фиг. 6. Референтен метод. Промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-5\beta$



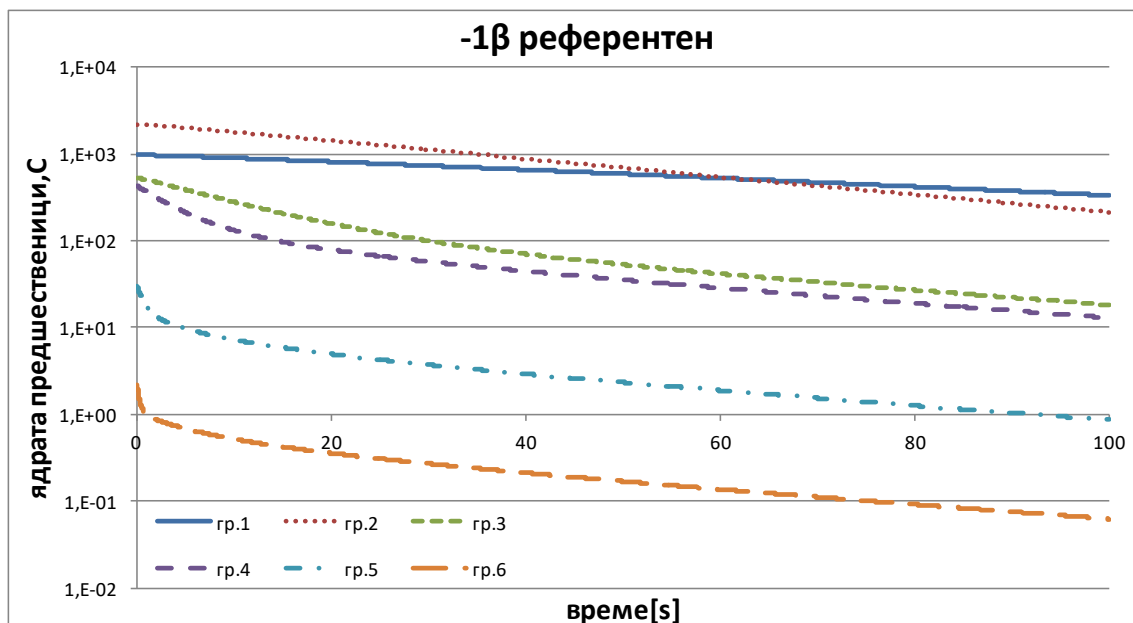
Фиг. 7. Референтен метод. Промяна на претеглен интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-5\beta$



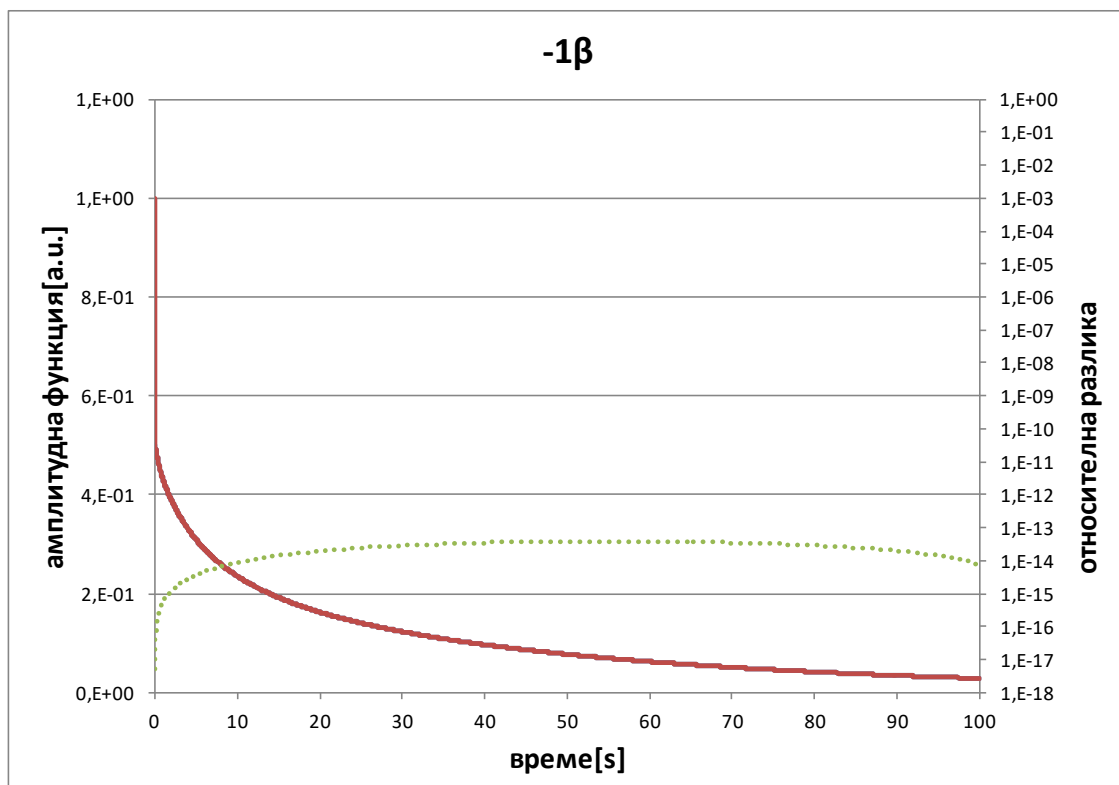
Фиг. 8. Матрична експонента. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-5\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



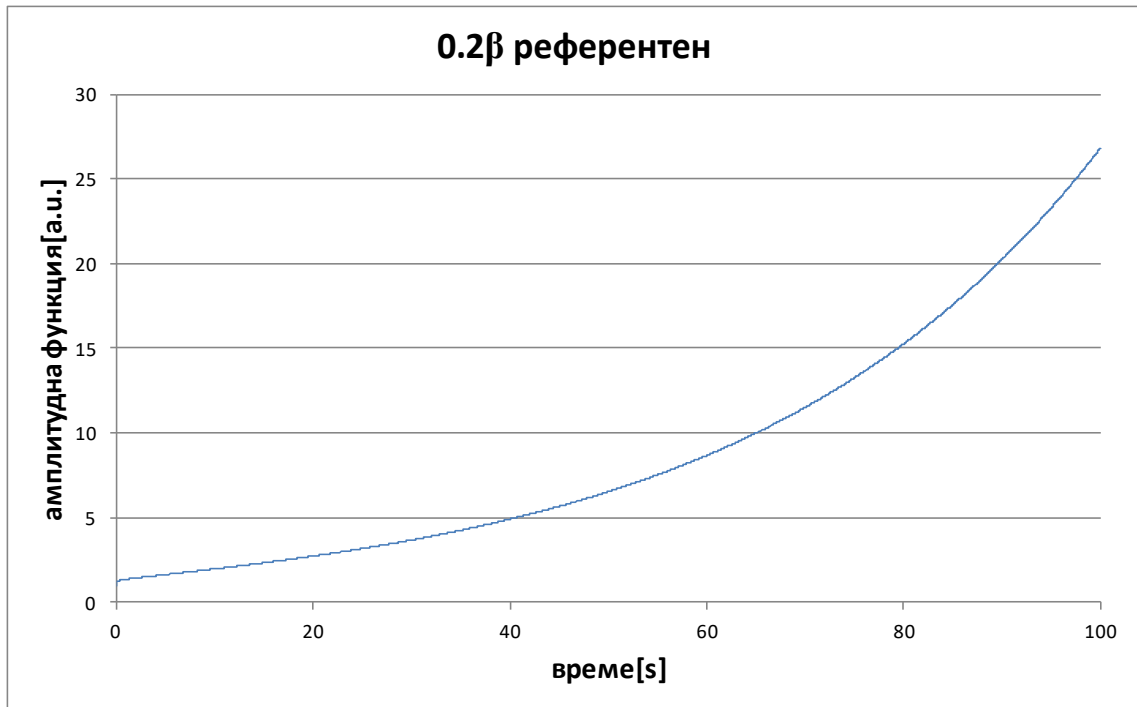
Фиг. 9. Референтен метод. Промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-1\beta$



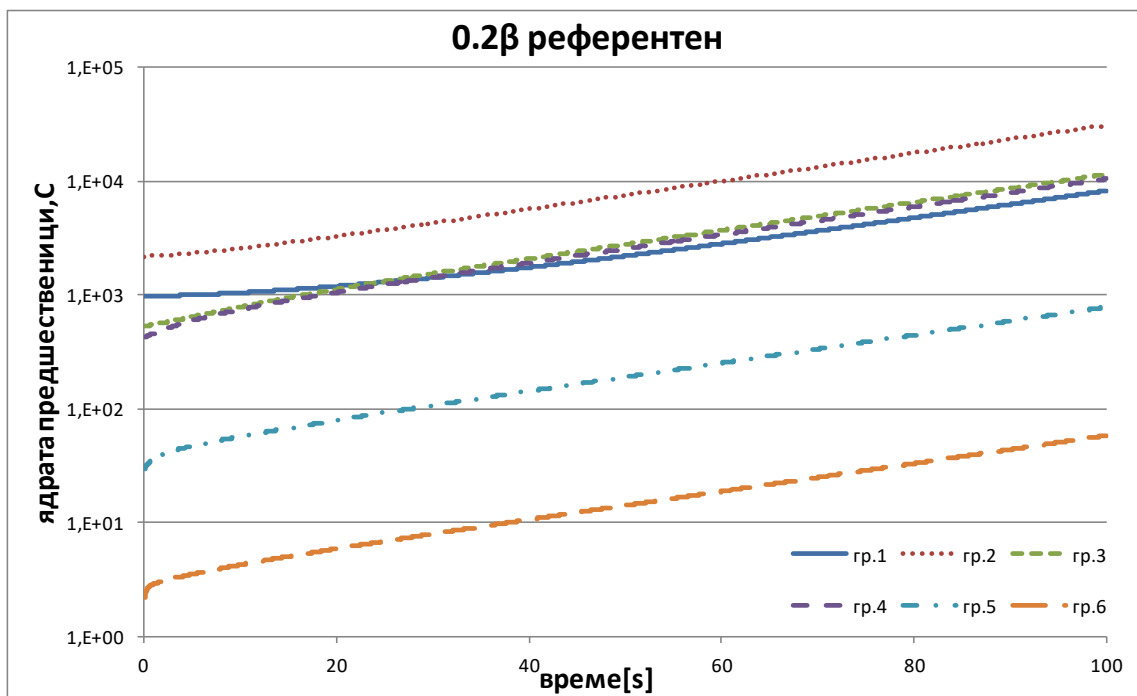
Фиг. 10. Референтен метод. Промяна на претеглен интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-1\beta$



Фиг. 11. Матрична експонента. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-1\beta$  и относителна разлика спрямо референтения метод

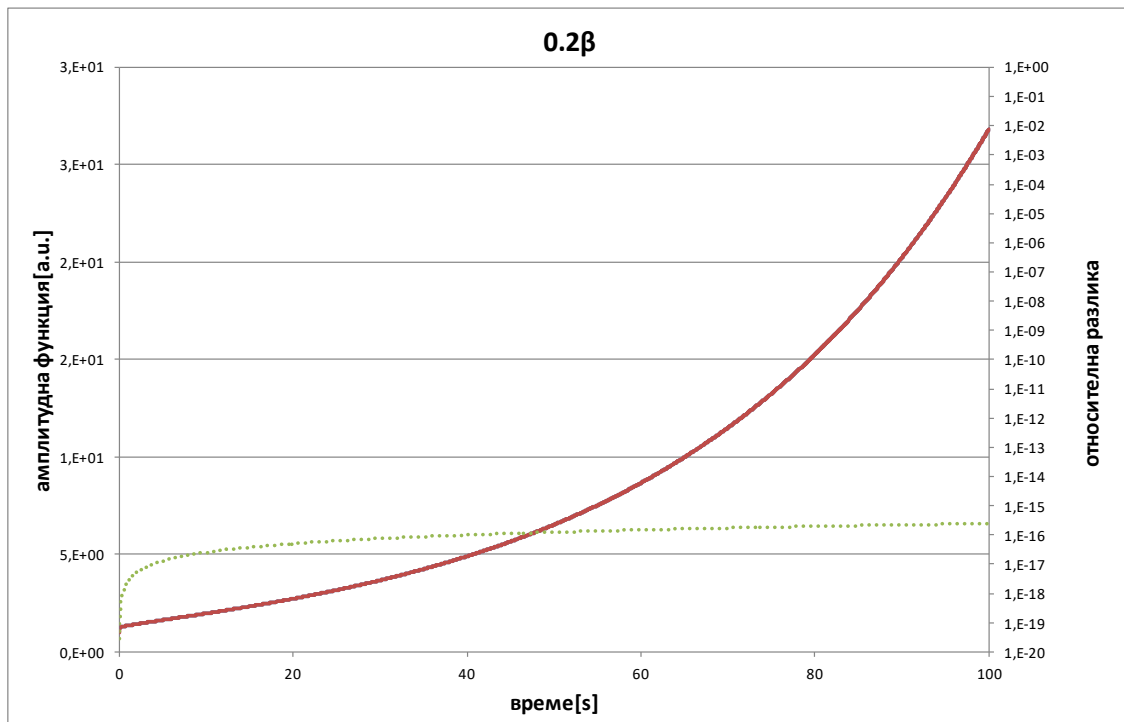


Фиг. 12. Референтен метод. Промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при реактивност  $0.2\beta$

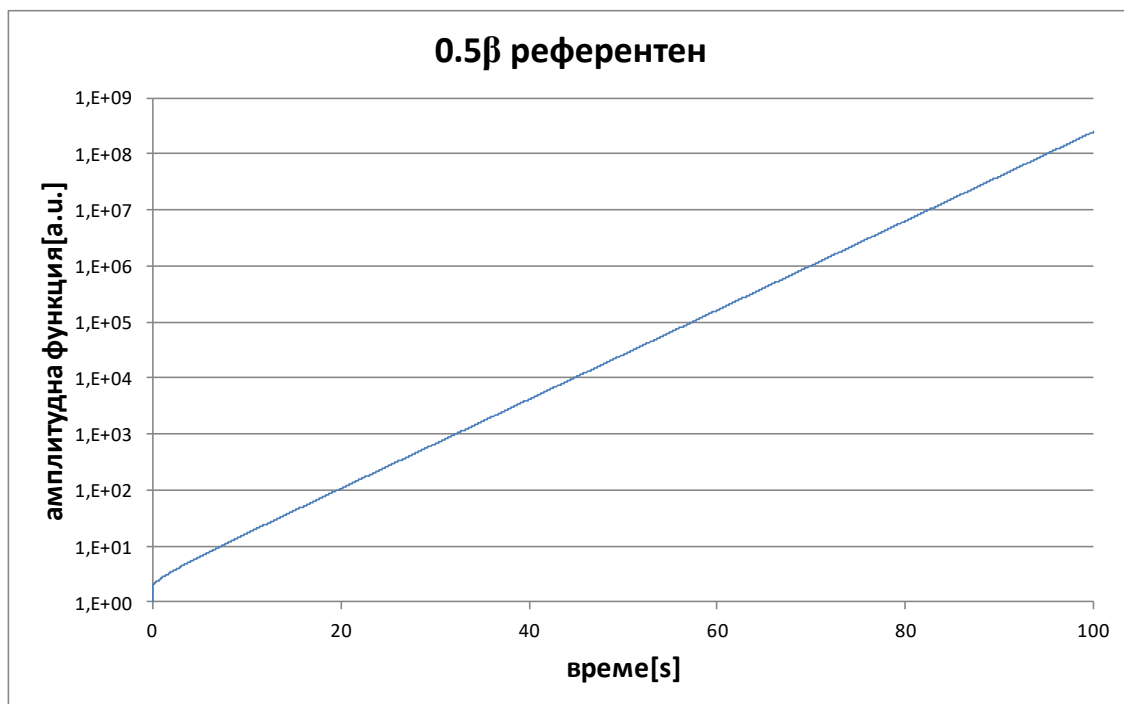


Фиг. 13. Референтен метод. Промяна на претеглен интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $0.2\beta$

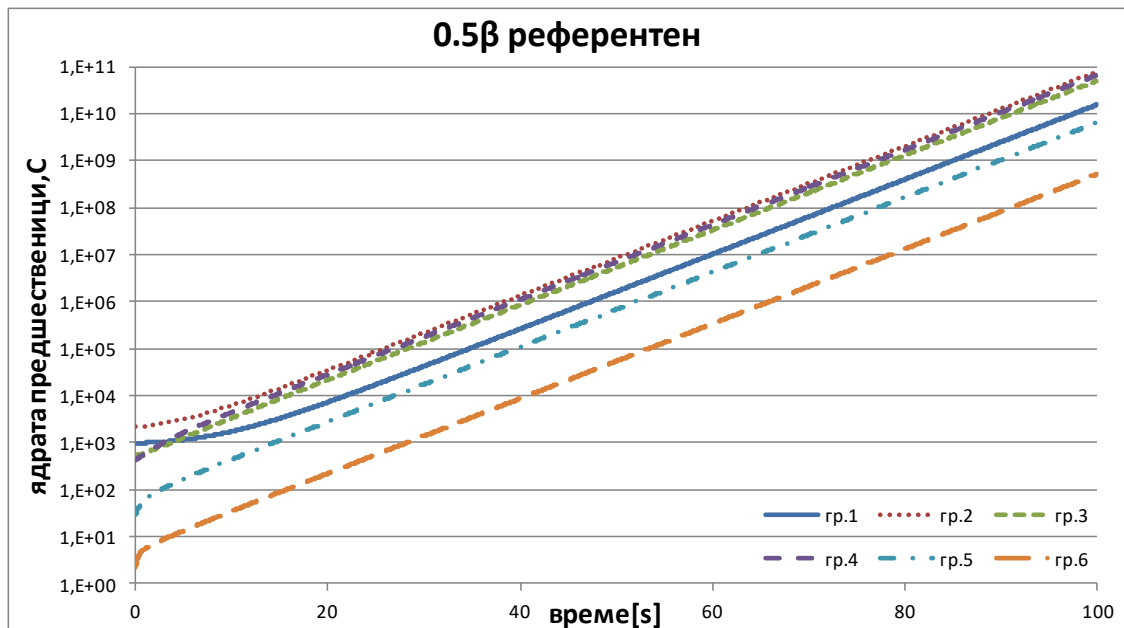




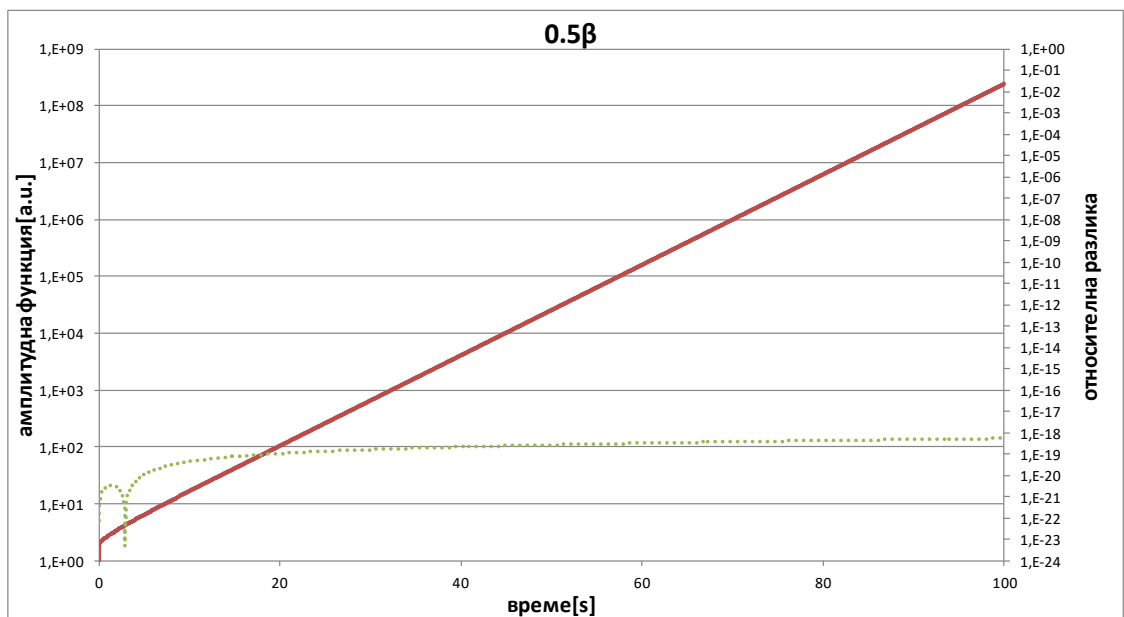
Фиг. 14. Матрична експонента. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $0.2\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



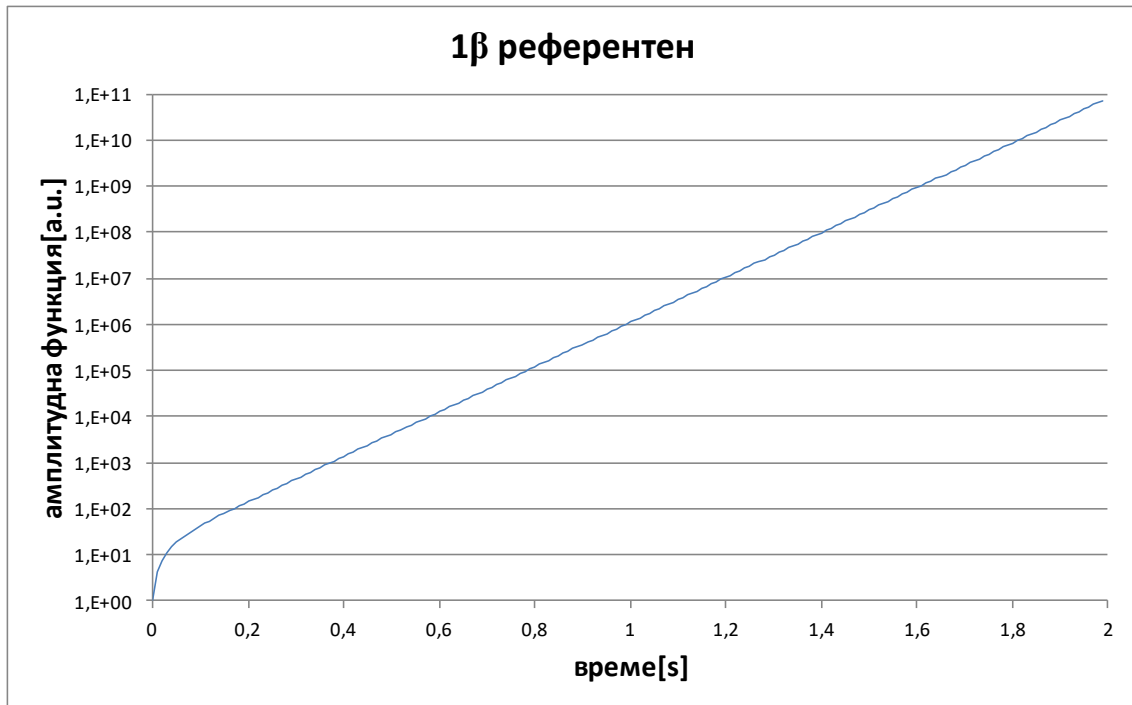
Фиг. 15. Референтен метод. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $0.5\beta$



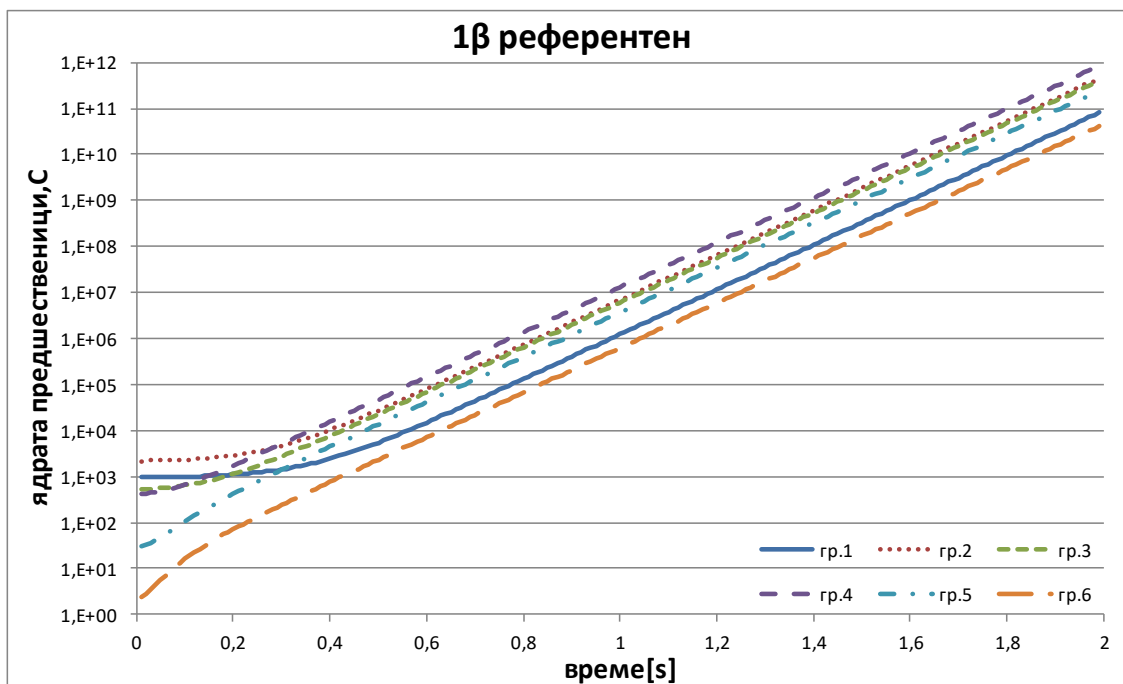
Фиг. 16. Референтен метод. Проявна на претегления интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност 0.5β



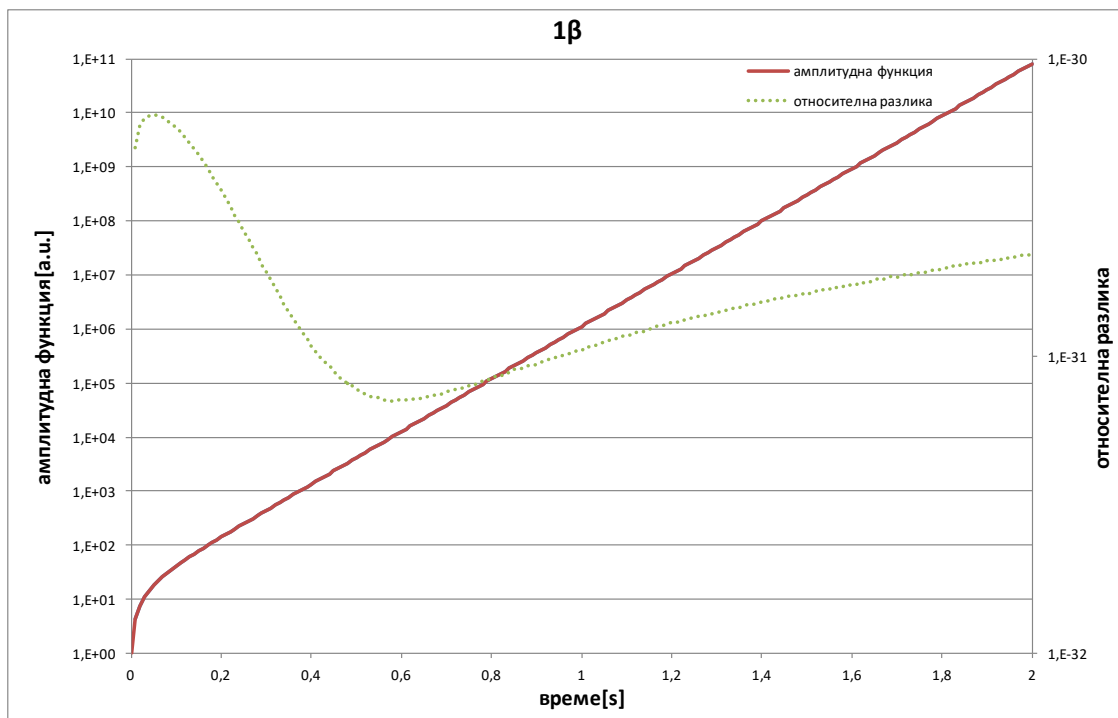
Фиг. 17. Матрична експонента. Проявна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност 0.5β и относителна разлика спрямо референтения метод



Фиг. 18. Референтен метод. Промяна на амплитудна функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $1\beta$

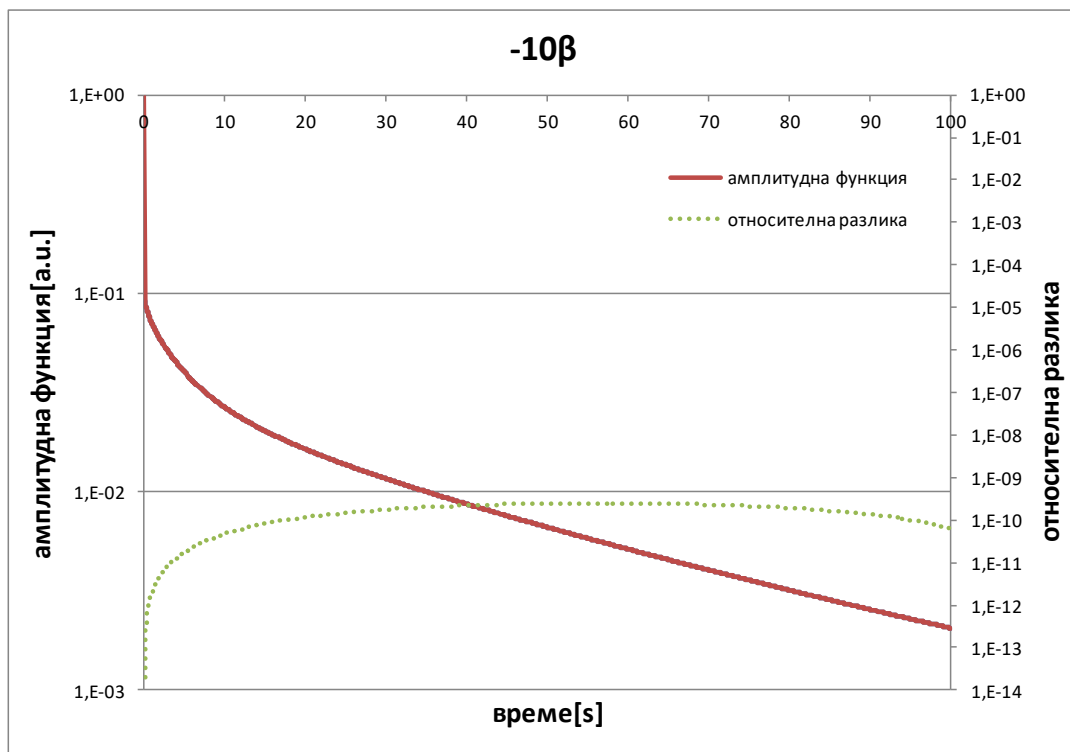


Фиг. 19. Референтен метод. Промяна на претеглен интегрален брой ядра-предшественици на закъсняващи неутрони като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $1\beta$

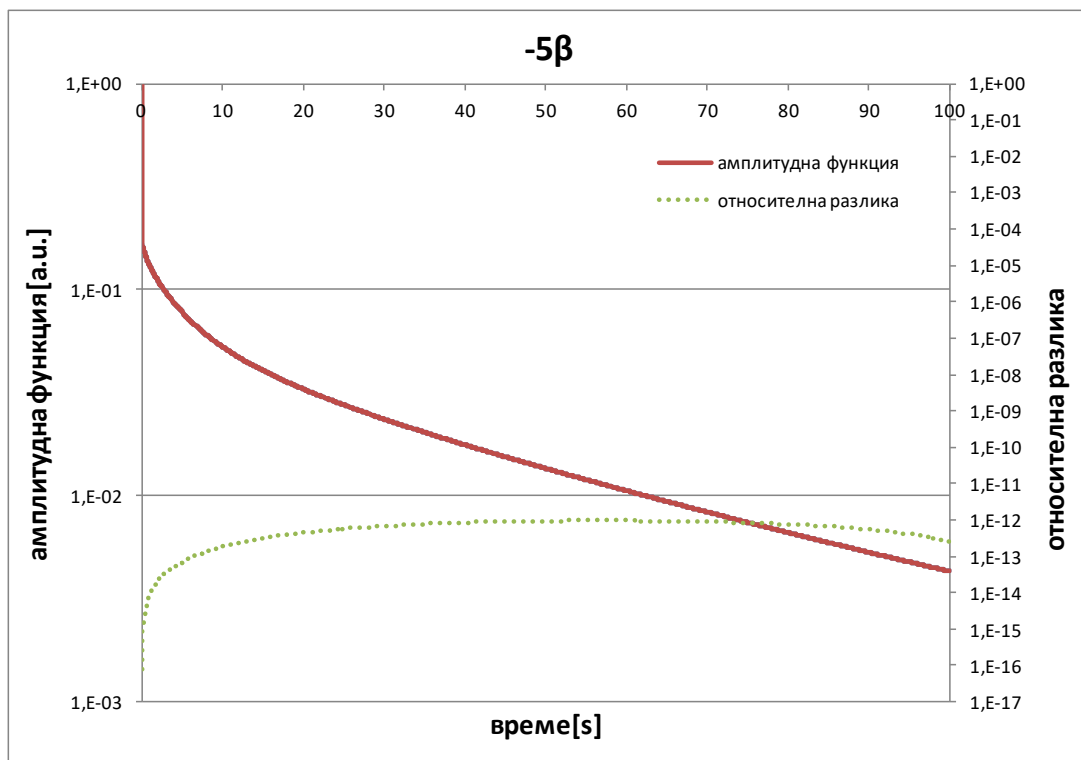


Фиг. 20. Матрична експонента. Промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $1\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод

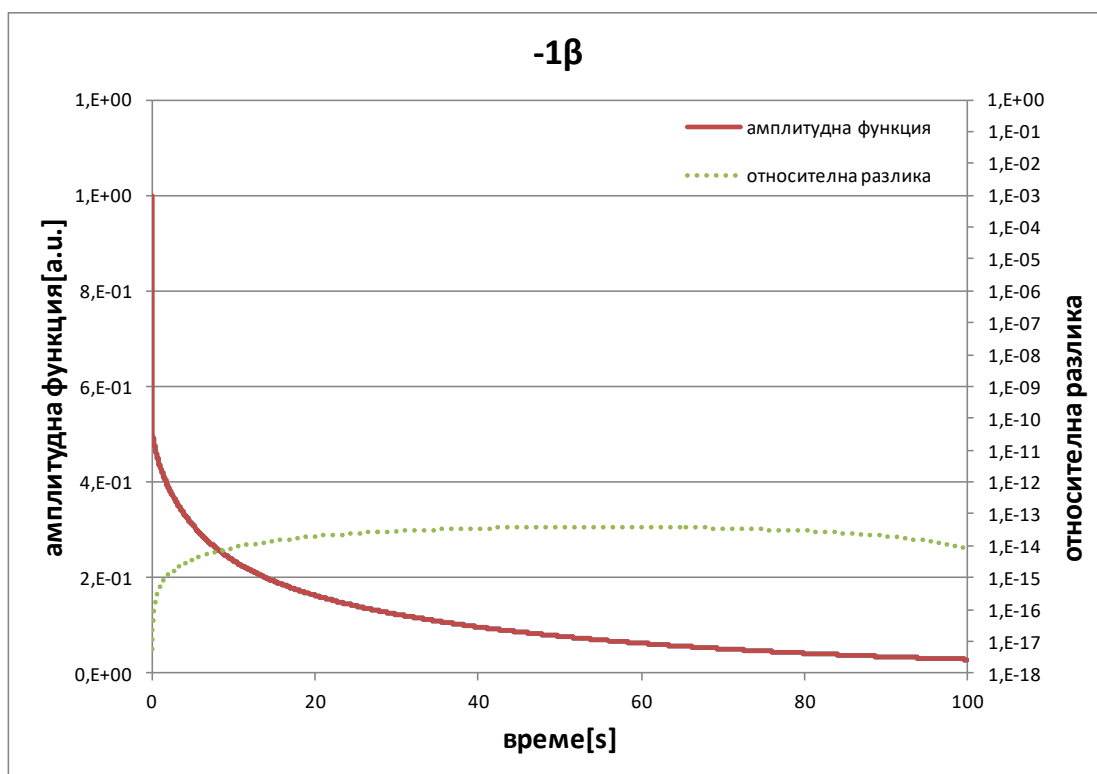
## 7.2. Сравнение между референтния метод и Булириш-Щьор



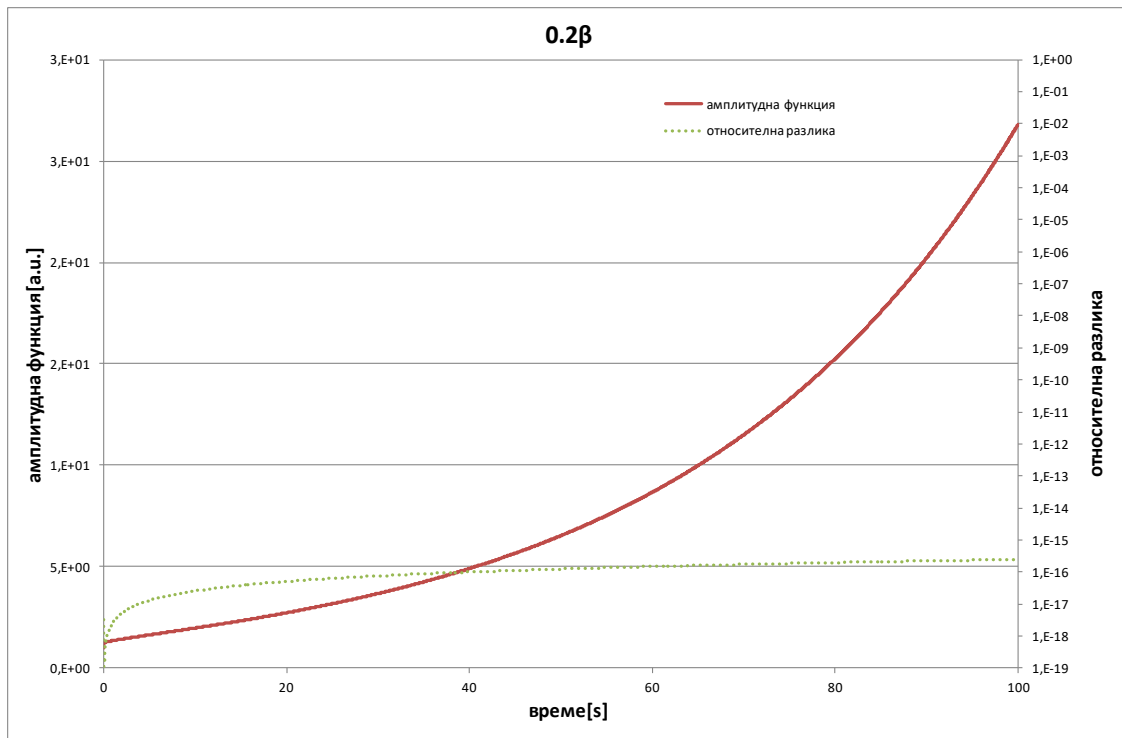
Фиг. 21. Пресметната чрез Булириш-Щьор промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-10\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



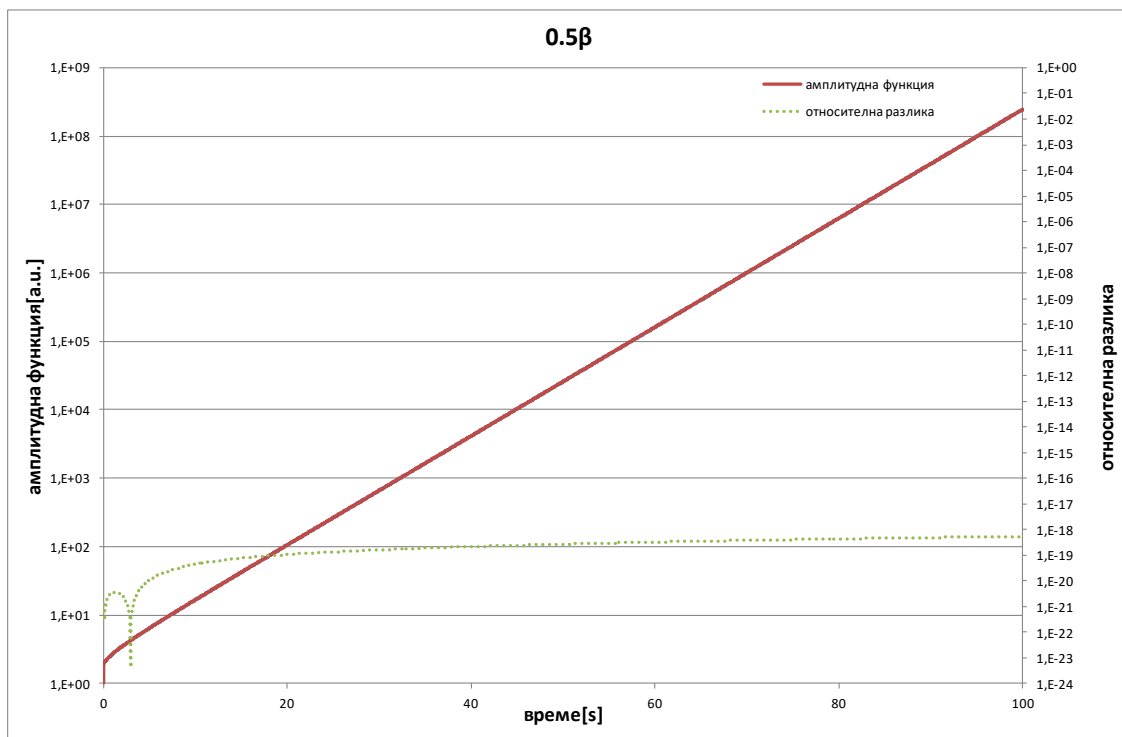
Фиг. 22. Пресметната чрез Булириш-Щьор промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-5\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



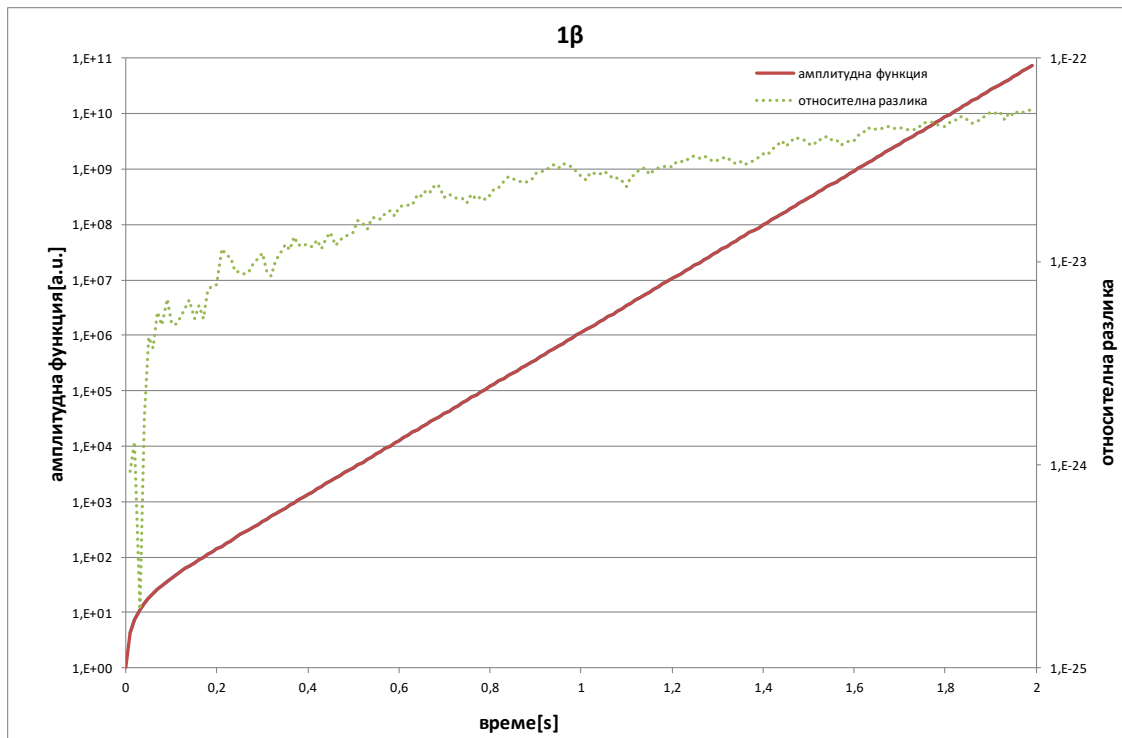
Фиг. 23. Пресметната чрез Булириш-Щьор промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $-1\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



Фиг. 24. Пресметната чрез Булири-Щьор промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при реактивност  $0.2\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



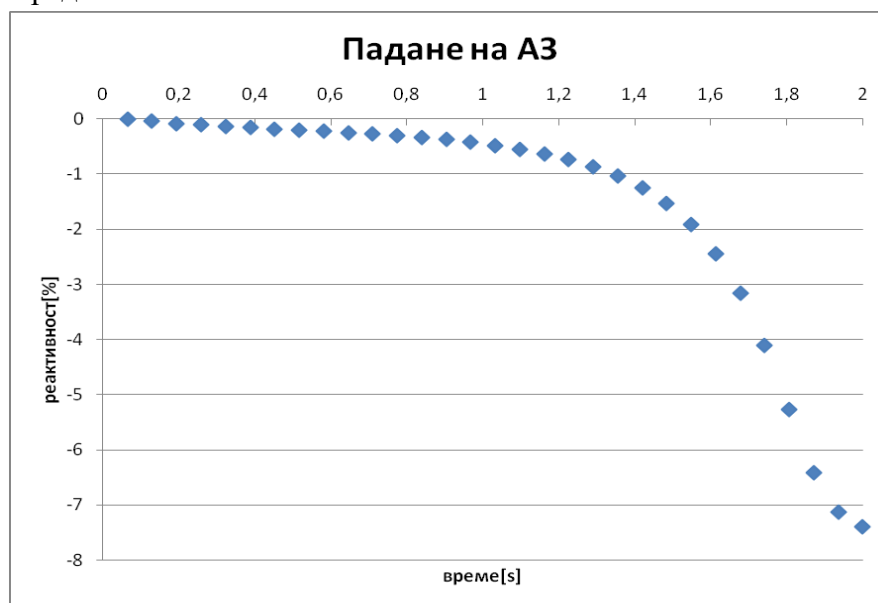
Фиг. 25. Пресметната чрез Булири-Щьор промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $0.5\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод



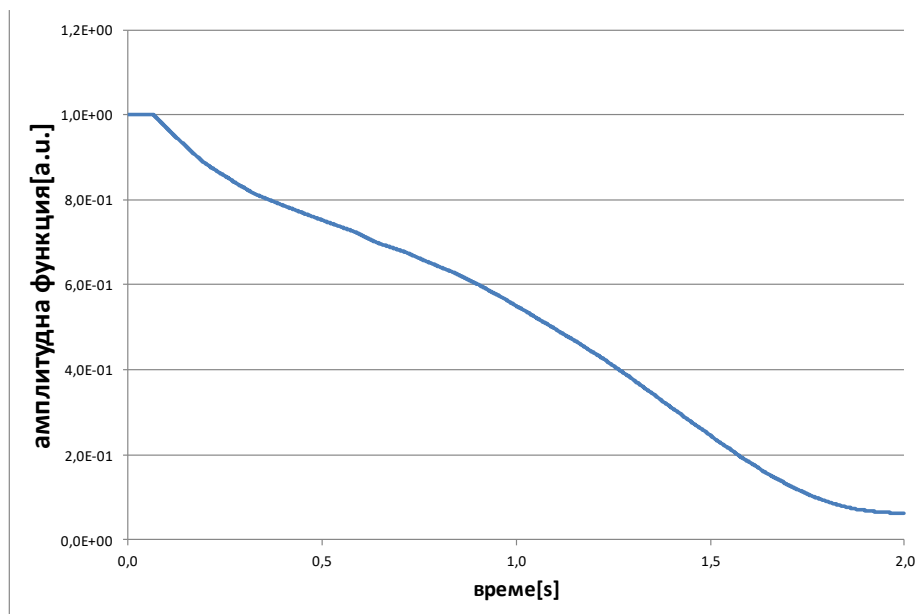
Фиг. 26. Пресметната чрез Булирш-Щър промяна на амплитудната функция в относителни единици като функция на времето при първоначално въведена реактивност  $1\beta$  и относителна разлика спрямо референтния метод

### 7.3. Решение при променлива във времето реактивност

Методът на Булирш-Щър позволява да бъдат решавани задачи, в които системата от ОДУ е с непостоянни коефициенти. За илюстрация в настоящия раздел е представено решение, в което реактивността следва закона, показан на Фиг. 27. Такова поведение на реактивността наподобява процесът при активиране на аварийната защита в реакторната среда.



Фиг. 27. Изменение на реактивността във времето.



Фиг. 28. Метод на Булирш-Щьор. Амплитудна функция в относителни единици при задача с променлива във времето реактивност

## 8. Заключение и изводи

В настоящата дипломна работа в главите на изложението са разгледани последователно математическият извод на уравненията на точковата реакторна кинетика, физическият смисъл на кинетичните параметри и някои методи за решаване на поставената задача, която се категоризира като хомогенна система от ОДУ с постоянни коефициенти в случаите, в които реактивността се въвежда стъпаловидно в началото на даден процес, или съответно с непостоянни коефициенти, когато реактивността зависи от времето.

Представени са решения на някои избрани задачи, върху които са тествани възможностите на представените методи. Референтно решение е получено на основата на алгоритъм, който следва стриктно последователността от математически операции при общоприетия подход за аналитично решаване на хомогенна система от ОДУ с постоянни коефициенти.

При задачите, характеризиращи се със сравнително твърда система, методът на матричната експонента демонстрира бавна сходимост и значително натрупване на грешки от закръгление, което за целите на представените графики е преодоляно чрез използване на по-висока точност при машинните пресмятания – двойна или дори четворна при някои твърди системи. Това единствено решение на проблема при използване на матричната експонента обаче е неприемливо и води до естественото заключение, че методът е неподходящ за решаване на поставената задача.

Методът на Грег също е неуспешен в контекста на уравненията на точковата кинетика, което до голяма степен е очаквано, тъй като до такова заключение се стига и при всеки друг числен метод, изграден на основата на явна схема при интегриране на твърди диференциални уравнения.

Методът на Бадер-Дойфелхарт с екстраполация на Булирш-Щьор демонстрира висока точност и отлична устойчивост при решаването на избрания набор от задачи без



значение от нивото на точност, в което се извършват машинните пресмятания. Това прави методът подходящ за решаване на твърди системи от ОДУ и също, поради спецификата на алгоритъма, позволява решаването на системи както с постоянни, така и с непостоянни коефициенти.

### **Литература**

Acton F., 1997, Numerical Methods That Work, Published by The Mathematical Association of America, Washington D.C.

Bader G. and Deuffhard P., 1983, Numerische Mathematik, vol. 41, pp. 373–398.

Ball S. J. and Adams R. K., 1967, MATEXP: A General Purpose Digital Computer Program for Solving Ordinary Differential Equations by the Matrix Exponential Method, ORNL/TM-1933, Union Carbide Corporation (Nuclear Division), Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn.

Deuffhard P., 1983, Numerische Mathematik, vol. 41, pp. 399–422.

Deuffhard P., 1985, SIAM Review, vol. 27, pp. 505–535.

Duderstadt J.J., and Hamilton L.J., 1976. Nuclear Reactor Analysis, John Wiley & Sons

Francis J., 1961, The QR Transformation, a Unitary Analogue to the LR Transformation—part 1. Comput. J., 4, 265–271. [MR 0130111, vol. 23 #B3143], [Zbl 0104.34304].

Francis J., 1962, The QR Transformation—part 2. Comput. J., 4, 332–345. [MR 0137289, vol. 25 #744], [Zbl 0104.34304].

Gragg W.B. , 1965, On Extrapolation Algorithms for Ordinary Initial Value Problems, J. SIAM Numer. Anal., Ser. B, Vol. 2, No. 3

Householder A., 1958, Unitary Triangularization of a Nonsymmetric Matrix. Journal of the ACM (JACM), Association for Computing Machinery, ff10.1145/320941.320947ff. fihal-01316095f

Lambert J. D., 1992, Numerical Methods for Ordinary Differential Systems, New York: Wiley, ISBN 978-0-471-92990-1

Polyanin A., Zaitsev V., 2018, Handbook of Ordinary Differential Equations Exact Solutions, Methods, and Problems By by Chapman & Hall, Chapman and Hall/CRC

Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., 1997, Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing, Second Edition, Vol. 1 of Fortran Numerical Recipes, Press Syndicate of the University of Cambridge

Stoer J., and Bulirsch R., 1980, Introduction to Numerical Analysis (New York: Springer-Verlag)

Тагамлицки Я., 1971, Диференциално смятане, издателство: Наука и изкуство, София