

В. Б. Маничев¹, канд. тех. наук, доц., manichev@bmstu.ru,

Е. Ф. Митенкова², канд. физ.-мат. наук, зав. лабораторией,

Э. О. Фельдман¹, бакалавр, **Д. Ю. Кожевников**¹, вед. инженер,

Е. В. Соловьева², канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., sol@ibrae.ac.ru,

¹Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,

²Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук

Достоверность и точность решения задач нуклидной кинетики

Современные требования при разработке реакторов нового поколения инициируют совершенствование расчетной базы, в том числе и повышение точности решения задач нуклидной кинетики. Это особенно актуально при максимально полном использовании ядерно-физических данных ввиду объективной сложности получения аналитических решений и экспериментальных данных для большей части нуклидов облучаемого топлива. Показано, что при решении жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) большой и сверхбольшой размерности следует учитывать влияние погрешностей округления чисел на достоверность и точность получения конечного результата вычислений. Для гарантированно точного решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с приемлемыми затратами счета следует использовать алгоритм итерационного уточнения с вычислением правой части с повышенной разрядностью. Это особенно актуально для задач высокой размерности с разреженными матрицами. Для получения решения с гарантированной достоверностью и точностью для всех элементов ОДУ большой размерности в пакете MZK реализован одностадийный неявный метод Эйлера с представленным алгоритмом решения СЛАУ с удвоенной и повышенной точностью вычислений. Пакет MZK может использоваться для получения реперных значений в прецизионных расчетах задач нуклидной кинетики.

Ключевые слова: математическое моделирование, обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ), линейные алгебраические уравнения (ЛАУ), жесткие системы, нуклидная кинетика, гарантированная точность, погрешность округления

Введение

Для решения задач нуклидной кинетики разработано достаточно много программ с разными допущениями и ограничениями математической модели [1]. Математическая модель нуклидной кинетики базируется на системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, представляемых уравнениями вида $d\mathbf{X}(t)/dt = \mathbf{A}\mathbf{X}(t)$, где \mathbf{A} — матрица эффективных скоростей реакций накопления и увода элементов вектора \mathbf{X} , размерность которого определяется числом рассматриваемых элементов (нуклидов). Элементы матрицы определяются как $a_{ij} = \sum_{j=1}^N p_{ij}\lambda_j + \phi \sum_{k=1}^N q_{ik}\sigma_k$ ($i \neq j$) и $a_{ii} = -(\lambda_i + \phi\sigma_i + r_i) + f_i$, где N — число нуклидов; p_{ij} — доля радиоактивного распада j -го нуклида в образовании i -го нуклида; λ_j — коэффициент радиоактивного распада i -го нук-

лида; ϕ — нейтронный поток; q_{ik} — доля поглощения нейтрона k -ми нуклидами, приводящими к образованию i -го нуклида; σ_k — сечение поглощения k -го нуклида; r_i — скорость увода из системы i -го нуклида; f_i — скорость внешней подпитки i -го нуклида. В существующих программах нуклидной кинетики ограничения касаются числа рассматриваемых нуклидов, структуры цепочек переходов, представляемых значениями a_{ij} и λ . Отдельные программы ориентированы на использование только линейных переходов без ветвлений и циклов со строго различающимися коэффициентами с сохранением начальных значений \mathbf{X}_0 для каждой цепочки. В других программах ветвления и циклы реализуются с помощью специальных процедур с искусственно введенными элементами [2].

Современные требования при разработке реакторов нового поколения инициируют со-

вершенствование расчетной базы, в том числе и повышение точности решения задач нуклидной кинетики. При отсутствии экспериментальных данных и аналитических решений особую актуальность приобретает решение задач нуклидной кинетики с максимально полным использованием современных ядерно-физических данных [3, 4]. Для решения задач нуклидной кинетики программы семейства ORIGEN на протяжении более 30 лет остаются наиболее востребованными. В программе ORIGEN2, формально не имеющей ограничений на число элементов и структуру переходов, для вычисления элементов X используются разные подходы — для короткоживущих применяется метод Гаусса—Зейделя, для остальных решение $X(t) = e^{At}X_0$ находится с помощью вычисления матричной экспоненты в виде ряда Тейлора $e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(At)^k}{k!}$ [5]. Возникающие при этом сложности изложены во многих работах [1, 6, 7].

Постановка задачи

Для задач нуклидной кинетики требуется получение достоверных решений с гарантированной точностью для всех элементов при использовании:

- 1) полного набора элементов (~1800) продуктов деления с независимыми выходами;
- 2) матрицы (коэффициентов), сформированной на основе переходов с ветвлениями и циклами, обеспечивающими превращения нуклидов $(Z, A) \rightarrow (Z^*, A^*)$ в соответствии с распадом и реакциями (n, γ) , (n, f) , $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, (n, p) , (n, α) с возможностью включения дополнительных реакций (n, d) , (n, t) , (n, n, α) и др. без изменений алгоритма решения;
- 3) короткоживущих и долгоживущих нуклидов с коэффициентами от $\sim 10^{-27}$ до $\sim 10^6$.

При такой постановке формируемая матрица коэффициентов размерности $\sim 3000 \times 3000$ оказывается несимметричной с числом обусловленности $\mu(A)$ до 10^{27} , что приводит к принципиальным математическим сложностям получения решений. Даже применение наиболее продвинутых итерационных методов в подпространствах Крылова [7] и аппроксимации решений дробно-рациональными чебышевскими полиномами (CRAM) с коэффициентами высокой точности [8] не могут гарантировать достоверность получаемых решений. При этом ни один из существующих матричных методов не обеспечивает устойчивость решений подоб-

ных систем [9] и тем более гарантированную точность для каждой компоненты вектора решений. Метод RADAU5, реализованный в работе [10] для решения задач нуклидной кинетики, базируется на трехстадийном неявном методе Рунге—Кутты, реализованном по классическим алгоритмам без учета влияния погрешностей округления на конечный результат решения системы ОДУ. Также следует отметить, что коэффициенты метода в виде иррациональных чисел не имеют абсолютно точного представления в двоичной арифметике. Кроме того, с увеличением размера решаемых систем ОДУ возрастание влияния погрешностей округления на результаты вычислений связано с вычислительными сложностями определения числа верных значащих цифр в каждой компоненте вектора решений. Поэтому можно ожидать, что для систем ОДУ большой размерности метод RADAU5 даст достоверную траекторию компонент вектора решений, но без гарантии требуемой компьютерной точности для каждой компоненты. Под компьютерной точностью подразумевается гарантированное получение заданного числа верных значащих цифр в каждой компоненте вектора решения.

Трудности получения точного решения

С точки зрения численного интегрирования поставленная задача нуклидной кинетики имеет ряд ключевых особенностей:

- плохая обусловленность матрицы, переводящая задачу в разряд сверхжесткой для большинства основных методов численного расчета;
- отсутствие точного аналитического (контрольного) решения;
- значительный разброс коэффициентов, обусловленный спецификой используемых (ядерных) данных;
- большая размерность задачи (более 1000) и рост $\mu(A)$ способствуют накоплению ошибок округления при использовании численных методов, причем оба фактора действуют независимо друг от друга.

Поскольку для конкретных значений $\mu(A)$ и размерности задачи численная оценка применимости используемого метода весьма затруднительна, получение гарантированно точного решения принципиально важно в отсутствие контрольной тестовой задачи с точным аналитическим решением. Следует отметить, что на решение известных контрольных тестовых задач, имеющих невысокую размерность, влияние погрешностей округления незначитель-

но. Процесс получения численного решения вне зависимости от способа должен обеспечивать достоверность и компьютерную точность решения.

Для решения поставленной задачи предлагается адаптированный для решения жестких систем пакет MZK [11], в котором реализованы AL-устойчивые неявные методы с переменным шагом интегрирования и алгоритмы вычислений с гарантированной точностью [12, 13], учитывающие влияние погрешностей округления.

Методы численного решения системы ОДУ в пакете MZK

Задача нуклидной кинетики представляется системой ОДУ в общем виде $F(x, \dot{x}, t) = 0$ с начальными условиями $x(t_0) = X_0$, что позволяет проводить ее решение пошаговыми методами. Траектория решения для каждой вычисляемой компоненты имеет не колебательный и не периодический характер.

Прямое пошаговое интегрирование исходной системы ОДУ позволяет управлять вычислительным процессом для обеспечения заданной точности, изменяя значение шага по результатам контроля точности решения на текущем шаге.

Требование достоверности решения обеспечивается использованием A- и AL-устойчивых методов интегрирования, что гарантирует устойчивость численного решения при любых значениях шага интегрирования.

Для получения количественно верного тестового контрольного решения метод интегрирования должен обладать свойством абсолютной устойчивости в области мнимых значений области устойчивости этого метода. Неявный метод Эйлера обладает этим свойством, а также свойством "фильтрации" колебательных процессов, возникающих при интегрировании из-за возможных комплексных собственных значений матрицы A большой размерности. При этом полученное решение оказывается достоверным для задач нуклидной кинетики и при увеличении числа шагов всегда будет стремиться к истинному решению.

Требование компьютерной точности подразумевает получение заданного числа верных десятичных знаков мантииссы для каждой компоненты вектора решения, представленного нормализованным числом. Универсальным способом контроля достоверности n верных десятичных значащих цифр является применение следующего алгоритма.

1. Интегрирование с исходными параметрами достижения точности (например, с выбранной относительной погрешностью).

2. Повторное интегрирование с более жесткими параметрами (например, с увеличенной относительной точностью).

3. Сравнение полученных результатов пп. 1 и 2 на совпадение первых n знаков во всех компонентах вектора решения и выполнение пп. 1, 2 до совпадения требуемых n десятичных знаков.

4. Для контроля отсутствия влияния на формирование n знаков результата погрешностей округления, обусловленных размерностью и (или) жесткостью системы, расчет с параметрами интегрирования п. 3 повторяется с повышенной разрядностью и последующим сравнением с результатом п. 3. При расхождении в пределах n десятичных знаков расчеты пп. 1 и 2 выполняются с повышенной разрядностью.

Важно отметить невозможность выполнения п. 4 в стандартных вычислительных пакетах из-за отсутствия в них поддержки интегрирования с повышенной разрядностью.

В подтверждение необходимости учета влияния погрешностей округления и вычислений с повышенной разрядностью для получения точного численного решения в работе [16] представлен пример вычисления числа e : $\exp(1) = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + 1/n)^n$. В табл. 1 представлены результаты расчета $\exp(1)$ при увеличении параметра точности n с одинарной точностью $6 \cdot 10^{-8}$. При возведении $(1 + 1/n)$ в степень только несколько значащих цифр от $1/n$ сохраняются в сумме, и любое последующее возведение в степень будет давать неточное приближение к значению e . Решение с двойной точностью дает правильный результат. Аналогичный результат будет и при увеличении числа шагов в численных методах решения систем ОДУ.

Очевидно, что минимальное влияние погрешностей округления на конечный результат дадут явные методы интегрирования, но они

Таблица 1

Численное вычисление с одинарной точностью $\epsilon = 2,71828$

n	$\exp(1)$	$\text{abs}(e - \exp(1))$
10^1	2,593743	$1,25 \cdot 10^{-1}$
10^2	2,704811	$1,35 \cdot 10^{-2}$
10^3	2,717051	$1,23 \cdot 10^{-3}$
10^4	2,718597	$3,15 \cdot 10^{-4}$
10^5	2,721962	$3,68 \cdot 10^{-3}$
10^6	2,595227	$1,23 \cdot 10^{-1}$
10^7	3,293968	$5,76 \cdot 10^{-1}$

непригодны для решения жестких систем ОДУ. Среди неявных методов интегрирования минимальное влияние погрешностей округления имеют одностадийные неявные методы Рунге—Кутты — методы Эйлера и трапеций, коэффициенты которых абсолютно точно представляются в двоичной арифметике с плавающей точкой. Для получения гарантированно точного решения задач нуклидной кинетики в пакете MZK реализован одностадийный (в реализации неявных методов Рунге—Кутты) неявный метод Эйлера с удвоенной и учетверенной точностью вычислений. В связи с этим MZK обеспечивает интегрирование с различной разрядностью вычислений, в частности, с обычной (*double precision*) и повышенной (*quadruple precision*) разрядностью, позволяющей реализовать единственно возможный способ оценки влияния на результат погрешностей округления при выполнении машинных вычислений. В пакете MATLAB интегрирование можно выполнять только с обычной разрядностью (*double precision*), принятой в этом пакете по умолчанию, но решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) можно выполнять и с повышенной разрядностью, что было использовано для исследования алгоритмов гарантированно точного решения СЛАУ и разработки модуля решения СЛАУ в пакете MZK.

Численное решение жестких и сверхжестких систем ОДУ неявными методами интегрирования сводится к численному решению плохо обусловленных СЛАУ на каждом шаге интегрирования, при этом уменьшение шага интегрирования уменьшает обусловленность СЛАУ, поэтому необходимо реализовать алгоритмы решения СЛАУ, которые гарантируют точное решение для максимально возможного числа обусловленности СЛАУ.

Для плохо обусловленных СЛАУ точное решение можно получить с помощью символьных вычислений, например, в MATLAB с помощью функции *vra*. Недостатком такого подхода является резкое увеличение времени счета при увеличении размерности задачи. Аналогичные проблемы должны возникать и в методе RADAU5 [10] при использовании трехстадийного неявного метода Рунге—Кутты, приводящего к тройному увеличению размера решаемой СЛАУ на каждом шаге интегрирования (по сравнению с одностадийными методами) и заметно возрастающему влиянию погрешностей округления.

Наши исследования показали, что итерационное уточнение с обычной для MATLAB точностью решает эту проблему, но правая часть СЛАУ должна быть вычислена с повышенной

разрядностью. Опишем алгоритм итерационного уточнения решения для СЛАУ вида $Ax = b$.

Пусть X_p — приближенное решение, R — соответствующая невязка. В работе [17] показано, что точность решения можно существенно повысить, итерационно улучшая его следующим образом:

- вычисляем с повышенной разрядностью невязку: $R = b - AX_p$;
- вычисляем приращение dX для СЛАУ $AdX = R$;
- $X = X + dX$.

Итерационный процесс продолжается до достижения требуемой точности — относительного значения dX либо до указанного априори числа итераций.

Вычисление dX можно значительно ускорить при использовании LU-разложения матрицы A . Реализованный в MATLAB алгоритм обеспечивает достижение требуемой точности с помощью итерационного процесса "уточнения". Число итераций улучшения достаточно ограничить семью [18].

На тестовых задачах с известным решением оценить точность полученного результата можно, вычислив порядок относительной погрешности. Для получения точного (аналитического) решения в MATLAB использовалась функция *vra*:

```
function [XA] = vpa_solver(A,B)
    digits n
    AVPA = vpa(A);
    BVPA = vpa(B);
    XVPA = vpa(X);
    XAVPA = AVPA\BVPA;
    XA = double(XAVPA);
End
```

Тестирование алгоритма решения СЛАУ

Разработанный алгоритм решения СЛАУ протестирован на задачах с плотными матрицами с максимальным размером 1000×1000 . Формируется случайная матрица заданного размера с заданным числом обусловленности:

```
function A = randmatgen(logcond,n)
    [q1,~] = qr(randn(n,n));
    [q2,~] = qr(randn(n,n));
    d = diag(10.^((0:n-1)*logcond/(n-1)));
    A = q1*d*q2;
```

где *logcond* — десятичный логарифм числа обусловленности, n — размерность матрицы.

Задается вектор неизвестных, и, умножая матрицу A на этот вектор, получаем вектор правых частей с известным решением.

При использовании указанного алгоритма в тестовых задачах для систем ОДУ точность задавали равной 12 верных значащих цифр, что достаточно для обеспечения заданной по умолчанию точности решения систем ОДУ 10^{-3} .

На первом этапе тестирования удостоверимся в корректности получаемых результатов для различных входных данных. Было сгенерировано 200 случайных матриц разных порядков (не выше 20) с числом обусловленности 10^{12} . Для всех этих матриц указанный алгоритм обеспечил верные результаты уже при двух итерациях уточнения.

На втором этапе исследовали зависимость числа итераций уточнения от размера матрицы. Зависимость оказалась достаточно слабой: для матриц до 616×616 требуется две итерации уточнения, от 616×616 до 1000×1000 требуется три итерации (параметры *вра* установлены по умолчанию).

Также исследовали зависимость времени счета от размера матрицы. Результаты при использовании MZK и функции *вра* приведены на рис. 1. Требуемая точность достигалась в обоих случаях.

Исследовали зависимость числа итераций уточнения от числа обусловленности $\mu(\mathbf{A})$ для матрицы 10×10 (табл. 2).

Отметим, что поскольку для $\mu(\mathbf{A}) > 8$ потребовались итерации уточнения, то для MATLAB с обычной точностью (без уточнений и без функции *вра*) достижение требуемой точности оказывается невозможным, и при $n > 7$ гарантия точности решения отсутствует.

Таким образом, для гарантированно точного решения СЛАУ с приемлемыми затратами счета следует использовать алгоритм итерационного

уточнения с вычислением правой части с повышенной разрядностью, что особенно актуально для задач высокой размерности с разреженными матрицами. Этот алгоритм реализован в пакете MZK в качестве основы для решения систем ОДУ с гарантированной точностью.

Получение эталонного решения с помощью пакета MZK

При использовании пакета MZK единственным задаваемым параметром интегрирования является относительная точность, указывающая точность вычисления для каждой компоненты вектора решения на текущем шаге интегрирования с контролем точности.

Традиционно в математических пакетах при интегрировании задаются два параметра — относительная (*RelTol*) и абсолютная (*AbsTol*) погрешности. При этом значение *AbsTol* выбирается эмпирическим путем и, как правило, задается на несколько порядков меньше *RelTol*, например, в MATLAB по умолчанию рекомендованы $RelTol = 10^{-3}$, $AbsTol = 10^{-6}$. Из полученных решений (рис. 2—4) видно, что результат интегрирования методом *ode15s* в MATLAB, позиционируемым для решения жестких систем, оказывается достаточно чувствительным к выбору *AbsTol*.

С помощью пакета MZK траектория тестового контрольного решения была получена интегрированием ОДУ неявным методом Эйлера для *double precision* с последующим контрольным расчетом с повышенной точностью *quadruple precision*. Относительная точность задавалась равной $\varepsilon = 10^{-3}$ (аналог *RelTol*),

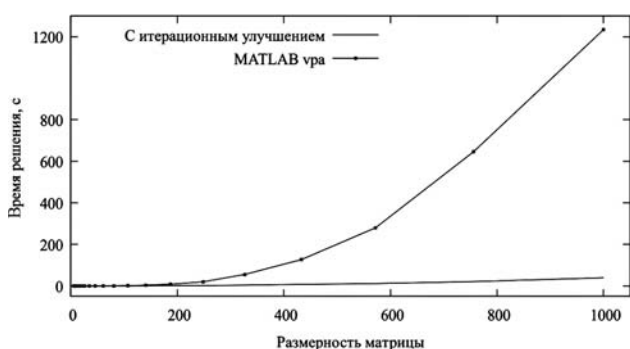


Рис. 1. Зависимость времени решения СЛАУ от размерности задачи

Таблица 2

Зависимость числа итераций уточнения n от $\mu(\mathbf{A})$

$\mu(\mathbf{A})$	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
$n(\mu)$	0	1	1	2	2	2	3	5	6	> 7

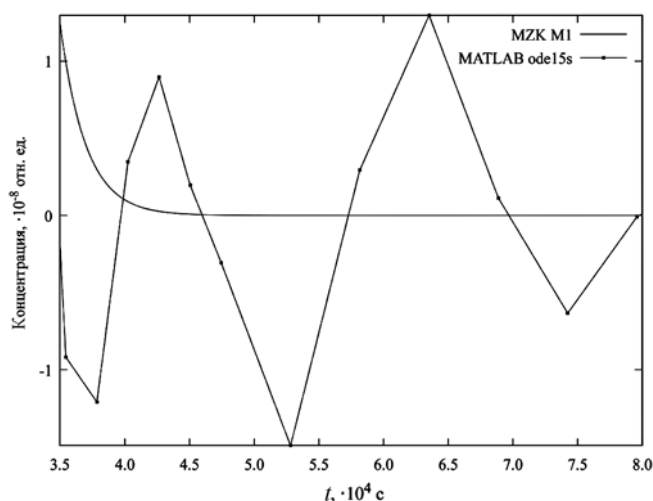


Рис. 2. Ложные колебания траектории решения в MATLAB методом *ode15s* для $RelTol = 10^{-3}$, $AbsTol = 10^{-6}$

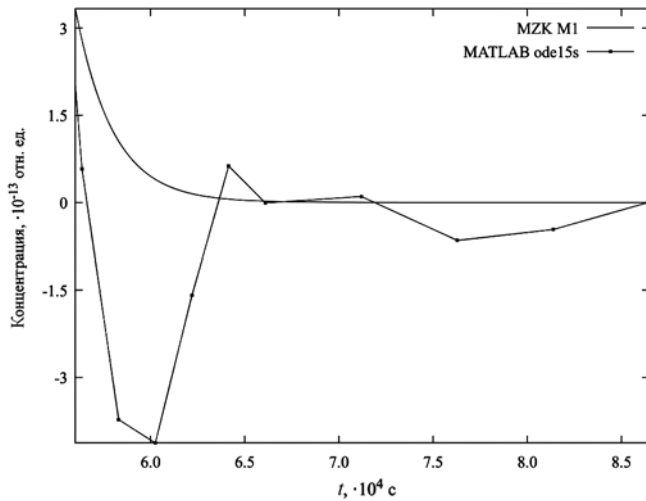


Рис. 3. Ложные колебания траектории решения в MATLAB методом ode15s для $RelTol = 10^{-3}$, $AbsTol = 10^{-12}$

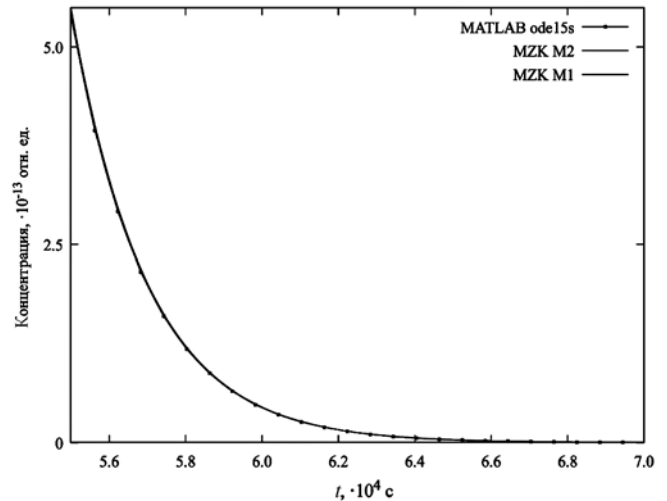


Рис. 4. Отсутствие ложных колебаний траектории решения в MATLAB методом ode15s для $RelTol = 10^{-3}$, $AbsTol = 10^{-100}$

что подразумевает получение как минимум двух достоверных десятичных знаков мантисы в нормализованном представлении каждой компоненты вектора решения.

При возмущении элементов матрицы от 5 до 20 % интегрирование неявным методом Эйлера обеспечивает линейность возмущения, а также устойчивость решения с более заполненной матрицей. Контроль совпадения значений проводился для компонент вектора решения, не превышающих значений 10^{-25} .

Повышение порядка используемого метода обуславливает возрастание влияния погрешностей округления на конечный результат, что требует дополнительных исследований и анализа, выходящих за рамки статьи.

Следует отметить, что применение неявных методов высокого порядка точности позволяет при равной относительной точности достигать значительной экономии времени интегрирования за счет увеличения шага интегрирования. Так, метод второго порядка показал уменьшение времени интегрирования приблизительно

но в 3,5 раза по сравнению с методом первого порядка.

Получение решения с помощью MATLAB, анализ результатов

Для тестовой задачи с матрицей 1779×1779 и $\mu(A) \sim 10^{27}$ с помощью пакета MZK, в котором реализованы AL-устойчивые неявные методы M1, M2 и M4 [12], методом M1 (неявный метод Эйлера) получено точное решение для относительной точности $\epsilon = 10^{-3}$. Точность решения была проверена с помощью вычислений в quadruple и double precision. В табл. 3 и 4 представлены значения отдельных компонент вектора численного решения ОДУ с матрицей 1779×1779 , вычисленные с обычной и повышенной разрядностью.

Совпадающие в решениях значащие цифры (табл. 3) можно признать верными. Совпадающие во всех трех методах цифры (табл. 4) можно считать гарантированно верными (минимальное значение в последней колонке).

Таблица 3

Определение верных значащих цифр мантисы нормализованных чисел результатов при вычислении с повышенной разрядностью ($\epsilon = 10^{-3}$)

Компонента	Начальное значение, отн. ед.	Конечное значение, отн. ед.		Число верных значащих цифр
		Разрядность		
		Double (64 бит)	Quadruple (128 бит)	
56	0	$9,6208352 \cdot 10^{-12}$	$9,6208301 \cdot 10^{-12}$	6
82	8,5291	8,528585083555638	8,528585083556097	12
88	0	$4,28207 \cdot 10^{-15}$	$4,28210 \cdot 10^{-15}$	4
102	0,012503	0,012504453607224	0,012504453607233	12
306	0	$5,369878 \cdot 10^{-55}$	$5,370170 \cdot 10^{-55}$	2

Определение верных значащих цифр при вычислении разными методами пакета MZK (quadruple precision)

Компонента	Метод			Число верных значащих цифр M1 и M2 ($\varepsilon = 1 \cdot 10^{-3}$)/ M2 ($\varepsilon = 1 \cdot 10^{-3}$ и $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-5}$)
	M1 $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-3}; h_0 = 1 \cdot 10^{-12}$	M2 $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-3}; h_0 = 1 \cdot 10^{-10}$	M2 $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-5}; h_0 = 1 \cdot 10^{-10}$	
56	9,621150 $\cdot 10^{-12}$	9,621896 $\cdot 10^{-12}$	9,621895 $\cdot 10^{-12}$	4/6
78	4,856970853893407	4,856970853765135	4,856970853765135	10/16
82	8,528585083553850	8,528585083548615	8,528585083548615	11/16
88	4,280472 $\cdot 10^{-15}$	4,276675 $\cdot 10^{-15}$	4,276673 $\cdot 10^{-15}$	2/6
100	3,148138326	3,148138314140	3,1481383141432	8/12
101	0,15507764376	0,155077643776481	0,155077643776483	9/14
102	1,2504453606 $\cdot 10^{-2}$	1,250445360553e $\cdot 10^{-2}$	1,250445360553 $\cdot 10^{-2}$	10/16
306	5,351 $\cdot 10^{-55}$	5,30947 $\cdot 10^{-55}$	5,30932 $\cdot 10^{-55}$	2/4

Решение задачи размерности 2491×2491 методом переменного порядка точности ode15s в MATLAB приводит к ложным колебаниям вычисляемых значений для отдельных компонент вектора решений (см. рис. 2, 3). При существенном уменьшении значения *AbsTol*, например до 10^{-100} , наблюдается совпадение результатов в MATLAB и MZK (рис. 4).

Заключение и выводы

- Прецизионные методы решения задач нуклидной кинетики ориентированы на максимально полное использование современных библиотек ядерных данных и обеспечение устойчивых решений на разных временных сетках. Объективная сложность получения экспериментальных данных и аналитических решений для большей части нуклидов требует применения вычислительных методов с гарантированной точностью решения для всех элементов.
- При решении жестких систем ОДУ большой и сверхбольшой размерности следует учитывать влияние погрешностей округления на достоверность и точность получения конечного результата вычислений.
- Для гарантированно точного решения СЛАУ с приемлемыми затратами счета следует использовать алгоритм итерационного уточнения с вычислением правой части с повышенной разрядностью. Это особенно актуально для задач большой размерности с разреженными матрицами.
- Для получения гарантированно точного решения систем ОДУ в задачах нуклидной кинетики используется одностадийный не-

явный метод Эйлера с представленным алгоритмом решения СЛАУ, реализованным в пакете MZK с удвоенной и повышенной точностью вычислений. Полученное гарантированно точное решение следует использовать для настройки параметров неявных методов высокого порядка точности для решения систем ОДУ большой размерности.

- Пакет MZK, обеспечивающий достоверные решения с гарантированной точностью для всех вычисляемых нуклидов, может применяться для получения реперных значений в прецизионных расчетах задач нуклидной кинетики.

Список литературы

1. **Isotalo A. E., Aarnio P. A.** Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides // *Ann. Nucl. Energy*. 2011. Vol. 38. P. 261–268.
2. **Cetnar J.** General Solution of Bateman Equations for Nuclear Transmutations // *Ann. Nucl. Energy*. 2006. Vol. 33. P. 640–645.
3. **Митенкова Е. Ф., Новиков Н. В., Соловьева Е. В.** Библиотеки с расширенным представлением выхода продуктов деления в расчетах нуклидного состава топлива в быстром спектре // *Атомная энергия*. 2014. Т. 117, Вып. 6. С. 341–346.
4. **Mitenkova E. F., Novikov N. V.** Effect of fission yield libraries on the irradiated fuel composition in Monte Carlo depletion calculations // *Proceedings of the 7-th Workshop Nuclear Measurements, Evaluations and Applications (NEMEA-7)*. 5–8 November 2013. Geel, Belgium, OECD 2014. P. 287–296.
5. **Bell M. J.** Origen: The ORNL Isotope Depletion and Generation Code. ORNL-4628. 1973.
6. **Митенкова Е. Ф., Соловьева Е. В.** Вычислительные ограничения программы ORIGEN2 в задачах нуклидной кинетики. М: ИБРАЭ РАН, 2019. 31 с.
7. **Yamamoto A., Tatsumi M., Sugimura N.** Numerical Solution of Stiff Burnup Equation with Short Half Lived Nuclides by the Krylov Subspace Method // *J. Nucl. Sci. Technol.* 2007. Vol. 44. P. 147–154.
8. **Pusa M., Leppänen J.** Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations // *Nucl. Sci. Eng.* 2010. Vol. 164. P. 140–150.
9. **Moler C., C. van Loan.** Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later // *SIAM Rev.* 2003. Vol. 45, N. 1. P. 3–49.

10. **Stankovskiy A., Van den Eynde, Advanced G.** Method for Calculations of Core Burn-Up, Activation of Structural Materials, and Spallation Products Accumulation in Accelerator-Driven Systems // *Sci. Technol. Nucl. Install. Article*. 2012. ID 545103. 12 p.

11. **Маничев В. Б., Жук Д. М.** Базовый набор тестовых задач для решателей систем ОДУ // *Технологии инженерных и информационных систем*. 2016. Т. 2, № 4. С. 70–84.

12. **Маничев В. Б., Митенкова Е. Ф., Жук Д. М., Кожевников Д. Ю., Соловьев А. В., Соловьева Е. В.** Использование АЛ-устойчивых методов решения систем ОДУ для задач изотопной кинетики реакторных систем // *Информационные технологии*. 2017. Т. 23, № 3. С. 177–183.

13. **Митенкова Е. Ф., Соловьева Е. В., Маничев В. Б., Фельдман Э. О.** Задачи изотопной кинетики на полном

базисе выхода продуктов деления // *Атомная Энергия*. 2018. Т. 124, Вып. 1. С. 54–57.

14. **Shampine L. F., Reichelt M. W.** The MATLAB ODE Suite // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 1997. Vol. 18. P. 1–22.

15. **MATLAB.** URL: <https://ch.mathworks.com/help/matlab/index.html 01.09.2019>.

16. **Higham N. J.** Accuracy and stability of numerical algorithms. SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2nd ed., 2002. 680 p.

17. **Уоткинс Д.** Основы матричных вычислений. М.: Бинном, 2006. 664 с.

18. **Manichev V., Zhuk D., Feldman E.** The basic set of test problems for ODE system solvers // *ICMSC 2019*. St. Petersburg, Russia. June 21–23 2019 (в печати).

V. B. Manichev¹, Associate Professor, e-mail: manichev@bmstu.ru, **E. F. Mitenkova²**, Head Laboratory, **E. O. Feldman**, Bachelor, **D. Ju. Kozhevnikov¹**, Lead Engineer, **E. V. Solovjeva²**, Researcher, e-mail: sol@ibrae.ac.ru,

¹ Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russian Federation,

² Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 115191, Russian Federation

Reliability and Calculation Accuracy of Nuclide Kinetics Problems

The current requirements in development of new generation reactors initiate the improvement of calculation base, including increasing the accuracy of solving nuclide kinetics problems. It is shown that when solving the stiff high dimensionality ODE systems the influence of rounding errors on the reliability and accuracy of final calculation results should be taken into account. For guaranteed accurate SLAE solution with reasonable calculation costs, an iterative refinement algorithm should be used with the calculation of the right-hand side with increased digit capacity. It's especial actual when using the most full nuclear data base because of objective complexity to obtain analytical solutions and experimental data for most nuclides of irradiated fuel. To obtain a solution with a guaranteed reliability and accuracy for all elements of high dimensionality ODE system, the MZK package implements the one-stage implicit Euler method with the described algorithm for solving LAE systems with double and increased computational accuracy. The results confirm the possibility to use the MZK package to obtain reference values in precision calculations of nuclide kinetics problems.

Keywords: mathematical modelling, ordinary differential equation (ODE), linear algebraic equations (LAE), stiff systems, guaranteed accuracy, nuclide kinetics, rounding error

DOI: 10.17587/it.26.231-238

References

1. **Isotalo A. E., Aarnio P. A.** Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides, *Ann. Nucl. Energy*, 2011, vol.38, pp. 261–268.

2. **Cetnar J.** General Solution of Bateman Equations for Nuclear Transmutations, *Ann. Nucl. Energy*, 2006, vol. 33, pp. 640–645.

3. **Mitenkova E. F., Novikov N. V., Solovjeva E. V.** Biblioteki s rasshirennym predstavleniem vyhoda produktov deleniya v raschetah nuklidnogo sostava topliva v bystrom spektre, *Atomnaya Energiya*, 2014, vol. 117, iss. 6, pp. 341–346.

4. **Mitenkova E. F., Novikov N. V.** Effect of fission yield libraries on the irradiated fuel composition in Monte Carlo depletion calculations, *Proceedings of the 7-th Workshop Nuclear Measurements, Evaluations and Applications (NEMEA-7)*, 5–8 November 2013, Geel, Belgium, OECD 2014, pp. 287–296.

5. **Bell M. J.** Origen: The ORNL Isotope Depletion and Generation Code, ORNL-4628, 1973.

6. **Mitenkova E. F., Solovjeva E. V.** Vychislitel'nye ograniчениya programmy ORIGEN2 v zadachah nuklidnoj kinetiki, Moscow, Publishing house of IBRAE RAN, 2019, 31 p.

7. **Yamamoto A., Tatsumi M., Sugimura N.** Numerical Solution of Stiff Burnup Equation with Short Half Lived Nuclides by the Krylov Subspace Method, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 2007, vol. 44, pp. 147–154.

8. **Pusa M., Leppänen J.** Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations, *Nucl. Sci. Eng.*, 2010, vol. 164, pp. 140–150.

9. **Moler C., C. van Loan.** Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, *SIAM Rev.*, 2003, vol. 45, no. 1. pp. 3–49.

10. **Stankovskiy A., Van den Eynde, Advanced G.** Method for Calculations of Core Burn-Up, Activation of Structural Materials, and Spallation Products Accumulation in Accelerator-Driven Systems, *Sci. Technol. Nucl. Install. Article*, 2012, ID 545103, 12 p.

11. **Manichev V. B., Zhuk D. M.** Bazovyyj nabor testovykh zadach dlya reshatelej sistem ODU, *Tekhnologii Inzhenernykh i Informacionnykh Sistem*, 2016, vol. 2, no. 4, pp. 70–84.

12. **Manichev V. B., Mitenkova E. F., Zhuk D. M., Kozhevnikov D. Yu., Solovjev A. V., Solovjeva E. V.** Ispol'zovanie AL-ustojchivykh metodov resheniya sistem ODU dlya zadach izotopnoj kinetiki reaktornyx sistem, *Informacionnye Tekhnologii*, 2017, vol. 23, no. 3, pp. 177–183.

13. **Mitenkova E. F., Solovjeva E. V., Manichev V. B., Fel'dman E. O.** Zadachi izotopnoj kinetiki na polnom bazise vyhoda produktov deleniya, *Atomnaya Energiya*, 2018, vol. 124, iss. 1, pp. 54–57.

14. **Shampine L. F., Reichelt M. W.** The MATLAB ODE Suite, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1997, vol. 18, pp. 1–22.

15. **MATLAB**, available at: <https://ch.mathworks.com/help/matlab/index.html 01.11.2019>.

16. **Higham Nicholas J.** Accuracy and stability of numerical algorithms, SIAM, 2002, 680 p.

17. **Uotkins D.** Osnovy matrichnykh vychislenij, Moscow, Binom, 2006, 664 p.

18. **Manichev V., Zhuk D., Feldman E.** The basic set of test problems for ODE system solvers, *ICMSC 2019*. St. Petersburg, Russia. June 21–23 2019 (in print).