

УДК 519.6

ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ КРИВЫХ РЕГУЛЯРИЗОВАННЫМ МЕТОДОМ ДВОЙНОГО ПЕРИОДА

© 2016 г. А. А. Белов^{1,2,*}, член-корреспондент РАН Н. Н. Калиткин^{1,**}

Поступило 22.04.2016 г.

В физико-технических приложениях важную роль играет обработка экспериментальных кривых, точки которых измерены со значительными погрешностями. Такие задачи решают методом регуляризации, где успех сильно зависит от интуиции вычислителя. Здесь предложено использовать аппроксимацию методом двойного периода, разработанного для гладких непериодических функций. Для регуляризации использован стабилизатор А. Н. Тихонова с квадратом второй производной. Это дает возможность подавить нефизические осцилляции и хорошо передать форму экспериментальной кривой. Такой подход позволяет единообразно решать широкие классы задач. Метод продемонстрирован на примере аппроксимации сечений ядерных реакций, существенных для управляемого термоядерного синтеза. Получены таблицы, рекомендуемые в качестве справочных данных.

DOI: 10.7868/S0869565216270037

1. Проблема. Нередко важные физические эксперименты проводятся по существу за пределами возможностей экспериментальной техники. Систематические и случайные ошибки оказываются настолько большими, что совокупность экспериментальных точек различных авторов выглядит как облако, размытое вокруг некоторой кривой. Характерным примером может служить рис. 1, где показана зависимость сечения ядерной реакции $D + D \rightarrow p + T$ от энергии в специфических координатах. Данные отдельных авторов различаются до 6 раз. Однако эта реакция является одной из важнейших в проблеме управляемого термоядерного синтеза, так что обрабатывать подобные кривые необходимо.

Обычно физики используют два приема. Во-первых, из физического смысла задачи они подбирают специфические переменные, в которых кривая выглядела бы наиболее простым образом. Во-вторых, они пытаются аппроксимировать эту кривую некоторой аналитической зависимостью, содержащей не слишком много подгоночных параметров. Значения этих параметров определяют методом наименьших квадратов. Успех такого подбора зависит от того, насколько удачно угадан вид аппроксимирующей формулы. Это, скорее, искусство с непредсказуемым результатом. При

этом экстраполяция полученной аппроксимации за пределы экспериментального аргумента крайне ненадежна.

Мы предлагаем вместо подбора аппроксимирующей формулы представлять решение специфическим тригонометрическим рядом — методом двойного периода. Для того чтобы избежать нефизических осцилляций, вызванных большими ошибками экспериментальных точек, в метод дополнительно включается регуляризация стабили-

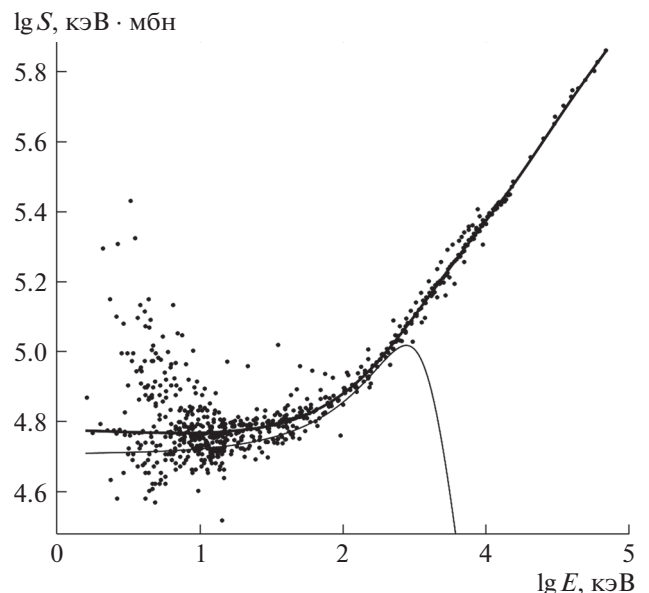


Рис. 1. S-фактор для реакции $D + D \rightarrow p + T$; точки — экспериментальные значения, жирная линия — данные табл. 1, тонкая линия — формула Козлова.

¹ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской Академии наук, Москва

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

* E-mail: belov_25.04.1991@mail.ru

** E-mail: kalitkin@imamod.ru

заторм А.Н. Тихонова. Этот способ несложен и позволяет получить хорошие кривые, допускающие экстраполяцию за границы исходного отрезка.

Метод иллюстрируется на примере четырех важнейших ядерных реакций, необходимых для расчета управляемого термоядерного синтеза.

2. Регуляризация метода двойного периода. Пусть задан большой массив экспериментальных точек: аргументов x_i и функций $u_i \pm \delta_i$, $1 \leq i \leq I$ ($I \gg 1$), где δ_i — абсолютные ошибки измерений. Из смысла задачи известно, что $u(x)$ есть гладкая функция с не слишком большими старшими производными, однако экспериментальные ошибки δ_i могут быть значительными. Для аппроксимации гладких непериодических функций рядами Фурье удобен метод двойного периода [1, 2]. Для простоты записи линейно преобразуем аргумент x так, чтобы

$\min x_i = -\frac{\pi}{2}$, $\max x_i = \frac{\pi}{2}$. Затем возьмем гармоники Фурье для отрезка $\left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= 1, & \varphi_1(x) &= \sin 2x, \\ \varphi_2(x) &= \cos 2x, & \varphi_3(x) &= \sin 4x, \dots \end{aligned} \quad (1)$$

Дополним их гармониками удвоенного периода $[-\pi, \pi]$, не входящими в ряд (1):

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \sin x, & \psi_2(x) &= \cos x, \\ \psi_3(x) &= \sin 3x, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

Аппроксимируем $u(x)$ двумя суммами:

$$u(x) \approx \sum_{n=0}^{2N} a_n \varphi_n(x) + \sum_{m=1}^M b_m \psi_m(x). \quad (3)$$

Коэффициенты a_n и b_m подбирают из условия наилучшей аппроксимации $u(x)$ в норме L_2 . При $N \rightarrow \infty$ и фиксированном M приближение (3) аппроксимирует $u(x)$ и ее q -е производные в норме C с точностью $O(N^{q-M})$.

Заметим, что гармоники основного периода $\varphi_n(x)$ подключаются в расчет всегда парами, так как относятся к одной и той же частоте. Но гармоники удвоенного периода $\psi_n(x)$ подключаются по одной: увеличение M на единицу эквивалентно повышению гладкости $u(x)$ на единицу. При численных расчетах следует брать лишь небольшие значения M , так как увеличение M катастрофически ухудшает обусловленность расчетов [1]. Однако значения N можно брать большими для получения хорошей точности аппроксимации. Разумеется, для полного числа параметров должно выполняться $2N + M + 1 < I$.

Описанный метод был разработан для функций непрерывного аргумента или функций, за-

данных на равномерной сетке, когда значения $u(x)$ вычисляются с высокой точностью. В экспериментах сетка x_i резко неравномерная и может содержать пробелы, а погрешности δ_i нередко велики. При аппроксимации таких данных надо использовать регуляризацию. Естественно взять стабилизатор А.Н. Тихонова [3], содержащий интегралы от квадратов различных производных $u(x)$. Обсудим, какие производные целесообразно использовать.

Очевидно, мы должны с хорошей точностью аппроксимировать $u(x)$ и $u'(x)$. Поэтому включать их в стабилизатор нельзя: это приведет к занижению их величин. Однако большие значения $u''(x)$ могут привести к нефизическим осцилляциям кривой. Так что величину $u''(x)$ целесообразно ограничивать, включая ее в стабилизатор.

Учтем еще два обстоятельства, относящихся к нашей частной задаче аппроксимации сечений для ядерных реакций. Во-первых, важна не абсолютная точность аппроксимации сечений, а относительная, поскольку сечения меняются в очень широких пределах. Во-вторых, специфические переменные при этом выбираются так, чтобы $u(x) \approx \text{const}$ при наименьших x_i . Поэтому в стабилизатор надо добавить значения $(u')^2$ и $(u'')^2$ на левой границе с большими весовыми множителями, чтобы аппроксимирующая кривая выходила на горизонтальную прямую. С учетом этих соображений метод наименьших квадратов приводит к следующей формулировке:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^I \left(\frac{u(x_i) - u_i}{\delta_i} \right)^2 + \alpha \int_{-\pi/2}^{\pi/2} [u'(x)]^2 dx + \\ & + \beta \left[u' \left(-\frac{\pi}{2} \right) \right]^2 + \gamma \left[u'' \left(-\frac{\pi}{2} \right) \right]^2 = \min; \end{aligned} \quad (4)$$

здесь $\alpha, \beta, \gamma > 0$. Подставляя сюда (3) и выполняя минимизацию, получим линейную систему уравнений относительно коэффициентов a_n и b_m . Величины α, β, γ подбирают обычными методами решения некорректных задач. При этом разумное α должно быть небольшим, а β и γ — довольно большими.

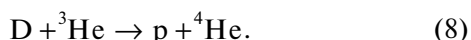
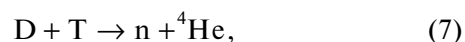
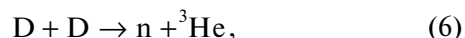
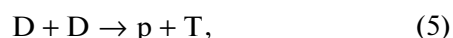
Заметим, что при аппроксимации функций, вычисленных на равномерной сетке с одинаковой точностью, сумма из (3) приводит к диагональной клетке относительно a_n в линейной системе. Это улучшает обусловленность и позволяет взять даже $M \sim 5 \div 6$. Однако при неравномерной сетке x_i и неодинаковых δ_i эта клетка плотно заполнена, и обусловленность существенно ухудшается. Поэтому в расчетах следует ограничиться $M = 3$, что эквивалентно гладкости периодиче-

Таблица 1. S -факторы реакций $\lg S$, кэВ · мбн

$\lg E$, кэВ	$D+D \rightarrow p+T$	$D+D \rightarrow n+{}^3\text{He}$	$D+T \rightarrow n+{}^4\text{He}$	$D+{}^3\text{He} \rightarrow p+{}^4\text{He}$
0.2	4.774	4.773	7.086	6.852
0.4	4.771	4.773	7.086	6.852
0.6	4.769	4.769	7.090	6.852
0.8	4.768	4.768	7.108	6.851
1.0	4.768	4.776	7.137	6.844
1.2	4.773	4.786	7.196	6.836
1.4	4.781	4.803	7.297	6.836
1.6	4.799	4.824	7.414	6.859
1.8	4.830	4.862	7.368	6.940
2.0	4.880	4.919	7.029	7.076
2.2	4.952	5.003	6.590	7.216
2.4	5.048	5.106	6.226	7.161
2.6	5.157	5.215	5.954	6.803
2.8	5.267	5.330	5.754	6.435
3.0	5.373	5.448	5.635	6.156
3.2	5.481	5.557	5.596	5.970
3.4	5.600	5.658	5.627	5.863
3.6	5.721	5.758	5.672	5.810
3.8	5.836	5.856	5.691	5.784

ского продолжения $u''(x)$. Меньшее число M не обеспечивает нужной гладкости.

3. Экспериментальные данные. Рассмотрим четыре важнейшие реакции, используемые в расчетах управляемого термоядерного синтеза:



Основной массив экспериментальных данных по их сечениям приведен в базе [4]. Эта база использует около 90 оригинальных работ и содержит 2000 экспериментальных точек. Данные разных авторов не всегда хорошо согласованы. Авторским оценкам погрешности далеко не всегда можно доверять, а результат аппроксимации достаточно сильно зависит от значения δ_i .

Поэтому мы провели свой критический анализ экспериментов и дали собственные оценки δ_i . В частности, мы приписывали большие погрешности работам, где мишени содержали тяжелые металлы, насыщенные дейтерием. Лучшими мишенями считались либо чисто дейтериевые, либо содержащие соединения дейтерия с наиболее легкими элементами (LiD, CD₂, CD₄, D₂O). Учитывался также международный авторитет лабораторий.

Опишем выбор переменных. В качестве аргумента удобно использовать $x = \lg E$, где E — энергия сталкивающихся частиц в системе центра масс. Однако сечение реакций $\sigma(E)$ или его логарифм неудобен в качестве функции. Гораздо удобнее взять величину, называемую S -фактор. Она получается умножением сечения на фактор Гамова, учитывающий проницаемость кулоновского барьера:

$$S(E) = \sigma(E)E \exp\left\{\pi z_1 z_2 \sqrt{\frac{2m}{E}}\right\}, \quad (9)$$

где m — приведенная масса, z_1 и z_2 — заряды частиц (система единиц атомная). За функцию берется $u = \lg S$. Эта величина изменяется всего на две-три единицы.

4. Результаты расчетов. На подборе регуляризирующих коэффициентов α , β , γ не будем останавливаться. Во всех расчетах использовалось $M = 3$. Значения N выбирались: 123 для реакций (5) и (6), 73 для реакции (7) и 98 для реакции (8). При этом число свободных параметров было от 1.5 до 3 раз меньше, чем число экспериментальных точек для соответствующей реакции. Таким образом, для аппроксимации использовались весьма высокие гармоники, что обеспечивало хорошую точность.

Приведем окончательные результаты. В табл. 1 представлена зависимость $\lg S$ [кэВ · мбн] от

Таблица 2. Скорости реакций $\lg K(T)$, $\text{см}^3/\text{с}$

$\lg T$, кэВ	$D+D \rightarrow p+T$	$D+D \rightarrow n+{}^3\text{He}$	$D+T \rightarrow n+{}^4\text{He}$	$D+{}^3\text{He} \rightarrow p+{}^4\text{He}$
-2.0	-50.402	-50.402	-50.492	-74.292
-1.8	-45.139	-45.140	-44.891	-65.324
-1.6	-40.645	-40.645	-40.107	-57.651
-1.4	-36.808	-36.809	-36.022	-51.089
-1.2	-33.537	-33.538	-32.537	-45.479
-1.0	-30.750	-30.750	-29.567	-40.687
-0.8	-28.379	-28.379	-27.039	-36.596
-0.6	-26.366	-26.365	-24.888	-33.105
-0.4	-24.657	-24.657	-23.058	-30.131
-0.2	-23.211	-23.210	-21.501	-27.602
0.0	-21.988	-21.985	-20.177	-25.454
0.2	-20.957	-20.950	-19.047	-23.630
0.4	-20.089	-20.077	-18.077	-22.081
0.6	-19.360	-19.344	-17.240	-20.762
0.8	-18.749	-18.729	-16.525	-19.629
1.0	-18.237	-18.213	-15.947	-18.644
1.2	-17.807	-17.779	-15.523	-17.784
1.4	-17.444	-17.410	-15.249	-17.050
1.6	-17.134	-17.093	-15.103	-16.462
1.8	-16.867	-16.820	-15.057	-16.036
2.0	-16.635	-16.582	-15.082	-15.762
2.2	-16.435	-16.377	-15.156	-15.613
2.4	-16.263	-16.201	-15.261	-15.556
2.6	-16.118	-16.052	-15.378	-15.561
2.8	-15.995	-15.928	-15.492	-15.603
3.0	-15.888	-15.826	-15.589	-15.662
3.2	-15.796	-15.744	-15.663	-15.724
3.4	-15.717	-15.678	-15.717	-15.781

$\lg E$ [кэВ] для всех четырех реакций. В сторону меньших энергий каждая колонка продолжается как константа. Из рис. 1 для реакции (5) видно, что аппроксимирующая кривая имеет естественный вид и не содержит нефизичных осцилляций несмотря на использование высоких гармоник. То же справедливо для остальных реакций. Отметим, что для реакции (8) в диапазоне $3 \leq \lg E \leq 3.2$ отсутствовали экспериментальные данные. Аппроксимирующая кривая хорошо, без осцилляций прошла этот участок. Это свидетельствует о хорошем качестве предложенной регуляризации.

В практических расчетах термоядерных мишеней нередко используются известные формулы Б.Н. Козлова [5]. На рис. 1 эта формула также приведена. Видно, что при $\lg E \leq 2.45$ она хорошо согласуется с экспериментами и нашей кривой, но при больших энергиях быстро теряет точность.

5. Скорости термоядерных реакций и й. Пусть в веществе имеется локальное термодинамическое равновесие с температурой T . Тогда скорость термоядерной реакции определяется сверткой $\sigma(E)\sqrt{\frac{2E}{m}}$ с максвелловским распределением

$$K(T) = \frac{\pi}{\sqrt{m}} \left(\frac{2}{\pi T} \right)^{3/2} \int_0^\infty \sigma(E) E \exp\left\{-\frac{E}{T}\right\} dE. \quad (10)$$

Интеграл брался численно по квадратурам высокой точности с подстановкой фурье-аппроксимации (3).

Результаты расчетов представлены в табл. 2. В ней дана зависимость $\lg K(T)$ [$\text{см}^3/\text{с}$] от $\lg T$ [кэВ]. В [5] также содержались аппроксимации для $K(T)$. Отклонение R этих величин от наших дан-

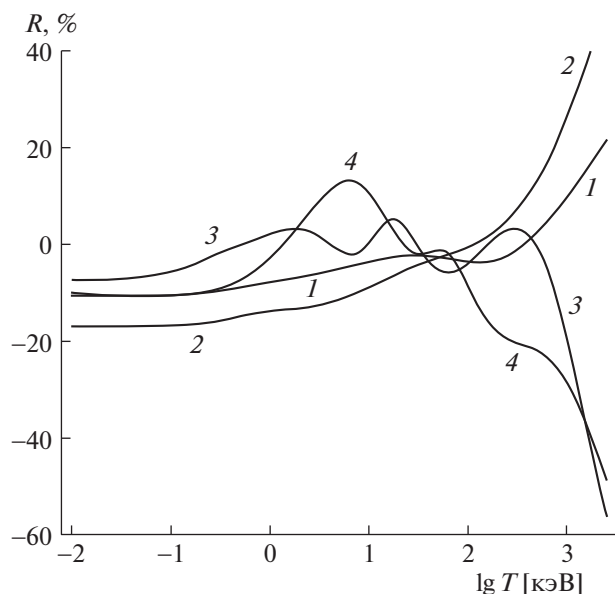


Рис. 2. Отношение формул Козлова для $K(T)$ к данным табл. 2; 1 – $D + D \rightarrow p + T$, 2 – $D + D \rightarrow n + {}^3\text{He}$, 3 – $D + T \rightarrow n + {}^4\text{He}$, 4 – $D + {}^3\text{He} \rightarrow p + {}^4\text{He}$.

ных в процентах приведено на рис. 2. Видно, что при малых температурах для реакций (5) и (8) оно

не превышает 11%, для (7) составляет всего 5–7%, а для (6) доходит до 20%. Разумеется, при $T > 100$ кэВ формулы Козлова быстро теряют точность.

Таким образом, полученные данные позволяют повысить точность расчетов термоядерных мишеней, в которых нужны в первую очередь невысокие температуры. Поэтому табл. 1 и табл. 2 рекомендуется использовать в качестве справочных данных.

Работа поддержана грантом РФФИ 16–11–10001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Аппроксимация и экстраполяция табулированных функций // ДАН. 2000. Т. 374. № 4. С. 464–468.
2. *Калиткин Н.Н., Луцкий К.И.* Оптимальные параметры метода двойного периода // Мат. моделирование. 2007. Т. 19. № 1. С. 57–68.
3. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 285 с.
4. NEA Data Bank – Nuclear Data Services. <http://www.oecd-nea.org/janisweb/search/exfor>
5. *Козлов Б.Н.* Скорости термоядерных реакций // Атомная энергия. 1962. Т. 12. № 3. С. 238–240.