

УДК 519.657

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ МЕТОДА ДВОЙНОГО ПЕРИОДА ПРИ ОБРАБОТКЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ¹⁾

© 2017 г. А. А. Белов^{1,2}, Н. Н. Калиткин²

¹⁾ 119991 Москва, Ленинские горы, 1, МГУ;

²⁾ 125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМ РАН)

e-mail: belov_25.04.1991@mail.ru, kalitkin@imamod.ru

Поступила в редакцию 08.07.2016 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, разработанным для гладких непериодических функций. Для регуляризации использован стабилизатор А.Н. Тихонова с квадратом второй производной. Это дает возможность подавить нефизичные 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. На основе этих аппроксимаций вычислены скорости реакций. Для них построены аппроксимации, удобные в газодинамических программах. По диапазону температур и точности они превосходят известные формулы. Библ. 6. Фиг. 4. Табл. 4.

Ключевые слова: обработка экспериментальных данных, скорости ядерных реакций, метод двойного периода, регуляризация.

DOI: 10.7868/S0044466917110035

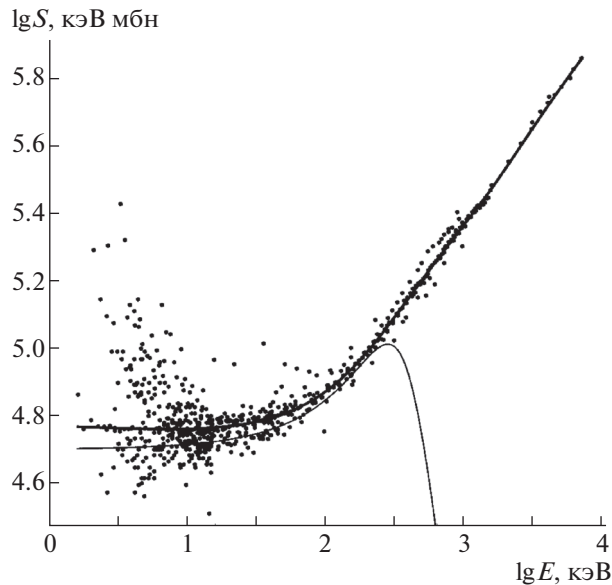
1. ПРОБЛЕМА

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 фиг. 1, где показана зависимость сечения ядерной реакции $D + D \rightarrow p + T$ от энергии в специфических координатах. Данные отдельных авторов различаются, порой в 6 раз! Однако эта реакция является одной из важнейших в проблеме управляемого термоядерного синтеза, так что обрабатывать подобные кривые необходимо.

Обычно физики используют 2 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.

Если число подгоночных параметров много меньше числа экспериментальных точек, и при этом достигнута приемлемая точность аппроксимации, то вид аппроксимирующей формулы можно считать удачным. Особенно ценны формулы, воспроизводящие априорно известные физические закономерности. Для них можно надеяться на аппроксимацию небольшим числом параметров. Однако такие формулы нечасто удается предложить. Если же для аппроксимации требуется число параметров, сравнимое с числом экспериментальных точек, то вид формулы неудачен, а сама аппроксимация вряд ли будет надежной. При этом экстраполяция полученной

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 16-11-10001).



Фиг. 1. S-фактор для реакции $D + D \rightarrow p + T$; точки – экспериментальные значения, жирная линия – табл. 2, тонкая линия – формула Козлова.

аппроксимации за пределы экспериментального аргумента может привести к большим ошибкам.

Мы предлагаем в [1] 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 стабилизатором А.Н. Тихонова, содержащим только квадрат второй поизводной. Этот способ несложен и позволяет получить хорошие кривые, допускающие экстраполяцию за границы исходного отрезка. Такой подход может служить надежным инструментом в тех случаях, когда не удастся построить хорошую физически осмысленную аппроксимирующую формулу.

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

2. РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ МЕТОДА ДВОЙНОГО ПЕРИОДА

2.1. Метод двойного периода

Кратко напомним суть этого метода. 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 (см. [2], [3]). Для простоты записи линейно преобразуем аргумент x так, чтобы $\min x_i = -\pi/2$, $\max x_i = \pi/2$. Затем возьмем следующие гармоники Фурье для отрезка $[-\pi/2, \pi/2]$: нулевую гармонику и N пар синус–косинус. Дополним их M гармониками удвоенного периода $[-\pi, \pi]$, не являющимися гармониками основного периода. Эти гармоники подключаются в расчет не парами синус–косинус, а поодиночке, так что их число M может быть любой четности.

Аппроксимируем $u(x)$ суммой гармоник основного и двойного периода. Для единообразия выберем следующую форму записи:

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

Коэффициенты a_n подбирают из условия наилучшей аппроксимации $u(x)$ в норме L_2 .

Здесь гармоники основного периода имеют индекс $0 \leq n \leq 2N$ и записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \cos 2mx, & \varphi'_n(x) &= -2m\varphi_{n-1}(x), & \varphi''_n(x) &= -4m^2\varphi_n(x), & \text{если } n &= 2m; \\ \varphi_n(x) &= \sin 2mx, & \varphi'_n(x) &= 2m\varphi_{n+1}(x), & \varphi''_n(x) &= -4m^2\varphi_n(x), & \text{если } n &= 2m-1. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) приведены производные этих гармоник, которые потребуются нам в дальнейшем. Гармоники двойного периода имеют индекс $2N+1 \leq n \leq 2N+M$, т.е. записываются после гармоник основного периода. Они выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \cos(2m-1)x, & \varphi'_n(x) &= -(2m-1)\varphi_{n-1}(x), \\ \varphi''_n(x) &= -(2m-1)^2\varphi_n(x), & \text{если } n &= 2N+2m; \\ \varphi_n(x) &= \sin(2m-1)x, & \varphi'_n(x) &= (2m-1)\varphi_{n+1}(x), \\ \varphi''_n(x) &= -(2m-1)^2\varphi_n(x), & \text{если } n &= 2N+2m-1. \end{aligned} \quad (3)$$

Формально уже гармоник основного периода достаточно для аппроксимации при $N \rightarrow \infty$. Поэтому присутствие членов с $n > 2N$ является в этом случае избыточным. При конечном N сумма (1) избыточной не является. В [2] показано, что подключение в расчет гармоник двойного периода эквивалентно повышению гладкости периодического продолжения $u(x)$ на период $[-\pi, \pi]$. Каждая лишняя гармоника двойного периода повышает гладкость на единицу.

Чем больше M , тем быстрее сходятся разложения по гармоникам основного периода. При $N \rightarrow \infty$ и фиксированном M приближение (1) аппроксимирует $u(x)$ и ее q -е производные в норме C с точностью $O(N^{q-M})$. При численных расчетах следует брать лишь небольшие значения M , так как увеличение M катастрофически ухудшает обусловленность расчетов. Однако значения N можно брать большими для получения хорошей точности аппроксимации. Разумеется, для полного числа параметров должно выполняться условие $2N+M+1 < I$.

2.2. Выбор регуляризатора

Описанный метод был разработан для функций непрерывного аргумента или заданных 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. Под пробелами мы понимаем участки аргумента значительной длины, на которых отсутствуют экспериментальные точки. При аппроксимации таких данных надо использовать регуляризацию. Естественно взять стабилизатор А.Н. Тихонова (см. [4]), 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 и, соответственно, ухудшению аппроксимации. Однако, если не говорить о радиотехнических задачах, физические кривые обычно являются достаточно плавными и не содержат высокочастотных осцилляций, так что их кривизна невелика. Поэтому величину $u''(x)$ целесообразно ограничивать, включая ее в стабилизатор. Этого обычно достаточно для хорошего подавления нефизических осцилляций, так что нет необходимости включать в стабилизатор более высокие производные.

Включение второй производной имеет еще одно практическое преимущество: при двукратном дифференцировании синус переходит в синус, а косинус — в косинус. Это упрощает алгоритм.

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 мно-

жителями, чтобы аппроксимирующая кривая выходила на горизонтальную прямую. С учетом этих соображений метод наименьших квадратов приводит к следующей формулировке:

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

где $\alpha, \beta, \gamma > 0$. Подставляя сюда (1), получаем задачу на минимум для коэффициентов a_n .

Интеграл в (4) целесообразно брать в смысле функций непрерывного аргумента, не увязывая его с дискретной сеткой x_i . При его вычислении надо учитывать, что каждая из подсистем (2) и (3) сама по себе ортогональна. Однако эти подсистемы не ортогональны друг другу, хотя синусы одной подсистемы ортогональны косинусам другой.

Замечание 1. Традиционный подход к регуляризации заключается в том, что задача на минимум (4) сводится к решению дифференциального уравнения для $u(x)$. Порядок этого уравнения вдвое выше, чем порядок максимальной производной, входящей в регуляризатор. Такое уравнение требует соответствующего числа дополнительных условий, равного порядку дифференциального уравнения. Формальная постановка таких краевых условий обычно приводит к заметному отличию регуляризованного решения от истинного вблизи границ интервала.

Вдобавок решение краевой задачи для дифференциального уравнения высокого порядка само по себе представляет определенную математическую трудность. Поэтому на практике регуляризаторы высокого порядка используют нечасто.

Метод двойного периода естественно преодолевает эту трудность. В нем легко использовать регуляризатор высокого порядка, не содержащий низших производных. При этом гораздо проще получить близость регуляризованного решения к точному, а алгоритм решения не усложняется.

Замечание 2. Интегральный стабилизатор А.Н. Тихонова обеспечивает хорошее поведение всей регуляризованной кривой в целом. Поэтому его целесообразно применять для широкого класса прикладных задач. Однако дополнительные члены, связанные с граничными условиями, передают специфику именно такой прикладной задачи обработки данных термоядерного эксперимента. Для многих других задач они не нужны. Тогда можно пользоваться всеми приведенными ниже формулами, положив $\beta = \gamma = 0$.

2.3. Линейная система

Выполним минимизацию (4) по a_n . Это приведет к системе линейных уравнений для определения этих коэффициентов. Для ее записи введем некоторые вспомогательные обозначения. Введем следующие скалярные произведения, связанные с экспериментальным материалом:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n, \varphi_k \rangle &= \langle \varphi_k, \varphi_n \rangle = \sum_{i=1}^I \frac{\varphi_n(x_i) \varphi_k(x_i)}{\delta_i^2}, \quad 0 \leq n, \quad k \leq 2N + M; \\ \langle \varphi_n, u \rangle &= \sum_{i=1}^I \frac{\varphi_n(x_i) u_i}{\delta_i^2}, \quad 0 \leq n \leq 2N + M. \end{aligned} \quad (5)$$

При произвольных узлах и весах (что соответствует реальному экспериментальному материалу) все эти матричные элементы отличны от нуля, т.е. матрица линейной системы будет плотно заполненной.

Введем также скалярные произведения базисных функций, связанные с регуляризатором. Матрица этих скалярных произведений имеет блочный характер. Она содержит две квадратные диагональные клетки

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \pi, \quad (\varphi_n, \varphi_k) = \frac{\pi}{2} \delta_{n,k} \quad \text{при} \quad 0 < n, \quad k \leq 2N, \quad \text{или} \quad 2N + 1 \leq n, \quad k \leq 2N + M. \quad (6)$$

В нее также входят две прямоугольные недиагональные клетки, в которых элементы, соответствующие скалярным произведениям синуса одной подсистемы на косинус другой, равны нулю.

Эти нулевые элементы расположены в шахматном порядке. Поэтому для $n \leq 2N$, $k \geq 2N + 1$ можно записать

$$(\varphi_n, \varphi_k) = \begin{cases} 0, & n+k \text{ нечетное;} \\ \frac{(-1)^{(m-n)/2}}{n-m+1} - \frac{(-1)^{(m+n)/2}}{n+m+1}, & m = k - 2N, \quad n \text{ и } k \text{ нечетные;} \\ \frac{(-1)^{(m-n)/2}}{n-m+1} - \frac{(-1)^{(m+n)/2}}{n+m-1}, & m = k - 2N, \quad n \text{ и } k \text{ четные.} \end{cases} \quad (7)$$

Вторая недиагональная клетка $k \leq 2N$, $n \geq 2N + 1$ симметрична данной. Кроме этого введем обозначения для частот гармоник

$$\begin{aligned} \omega_n &= n + \frac{1 - (-1)^n}{2} = 2 \left[\frac{n+1}{2} \right], \quad 0 \leq n \leq 2N; \\ \omega_n &= m - \frac{1 + (-1)^m}{2} = 2 \left[\frac{m+1}{2} \right], \quad m = n - 2N, \quad 2N + 1 \leq n \leq 2N + M. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь квадратная скобка обозначает целую часть числа.

В этих обозначениях линейная система принимает следующий вид:

$$\sum_{k=0}^{2N+M} A_{nk} a_k = \langle u, \varphi_n \rangle, \quad 0 \leq n \leq 2N + M, \quad (9)$$

где

$$A_{n,k} = \langle \varphi_n, \varphi_k \rangle + \alpha \omega_n^2 \omega_k^2 (\varphi_n, \varphi_k) + \beta \omega_n \omega_k B_{nk} + \gamma \omega_n^2 \omega_k^2 C_{n,k}; \quad (10)$$

$$B_{nk} = \begin{cases} -(-1)^{(n+k)/2}, & n \text{ и } k \text{ нечетные и } 0 \leq n, \quad k \leq 2N, \\ (-1)^{(n+k)/2}, & n \text{ и } k \text{ четные и } 2N + 1 \leq n, \quad k \leq 2N + M, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях;} \end{cases} \quad (11)$$

$$C_{nk} = \begin{cases} (-1)^{(n+k)/2}, & n \text{ и } k \text{ четные и } 0 \leq n, \quad k \leq 2N, \\ -(-1)^{(n+k)/2}, & n \text{ и } k \text{ нечетные и } 2N + 1 \leq n, \quad k \leq 2N + M, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases} \quad (12)$$

2.4. Решение линейной системы

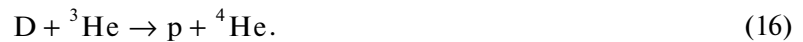
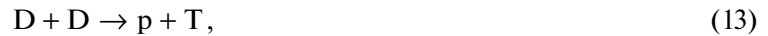
При аппроксимации функций, заданных на равномерной сетке с одинаковой точностью, скалярные произведения $\langle \varphi_n, \varphi_k \rangle$ имеют структуру, напоминающую структуру матрицы (φ_n, φ_k) . Она также содержит две диагональные клетки и две недиагональных. При этом диагональные клетки сами оказываются диагональными подматрицами. Это улучшает обусловленность и позволяет взять даже $M \sim 5-6$. Однако при неравномерной сетке x_i и неодинаковых δ_i диагональные клетки плотно заполнены и обусловленность существенно ухудшается. В этом случае в расчетах следует ограничиться $M = 3$, что эквивалентно гладкости периодического продолжения $u''(x)$. Меньшее число M не обеспечивает нужной гладкости.

По свойствам метода наименьших квадратов матрица A является симметричной и положительно определенной. Ее целесообразно решать методом Гаусса. При этом выбирать главный элемент не следует, так как он автоматически оказывается на главной диагонали. Такой алгоритм обеспечивает хорошую надежность даже для матриц A с довольно большим числом обусловленности κ (до $\kappa \sim 10^8$ при 64-битовых вычислениях).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

3.1. Измерения

Рассмотрим 4 важнейшие реакции, используемые в расчетах управляемого термоядерного синтеза:



Основной массив экспериментальных данных по их сечениям приведен в базе [5]. Эта база использует около 90 оригинальных работ и содержит 2000 экспериментальных точек. Данные разных авторов не всегда хорошо согласованы, иногда они отличаются в 6 раз! 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. В тяжелых металлах налетающий пучок теряет много энергии, а аккуратно оценить фактическую энергию в момент столкновения частиц становится невозможно. Лучшими мишенями считались либо чисто дейтериевые, либо содержащие соединения дейтерия с наиболее легкими элементами (LiD , CD_2 , CD_4 , D_2O). Учитывались также международный авторитет лабораторий и год выполнения работы (например, данные Лос-Аламоса даже 1950-х гг. заслуживают большего доверия, чем новейшие измерения некоторых европейских лабораторий). Подробный разбор каждой работы мы здесь не приводим, так как это представляет интерес только для физиков, специализирующихся в данной области.

3.2. Переменные

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-фактором. Она получается умножением сечения на фактор Гамова, учитывающий проникаемость кулоновского барьера,

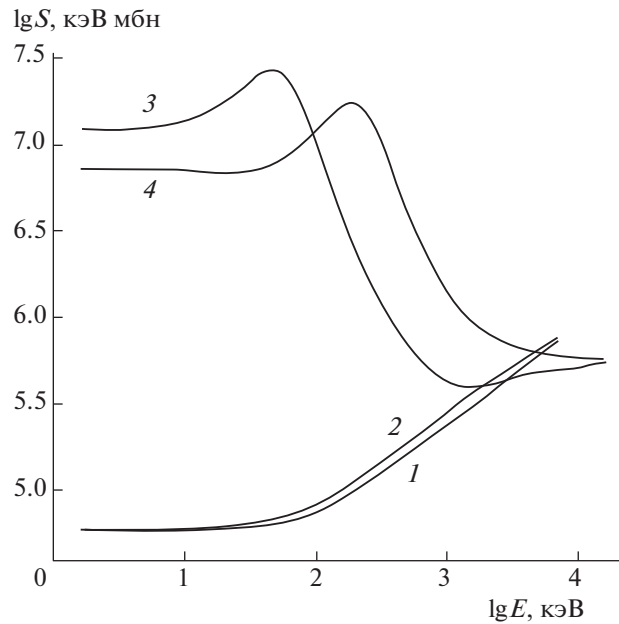
$$S(E) = \sigma(E)E \exp\left\{\pi z_1 z_2 \sqrt{\frac{2m}{E}}\right\}, \quad (17)$$

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 1.5–2 единицы.

Окончательные значения S-факторов после обработки приведены на фиг. 2. Видно, что для обоих каналов реакции $D + D$ они близки и выглядят как переход с горизонтальной прямой на наклонную, но для остальных двух реакций они имеют вид кривой с максимумом. Такие отличия связаны с существенно разными физическими механизмами реакций. При традиционном физическом подходе для каждой реакции нужно подбирать свой вид аппроксимирующей формулы, что достаточно трудно. А метод двойного периода позволяет единообразно обработать все эти реакции.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Во всех расчетах использовалось $M = 3$. Значения N и параметров регуляризации выбирались для каждой реакции отдельно с учетом количества экспериментальных точек и их погрешностей. Подбор параметров регуляризации делался стандартным образом так, чтобы отличие регуляризованной кривой от экспериментов лежало в пределах экспериментальных ошибок, а сама кривая не содержала бы визуально заметных осцилляций. Параметры, подобранные для различных реакций, и погрешности аппроксимации Δ в процентах приведены в табл. 1.



Фиг. 2. S-факторы из 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 – $D+{}^3\text{He} \rightarrow p+{}^4\text{He}$.

Видно, что общее число свободных параметров от 1.5 до 3 раз меньше, чем I для соответствующей реакции. Таким образом, для аппроксимации использовались весьма высокие гармоники, что обеспечивало хорошую точность. Одновременно регуляризация хорошо сглаживала высокие гармоники, так что аппроксимирующие кривые получались плавными. Такое большое число гармоник взято с некоторым избытком. Хорошая точность получается уже при $N \sim 20$ и даже при $N \sim 10$. Поэтому большое значение N в табл. 1 является перестраховкой, а объем вычислений ничтожен даже при таких значениях. Все расчеты легко выполняются даже на 64-битовом ноутбуке.

К выбору параметра α результаты оказывались достаточно чувствительными; оптимальное значение этого параметра невелико. Параметры β и γ по смыслу задачи должны быть достаточно большими, что и подтверждается в расчетах. Но чувствительность к их выбору была гораздо меньшей.

Приведем окончательные результаты. В табл. 2 и на фиг. 2 представлена зависимость $\lg S$ [кэВ · мбн] от $\lg E$ [кэВ] для всех 4 реакций. В сторону меньших энергий каждая колонка табл. 2 продолжается как константа. Из фиг. 2 хорошо видно, что аппроксимирующая кривая для каждой реакции имеет естественный вид и не содержит нефизичных осцилляций, несмотря на использование высоких гармоник. Отметим, что для реакции (16) в диапазоне $3 \leq \lg E \leq 3.2$ отсутствовали экспериментальные данные. Аппроксимирующая кривая хорошо, без осцилляций,

Таблица 1. Параметры регуляризации в задаче (4) для реакций (13)–(16)

Параметры	$DD \rightarrow pT$	$DD \rightarrow n{}^3\text{He}$	$DT \rightarrow n{}^4\text{He}$	$D{}^3\text{He} \rightarrow p{}^4\text{He}$
I	717	364	370	544
N	123	123	73	98
α	0.2	0.3	0.04	0.2
β	2000	2000	2000	2000
γ	2000	2000	2000	2000
$\Delta, \%$	1.5	1.5	2	4

Таблица 2. S-факторы реакций $\lg S$, кэВ · мбн

$\lg E$, кэВ	DD \rightarrow \rightarrow pT	DD \rightarrow \rightarrow n ³ He	DT \rightarrow \rightarrow n ⁴ He	D ³ He \rightarrow \rightarrow p ⁴ He	$\lg E$, кэВ	DD \rightarrow \rightarrow pT	DD \rightarrow \rightarrow n ³ He	DT \rightarrow \rightarrow n ⁴ He	D ³ He \rightarrow \rightarrow p ⁴ He
0.2	4.774	4.773	7.086	6.852	2.3	4.998	5.053	6.395	7.231
0.3	4.773	4.773	7.086	6.852	2.4	5.048	5.106	6.226	7.161
0.4	4.771	4.773	7.086	6.852	2.5	5.102	5.160	6.082	7.004
0.5	4.770	4.772	7.086	6.852	2.6	5.157	5.215	5.954	6.803
0.6	4.769	4.769	7.090	6.852	2.7	5.212	5.272	5.844	6.610
0.7	4.768	4.767	7.098	6.852	2.8	5.267	5.330	5.754	6.435
0.8	4.768	4.768	7.108	6.851	2.9	5.321	5.389	5.684	6.283
0.9	4.767	4.772	7.120	6.848	3.0	5.373	5.448	5.635	6.156
1.0	4.768	4.776	7.137	6.844	3.1	5.426	5.504	5.605	6.052
1.1	4.770	4.781	7.161	6.840	3.2	5.481	5.557	5.596	5.970
1.2	4.773	4.786	7.196	6.836	3.3	5.540	5.607	5.605	5.908
1.3	4.776	4.794	7.241	6.835	3.4	5.600	5.658	5.627	5.863
1.4	4.781	4.803	7.297	6.836	3.5	5.661	5.708	5.652	5.832
1.5	4.789	4.812	7.360	6.842	3.6	5.721	5.758	5.672	5.810
1.6	4.799	4.824	7.414	6.859	3.7	5.779	5.808	5.684	5.795
1.7	4.813	4.841	7.428	6.892	3.8	5.836	5.856	5.691	5.784
1.8	4.830	4.862	7.368	6.940	3.9	5.896	5.906	5.698	5.776
1.9	4.853	4.887	7.227	7.003	4.0	5.958	5.955	5.707	5.770
2.0	4.880	4.919	7.029	7.076	4.1	6.020	6.005	5.720	5.765
2.1	4.913	4.958	6.807	7.153	4.2	6.082	6.054	5.735	5.760
2.2	4.952	5.003	6.590	7.216					

прошла этот участок. Это свидетельствует о хорошем качестве предложенной регуляризации. Видно, что данный метод позволяет надежно проводить кривую через “пробелы” экспериментальных данных.

В практических расчетах термоядерных мишеней нередко используются известные формулы Б.Н. Козлова из [6]. Для реакции (13) эта формула приведена на фиг. 1. Видно, что при $\lg E \leq 2.45$ она хорошо согласуется с экспериментами и нашей кривой, но при больших энергиях быстро теряет точность. Для остальных реакций картина аналогичная. Поэтому данные табл. 2 можно использовать как справочные. Они точнее предлагавшихся ранее (особенно велик выигрыш в точности при высоких энергиях).

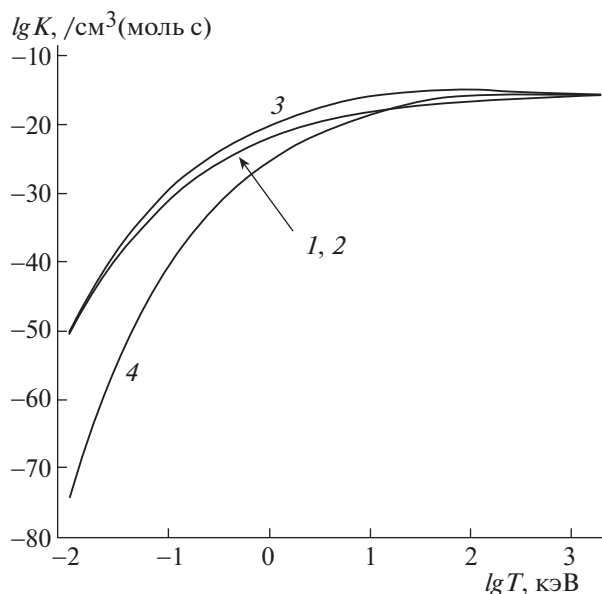
5. СКОРОСТИ ТЕРМОЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

5.1. Таблицы скоростей

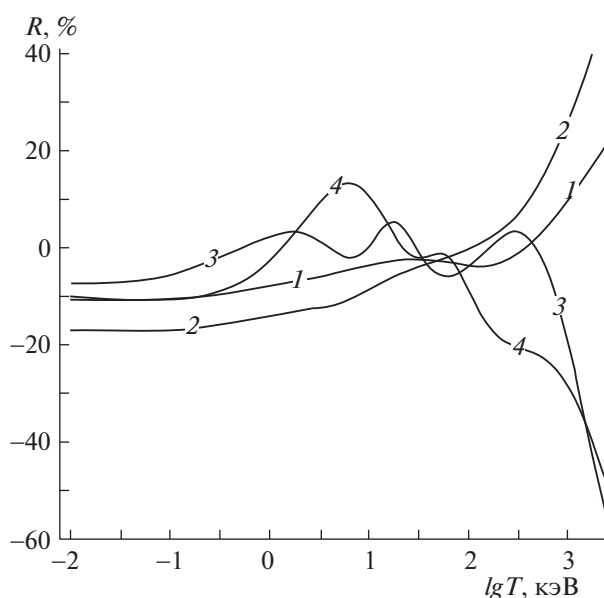
Пусть в веществе имеется локальное термодинамическое равновесие с температурой T . Тогда скорость термоядерной реакции определяется сверткой $\sigma(E)\sqrt{2E/m}$ с максвелловским распределением

$$K(T) = \frac{\pi}{\sqrt{m}} \left(\frac{2}{\pi T} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \sigma(E) E \exp\left\{-\frac{E}{T}\right\} dE. \quad (18)$$

Интеграл брался численно по квадратурам высокой точности с подстановкой фурье-аппроксимации (1).



Фиг. 3. Скорости реакций из табл. 3, 1 – $D + D \rightarrow p + T$, 2 – $D + D \rightarrow n + {}^3\text{He}$, 3 – $D + T \rightarrow n + {}^4\text{He}$, 4 – $D + {}^3\text{He} \rightarrow p + {}^4\text{He}$.



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

Результаты расчетов представлены на фиг. 3 и в табл. 3. В них дана зависимость $\lg K(T)$ [$\text{cm}^3/(\text{mole} \cdot \text{s})$] от $\lg T$ [кэВ]. В [6] также содержались аппроксимации для $K(T)$. Отклонение R этих величин от наших данных в процентах приведено на фиг. 4. Видно, что при малых температурах для реакций (13) и (16) оно не превышает 11%, для (15) составляет всего 5–7%, а для (14) доходит до 20%. Такое уточнение существенно для физических приложений. Разумеется, при $T > 100$ кэВ формулы Козлова быстро теряют точность.

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

$\lg T$, кэВ	DD \rightarrow $\rightarrow pT$	DD \rightarrow $\rightarrow n^3\text{He}$	DT \rightarrow $\rightarrow n^4\text{He}$	D ³ He \rightarrow $\rightarrow p^4\text{He}$	$\lg T$, кэВ	DD \rightarrow $\rightarrow pT$	DD \rightarrow $\rightarrow n^3\text{He}$	DT \rightarrow $\rightarrow n^4\text{He}$	D ³ He \rightarrow $\rightarrow p^4\text{He}$
-2.0	-50.402	-50.402	-50.492	-74.292	0.8	-18.749	-18.729	-16.525	-19.629
-1.9	-47.667	-47.668	-47.582	-69.633	0.9	-18.482	-18.460	-16.217	-19.120
-1.8	-45.139	-45.140	-44.891	-65.324	1.0	-18.237	-18.213	-15.947	-18.644
-1.7	-42.803	-42.804	-42.405	-61.338	1.1	-18.013	-17.987	-15.716	-18.199
-1.6	-40.645	-40.645	-40.107	-57.651	1.2	-17.807	-17.779	-15.523	-17.784
-1.5	-38.650	-38.651	-37.984	-54.241	1.3	-17.618	-17.587	-15.369	-17.401
-1.4	-36.808	-36.809	-36.022	-51.089	1.4	-17.444	-17.410	-15.249	-17.050
-1.3	-35.107	-35.108	-34.210	-48.174	1.5	-17.283	-17.246	-15.162	-16.736
-1.2	-33.537	-33.538	-32.537	-45.479	1.6	-17.134	-17.093	-15.103	-16.462
-1.1	-32.087	-32.088	-30.993	-42.989	1.7	-16.996	-16.952	-15.069	-16.228
-1.0	-30.750	-30.750	-29.567	-40.687	1.8	-16.867	-16.820	-15.057	-16.036
-0.9	-29.517	-29.517	-28.252	-38.560	1.9	-16.747	-16.697	-15.062	-15.881
-0.8	-28.379	-28.379	-27.039	-36.596	2.0	-16.635	-16.582	-15.082	-15.762
-0.7	-27.331	-27.330	-25.920	-34.781	2.1	-16.531	-16.476	-15.114	-15.674
-0.6	-26.366	-26.365	-24.888	-33.105	2.2	-16.435	-16.377	-15.156	-15.613
-0.5	-25.476	-25.475	-23.936	-31.559	2.3	-16.345	-16.286	-15.206	-15.575
-0.4	-24.657	-24.657	-23.058	-30.131	2.4	-16.263	-16.201	-15.261	-15.556
-0.3	-23.904	-23.903	-22.248	-28.815	2.5	-16.188	-16.124	-15.318	-15.552
-0.2	-23.211	-23.210	-21.501	-27.602	2.6	-16.118	-16.052	-15.378	-15.561
-0.1	-22.573	-22.572	-20.812	-26.484	2.7	-16.054	-15.987	-15.436	-15.579
0.0	-21.988	-21.985	-20.177	-25.454	2.8	-15.995	-15.928	-15.492	-15.603
0.1	-21.450	-21.445	-19.590	-24.505	2.9	-15.940	-15.875	-15.543	-15.632
0.2	-20.957	-20.950	-19.047	-23.630	3.0	-15.888	-15.826	-15.589	-15.662
0.3	-20.504	-20.495	-18.544	-22.824	3.1	-15.841	-15.783	-15.629	-15.694
0.4	-20.089	-20.077	-18.077	-22.081	3.2	-15.796	-15.744	-15.663	-15.724
0.5	-19.708	-19.695	-17.643	-21.396	3.3	-15.755	-15.709	-15.692	-15.754
0.6	-19.360	-19.344	-17.240	-20.762	3.4	-15.716	-15.677	-15.717	-15.781
0.7	-19.041	-19.023	-16.866	-20.175					

Таким образом, полученные данные позволяют повысить точность расчетов термоядерных мишеней, в которых нужны в первую очередь невысокие температуры. Поэтому табл. 3 также рекомендуется использовать в качестве справочных данных. Поскольку квадратуру (18) мы вычисляли с высокой точностью, то погрешность этих данных определяется погрешностью исходных сечений из табл. 2. Мы ориентировочно оцениваем ее как $\pm 0.007-0.008$ для обоих каналов реакции $D + D$ (что соответствует 1.5%), ± 0.01 для реакции $D + T$ (т.е. 2%) и ± 0.017 для реакции $D + ^3\text{He}$ (т.е. 4%).

5.2. Газодинамические приложения

Таблицы скоростей реакций неудобно использовать в газодинамических кодах. Желательно заменить их аппроксимирующими формулами с небольшим числом параметров. Мы построили такие формулы также методом двойного периода, но уже без регуляризации, поскольку теперь

Таблица 4. Коэффициенты аппроксимации $\lg K(T)$ рядом Фурье

	DD \rightarrow pT	DD \rightarrow n ³ He	DT \rightarrow n ⁴ He	D ³ He \rightarrow p ⁴ He
ξ_0	-41.898	-42.145	-42.559	-60.504
ξ_1	30.017	30.484	33.312	53.039
η_1	24.313	24.459	24.394	43.244
ξ_2	-9.150	-9.451	-9.876	-16.233
η_2	-16.995	-17.170	-16.909	-31.497
ξ_3	2.140	2.265	2.501	3.980
η_3	7.572	7.744	7.406	15.707
ξ_4	-0.316	-0.346	-0.414	-0.749
η_4	-2.540	-2.655	-2.148	-6.055
η_5	0.580	0.630	0.411	1.734
ξ_6	0.012	0.015	0	0.004
η_6	-0.068	-0.079	0	-0.319
$\Delta, \%$	1	0.5	2.5	0.9

аппроксимируются не экспериментальные точки с большим разбросом, а гладкая математическая кривая. Здесь точность, равную точности самой табл. 3, удалось получить при $M = 5$ и $N = 3$.

Число гармоник основного периода оказалось почти таким же, как число гармоник двойного периода. Поэтому запись (1), где функции двойного периода ставятся после функций основного периода, не слишком удобна. Гораздо удобнее записать результат в виде отрезка ряда Фурье на $[-\pi, \pi]$. Тогда функции двойного периода становятся нечетными гармониками, а функции основного периода становятся четными гармониками. Окончательная аппроксимация в физических единицах без приведения аргумента к стандартному отрезку $[-\pi/2, \pi/2]$ имеет следующий вид:

$$\lg K(T) = \sum_{k=0}^6 (\xi_k \cos kt + \eta_k \sin kt), \quad t = \frac{\pi}{5.30} (\lg T - 3.65), \quad 1.0 \leq \lg T \leq 6.3. \quad (19)$$

Здесь температура берется в единицах эВ. Для всех четырех реакций $\eta_0 = 0$, $\xi_5 = 0$; остальные коэффициенты приведены в табл. 4. Там же указаны относительные точности аппроксимаций $\Delta, \%$ в норме C . Видно, что математическая точность аппроксимации примерно соответствует оценочной физической точности, так что числа M и N выбраны разумно. Числа обусловленности линейной системы для всех реакций были равны $\kappa = 4 \times 10^6$. Они довольно велики, но вполне приемлемы для 64-битовых вычислений.

Данные из табл. 4 можно рекомендовать для использования в прикладных расчетах. Поскольку метод двойного периода позволяет разумно экстраполировать за пределы основного периода, то формулой (19) можно пользоваться даже в пределах $0.51 \leq \lg T \leq 6.8$ (в единицах эВ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белов А.А., Калиткин Н.Н. Обработка экспериментальных кривых регуляризованным методом двойного периода // Докл. АН. Информатика. 2016. Т. 470. № 3. С. 266–270.
2. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Аппроксимация и экстраполяция табулированных функций // Докл. АН. Информатика. 2000. Т. 374. № 4. С. 464–468.
3. Калиткин Н.Н., Луцкий К.И. Оптимальные параметры метода двойного периода // Матем. моделирование. 2007. Т. 19. № 1. С. 57–68.
4. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
5. NEA Data Bank – Nuclear Data Services. <http://www.oecd-nea.org/janisweb/search/exfor>
6. Козлов Б.Н. Скорости термоядерных реакций // Атомная энергия. 1962. Т. 12. № 3. С. 238–240.