

Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 3 — 1973

УДК 518 : 517.948

А. Н. ТИХОНОВ, В. Г. ШЕВЧЕНКО, П. Н. ЗАЙКИН
Б. С. ИШХАНОВ, А. С. МЕЧЕНОВ

О РАСЧЕТЕ СЕЧЕНИЯ ФОТОЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Рассмотрены некоторые вопросы численного определения на ЭВМ сечения фото-ядерной реакции из экспериментально измеренной кривой выхода. В работе описаны модификация метода Пенфолда—Лейсса с параметризацией шага обработки и регуляризирующий алгоритм, в котором в качестве критерия отбора выступает степень гладкости приближения. Для иллюстрации эффективности применения этих алгоритмов приводятся модельные задачи.

В настоящей работе рассматриваются некоторые вопросы численного определения на ЭВМ сечения фотоядерной реакции $\sigma(k)$ по эффекту его косвенного проявления — выходу продуктов излучаемой реакции $Y(E)$.

Так как энергетический спектр γ -квантов при работе с тормозным γ -излучением не монохроматический, то экспериментально получается не непосредственно сечение фотоядерной реакции $\sigma(k)$, а кривая выхода $Y(E)$. Кривая выхода и интересующее нас сечение связаны между собой интегральным уравнением Вольтерра первого рода

$$Y(E) = \eta \int_{E_{\text{пор}}}^E W(k, E) \sigma(k) dk, \quad (1)$$

где $E_{\text{пор}}$ — порог исследуемой реакции, $W(k, E)$ — число фотонов в интервале $k \div k + dk$, падающих на образец, отнесенное к одному отсчету монитора γ -излучения; η — нормировочная константа, зависящая от числа атомов в образце и от других факторов, определяющих условия эксперимента. В качестве ядра интегрального уравнения $W(k, E)$ в расчетах обычно используют тормозной спектр, рассчитанный Шиффом [1].

Определение $\sigma(k)$ по экспериментально измеренному выходу из уравнения (1) есть типичная обратная задача, и для построения устойчивого приближения необходимо привлечение параметрических алгоритмов. В качестве таковых в данной работе рассмотрены модификация известного метода Пенфолда—Лейсса [2], где параметром является шаг обработки, и регуляризирующий алгоритм, где критерием отбора

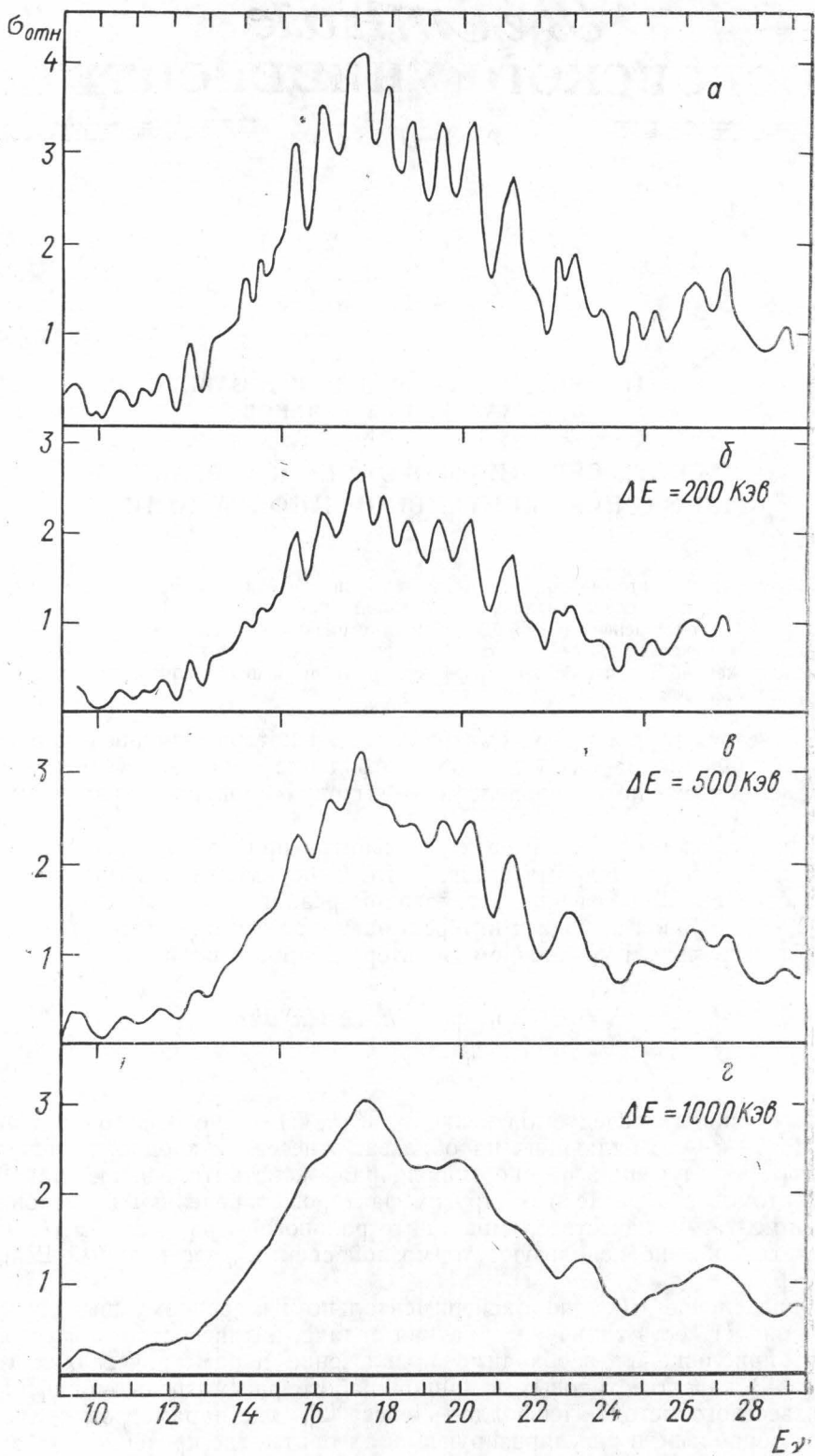


Рис. 1

выступает степень гладкости приближения (с несколькими способами выбора параметра регуляризации).

Эффективность применения этих алгоритмов иллюстрируется модельными задачами.

В эксперименте кривая выхода измеряется в конечном числе точек Y_1, Y_2, \dots, Y_n , соответствующих некоторым фиксированным значениям энергии E_1, E_2, \dots, E_n . При этом шаг изменения энергии $\Delta E_i = E_i - E_{i-1}$ может быть как постоянный, так и переменный. В дальнейшем для простоты рассмотрим случай, когда кривая выхода $Y(E)$ задана на равномерной сетке. При численных методах определения $\sigma(k)$ естественно интегральное уравнение аппроксимировать системой линейных алгебраических уравнений

$$Y_i = \sum_{j=1}^i N_{ij} \Omega_j \Delta k. \quad (2)$$

Величины N_{ij}, Ω_j в методе Пенфолда—Лейсса [2] имеют вид

$$N_{ij} = W\left(k_j + \frac{\Delta k}{2}, E_i\right) k_j; \quad \Omega_j = \frac{1}{k_j \Delta k} \int_{k_{j-1}}^{k_j} \sigma(k) dk = \frac{\sigma_j}{k_j}. \quad (3)$$

Этот метод заключается в определении $\sigma(k)$ через заранее вычисленную обратную матрицу уравнения (2) матрицу B_{ij} :

$$\sigma_j = \frac{k_j}{\Delta k} \sum_{i=1}^j B_{ji} Y_i. \quad (4)$$

Эффекты, обусловленные заменой интегрального уравнения суммированием на конечных интервалах Δk , подробно рассмотрены в работе [3]. Однако кривая выхода $Y(E)$ по своей природе есть случайная величина, и в эксперименте измеряется лишь оценка ее математического ожидания, возмущенная погрешностями измерений [4, 5]. Ошибки в определении $Y(E)$ скажутся на точности восстановления сечения. В методе обратной матрицы статистическая точность абсолютной величины рассчитанного сечения определяется соотношением

$$\delta \sigma_j = \frac{k_j}{\Delta k} \sqrt{\sum_{i=1}^j B_{ji}^2 (\delta Y_i)^2}. \quad (5)$$

В связи с тем что абсолютная ошибка в определении $Y(E)$ увеличивается с увеличением E , расчет эффективных сечений методом Пенфолда—Лейсса приводит к быстрому нарастанию ошибки в сечении с увеличением энергии. Это особенно сильно сказывается на точности определения сечения в области энергий за максимумом гигантского резонанса.

Рассмотрим модификации метода Пенфолда—Лейсса, в которых шаг расчета фигурирует как параметр.

Возможны два различных способа расчета сечений по формуле (4). При первом способе производится усреднение измерений кривой выхода по интервалу энергии Δk ; сечение получается в точках, отстоящих друг от друга на расстояние Δk . При втором способе по-

следовательность чисел Y_i разбивается на p последовательностей Y_i^s ($s = 1, 2, \dots, p$) таким образом, чтобы точки отдельной подпоследовательности отстояли друг от друга на величину энергетического интервала, равного шагу расчета сечения Δk . Сосединенные подпоследовательности Y_i^s и Y_i^{s+1} отстоят друг от друга на величину энергетического интервала ΔE , с которым изменялась кривая выхода. Сечение σ_j^s рассчитывается по формуле (4) независимо для каждой подпоследовательности Y_i^s . Окончательное эффективное сечение дается системой чисел $\sigma_j^1, \sigma_j^2, \dots, \sigma_j^p$, сдвинутых по энергии относительно друг друга на величину ΔE . Подобный метод в отличие от усреднения исходной кривой выхода по интервалу Δk позволяет, как показали расчеты на модельных задачах, несколько увеличить надежность разрешения отдельных деталей в сечении.

Выбор оптимального шага расчета сечения Δk зависит от точности и конкретного вида кривой выхода. Как правило, оптимальный шаг расчета не является одинаковым для различных участков кривой выхода. Использование расчетного шага $\Delta k = 0,2$ Мэв приводит к существенным ошибкам при больших значениях E . Поэтому с ростом E точность определения $Y(E)$ должна увеличиваться. В эксперименте этого можно добиться путем повышения дозы γ -излучения с увеличением энергии E . Однако такой путь не всегда является оправданным. Точность определения сечения также можно несколько повысить, увеличивая расчетный шаг сечения по мере увеличения E .

В проводимых экспериментальных исследованиях обычно на начальном участке кривой выхода $Y(E)$ для расчета сечений используется шаг $0,2$ Мэв, на среднем $0,5$ Мэв, и для участка кривой выхода, соответствующего наибольшим значениям E , шаг расчета равен 1 Мэв. Окончательная кривая сечения состоит таким образом из трех сопряженных частей, полученных с различным шагом. Отсюда ясно, что энергетическое разрешение сечений, полученных таким способом, ухудшается с ростом E . Проиллюстрируем эффективность такого подхода модельной задачей. На рис. 1,а показано сечение реакции $\bar{\sigma}(k)$, выбранное в качестве эталонного. Структура этого сечения по форме близка к структуре фотоядерных реакций в районе гигантского резонанса. Из сечения была рассчитана кривая выхода реакции $\bar{Y}(E)$ с энергетическим шагом 100 кэв, и далее из точного значения кривой выхода было восстановлено сечение для трех случаев: $\Delta k = 0,2; 0,5$ и 1 Мэв. Эти результаты показаны на рис. 1 б, в, г. Видно, что по мере уменьшения шага в сечении начинают проявляться резонансы, и при шаге расчета $0,2$ Мэв полученное сечение практически не отличается от эталонного. Этот результат является очевидным, поскольку в качестве эталонного сечения выбрано сечение, в котором ширины резонансов превышают 200 кэв.

В следующем эксперименте кривая выхода $Y(E)$ возмущалась с помощью случайных чисел, распределенных по нормальному закону

$$\bar{Y}(E_i) = \bar{Y}(E_i) (1 + \delta Y(E_i) \xi), \quad \xi \sim N(0, 1), \quad (6)$$

причем $\delta Y(E_i) = \sqrt{\bar{Y}(E_i)}$. На рис. 2 б, в, г показаны сечения, восстановленные из возмущенной кривой выхода с различным расчетным шагом. При этом кривая выхода в верхних каналах получена с относительной ошибкой $0,1\%$, что соответствует статистике 10^6 в каждом канале. Для сравнения укажем, что при измерении фотонейтронных сечений кривая выхода в верхних каналах измеряется с отно-

сительной точностью 0,08%, что соответствует объему статистики в верхних каналах $3-7 \cdot 10^6$. Анализируя данные, приведенные на рис. 2, можно определить интервал Δk , с которым имеет смысл проводить расчеты сечений реакций. Для случая, приведенного на рис. 2, анализ с шагом 0,2 возможен в области до 17 Мэв. В области выше 22 Мэв целесообразно использовать расчетный шаг 1 Мэв. Анализ с шагом

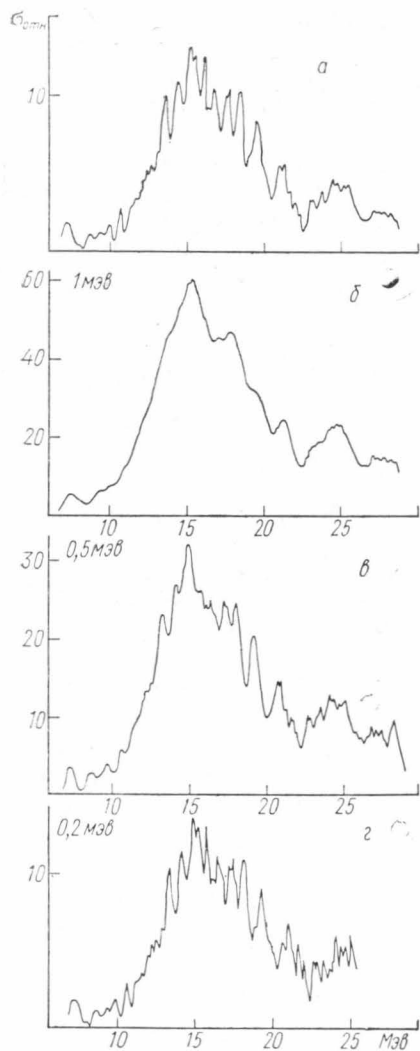


Рис. 2

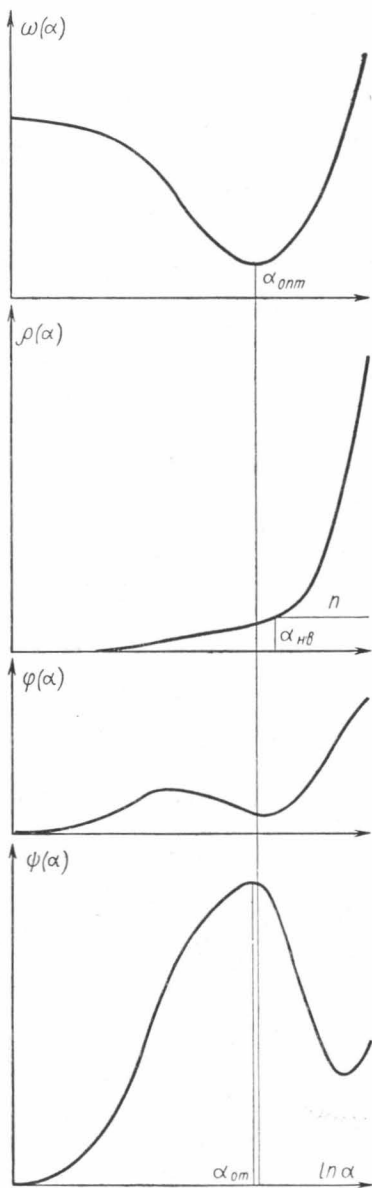


Рис. 3

0,5 Мэв целесообразно проводить в промежуточной области. На рис. 2,а показана окончательная кривая сечения во всем энергетическом диапазоне. Таким образом, использование метода обратной матрицы при решении уравнения Вольтерра требует постоянного согласования

шага расчета сечения с точностью определения исходной информации.

В связи с тем что кривую выхода с достаточно высокой степенью точности получить трудно, часто проводится предварительное выглаживание исходной информации, т. е. при расчете сечения из экспериментальной кривой выхода в уравнение (4) вместо Y_i подставляется \hat{Y}_i :

$$\hat{Y}_i = \sum_{j=1}^n \tau_{ij}^b Y_j, \quad (7)$$

где τ_{ij}^b — выглаживающая функция, характеризуемая параметром b . Величина параметра b определяет энергетический (характерный) интервал, на котором происходит выглаживание кривой выхода.

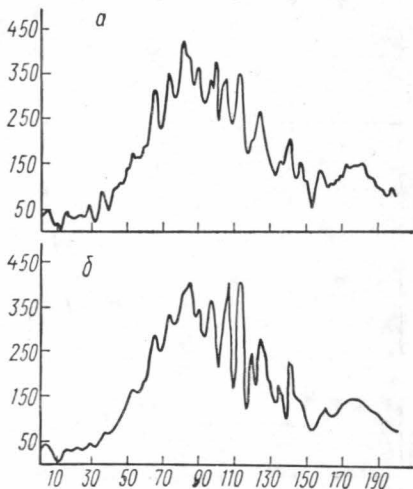


Рис. 4

При расчете сечения прямым методом из сглаженной кривой выхода необходимо, чтобы расчетный шаг сечения Δk превышал b ($\Delta k > b$). В противном случае в сечении реакции могут появляться ложные максимумы, обусловленные процедурой выглаживания.

Приведенные примеры говорят о возможности применения параметризованной модификации Пенфолда—Лейсса для расчета сечения реакции по экспериментальной кривой выхода. Трудности при этом методе возникают при попытке автоматизации выбора расчетного шага на ЭВМ. Поэтому для расчета сечений нами используется также

другой регуляризирующий алгоритм, где критерием выбора приближенного сечения является принцип гладкости [6].

В этом методе из множества «формальных» решений, т. е. функций $\sigma(k)$, удовлетворяющих условию

$$\sum_{i=1}^n \frac{\left[\int_{E_{\text{пор}}}^{E_i} W(k, E_i) \sigma(k) dk - Y(E_i) \right]^2}{[\delta Y(E_i)]^2} \ll n, \quad (8)$$

выбирается такое, для которого функционал

$$\Omega[\sigma] = \int_{E_{\text{пор}}}^{E_{\text{max}}} \left[\sigma^2(k) + \left(\frac{d\sigma(k)}{dk} \right)^2 \right] dk$$

имеет минимальное значение. Таким образом, построенное сечение будем называть наиболее гладким приближением к истинному по данной экспериментальной информации [5]. Нахождение функции $\sigma(k)$ сводится к задаче отыскания минимума функционала

$$M^{\alpha} = \left\| \int_{E_{\text{пор}}}^E W(k, E) \sigma(k) dk - Y(E) \right\|_{L_2, \frac{1}{\delta Y}}^2 + \alpha \Omega[\sigma], \quad (9)$$

где $\alpha > 0$ — параметр регуляризации, аналогичный множителю Лагранжа. Как следует из работ [6—8], любой алгоритм минимизации функционала M^α (вместе с выбором параметра α^1) будет являться регуляризирующим, т. е. будет давать приближение с заданной степенью точности к истинному сечению $\bar{\sigma}(k)$, если кривая выхода $Y(E)$ измерена с достаточной точностью. Например, таким алгоритмом будет определение сечения из уравнения Эйлера для функционала M^α :

$$\int_{E_{\text{пор}}}^{E_{\text{max}}} \bar{W}(T, k) \sigma(k) dk + \alpha \left[\sigma(T) - \frac{d^2 \sigma(T)}{dT^2} \right] = \int_{E_{\text{пор}}}^{E_{\text{max}}} \frac{W(E, T) Y(E)}{[\delta Y(E)]^2} dE, \quad (10)$$

где

$$\bar{W}(T, k) = \int_{E_{\text{пор}}}^{E_{\text{max}}} \frac{W(E, T) W(E, k)}{[\delta Y(E)]^2} dE.$$

При фиксированном уровне погрешности $\delta Y(E)$ уклонение $\omega(\alpha)$ получаемого таким образом сечения $\sigma^\alpha(k)$ от истинного $\bar{\sigma}(k)$ ($\omega(\alpha) = \max |\sigma^\alpha(k) - \bar{\sigma}(k)|$) с изменением α имеет вид, приведенный на рис. 3. Отмеченное на рис. 3 $\alpha_{\text{опт}}$ соответствует минимуму функции $\omega(\alpha)$. С уменьшением параметра регуляризации α ($\alpha < \alpha_{\text{опт}}$) происходит «разбалтывание» $\sigma^\alpha(k)$, появляются осцилляции, обусловленные увеличением влияния ошибок в $Y(E)$. С увеличением α ($\alpha > \alpha_{\text{опт}}$) увеличивается влияние регуляризирующего функционала $\Omega[\sigma]$, что приводит к заглаживанию структуры в сечении. При решении конкретных задач практически невозможно использование формулы $\alpha(\delta Y) = \text{const}(\delta Y)^2$ для определения значения параметра регуляризации, так как const существенно зависит от ядра $W(k, F)$ и искомого сечения $\bar{\sigma}(k)$. Поэтому остановимся несколько подробнее на некоторых способах выбора параметра α , применяемых нами при построении сечения методом регуляризации. Приведенные ниже способы проверены на модельных задачах и опробованы нами на большом количестве конкретных экспериментов.

Первый способ реализует известный принцип невязки [5], т. е. среди множества решений, соответствующих различным значениям параметра, выбирается такое, при котором

$$\rho(\alpha) = \sum_{i=1}^n \frac{\left[\int_{E_{\text{пор}}}^{E_i} W(k, E_i) \sigma^\alpha(k) dk - Y(E_i) \right]^2}{[\delta Y(E_i)]^2} = n. \quad (11)$$

Типичный вид $\rho(\alpha)$ приведен на рис. 3.

Заметим, что с уменьшением параметра α невязка $\rho(\alpha)$ уменьшается, а функционал $\Omega[\sigma^\alpha]$ монотонно возрастает. Таким образом, сечение $\sigma^{\alpha_{\text{нев}}}(k)$, где α выбирается таким способом, соответствует минимальному значению регуляризирующего функционала $\Omega[\sigma^\alpha]$ (при условии $\rho(\alpha) \leq n$), т. е. соответствует максимальному возможному «сглаживанию» сечения.

Очевидно, что выбор α таким способом сильно зависит от оценки погрешности $\delta Y(E)$. В большинстве случаев значение параметра $\alpha_{\text{нев}}$ указывает верхнюю границу выбора параметра $\alpha_{\text{опт}}$ и дает «перегла-

¹ Как известно, $\alpha = \alpha(\delta Y)$, например $\alpha = c(\delta Y)^2$, где $c = \text{const}$.

женное» решение. В интересующей нас области значений параметра $\rho(\alpha)$ «слабо» зависит от параметра α (большие изменения в величине параметра соответствуют малым изменениям величины $\rho(\alpha)$, в то же время решение $\sigma(k)$ сильно меняется с изменением параметра α).

В связи с этим приведем другой способ оценки α оптимального, который будем называть «выбором параметра по отношению». В качестве приближения выбирается такое $\sigma^\alpha(k)$, для которого величина

$$\psi(\alpha) = \frac{\left\| \int_{E_{\text{пор}}}^E W(k, E) \sigma^2(k) dk - Y(E) - \alpha \int_{E_{\text{пор}}}^E W(k, E) \frac{\partial \sigma^\alpha(k)}{\partial \alpha} dk \right\|^2}{\left\| \int_{E_{\text{пор}}}^E W(k, E) \sigma^\alpha(k) dk - Y(E) \right\|^2} \quad (12)$$

достигает своего левого максимума. Функция $\psi(\alpha)$ имеет вид, приведенный на рис. 3.

Максимум функции $\psi(\alpha)$ соответствует минимуму функции $\varphi(\alpha) = \left\| \alpha \frac{\partial \sigma^\alpha(k)}{\partial \alpha} \right\|$, которая есть оценка первого члена на разложения $\omega(\alpha)$ в ряд Тейлора по α . Выбор α из условия минимума $\varphi(\alpha)$ и, следовательно, максимума $\psi(\alpha)$ основан на том, что при $\alpha \sim \alpha_{\text{опт}}$ поведение функции $\omega(\alpha)$ достаточно хорошо описывается функцией $\varphi(\alpha)$. Так как $\sigma^\alpha(k)$ и $\alpha \frac{\partial \sigma^\alpha(k)}{\partial \alpha}$ при увеличении α ($\alpha \gg \alpha_{\text{опт}}$) стремятся к нулю (см. вид M^α и график $\varphi(\alpha)$), то $\psi(\alpha) \rightarrow 1$ при $\alpha \rightarrow \infty$. Учет первого члена в разложении $\sigma(k)$ приводит к тому, что с уменьшением α числитель в $\psi(\alpha)$ убывает быстрее, чем знаменатель. Этот метод выбора параметра достаточно просто алгоритмизируется.

Для анализа этих способов выбора (оценки) параметра регуляризации рассмотрим зависимость таким способом выбираемых параметров (и $\alpha_{\text{опт}}$) от погрешности возмущений кривой выхода. Как правило, решение $\sigma^\alpha(k)$ для $\alpha = \alpha_{\text{нев}}$ соответствует приближению, которое является более гладкой функцией, нежели оптимальное приближение. Решение $\sigma^\alpha(k)$ для $\alpha_{\text{отн}}$ соответствует менее гладкому приближению, чем для $\alpha = \alpha_{\text{опт}}$. Заметим, что вычисление $\alpha_{\text{нев}}$ требует обычно очень точного знания погрешности. Численные эксперименты показывают, что при ошибке в 2 раза в определении $\delta Y(E)$ можно получить значительное отклонение $\alpha_{\text{нев}}$ от $\alpha_{\text{опт}}$. Изложенные способы выбора параметра регуляризации алгоритмированы и включены в программы численного определения сечения фотоядерных реакций на ЭВМ.

Для того чтобы удобнее сравнить результаты восстановления сечений различными способами, все численные расчеты были выполнены для одной и той же модельной задачи. На рис. 4,а показано сечение, соответствующее выбору параметра из принципа отношения, на рис. 4,б — из принципа невязки. При этом рис. 4 соответствует случаю, когда кривая выхода известна с точностью до 0,1%.

При реализации регуляризирующего алгоритма возникают трудности, связанные с большими затратами времени на многократное решение на ЭВМ системы линейных алгебраических уравнений и на вычисление ядра $W(k, E)$. Ограниченность оперативной памяти ЭВМ приводит к необходимости решения задачи на перекрывающихся отрезках [4].

В заключение сделаем некоторые выводы.

Все примеры свидетельствуют о высокой степени устойчивости решений, полученных методом регуляризации, особенно сильно преимущество метода регуляризации проявляется в области высоких энергий за максимумом гигантского резонанса.

Сравнение полученных способов выбора параметра указывает на то, что для экспериментального материала наиболее близким к оптимальному является $\alpha_{\text{отн}}$.

При той точности измерений кривой выхода, которую позволяет получить метод автоматического измерения верхней границы тормозного спектра, применение модифицированного метода Пенфолда — Лейсса также приводит к достаточно надежному восстановлению сечения. При этом роль регуляризирующего параметра фактически выполняет шаг расчета сечения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Schiffz. «Phys. Rev.», **83**, 252, 1951.
2. Penfold A. S., Leiss J. E. «Phys. Rev.», **114**, 1332, 1959.
3. Thies H. H. «Austral J. Phys.», **14**, 1158, 1961.
4. Система автоматической обработки фотоядерных реакций. Научный отчет № 138—Тс (445): ВЦ МГУ, 1970.
5. Тихонов А. Н., Шевченко В. Н. и др. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астроф., **11**, 208—212, 1970.
6. Тихонов А. Н. ДАН СССР, **151**, 501, 1963.
7. Морозов В. А. О регуляризирующих семействах операторов. В сб. работ ВЦ МГУ, вып. 8, 1967, стр. 63—95.
8. Тихонов А. Н. О некорректно поставленных задачах. В сб. работ ВЦ МГУ, вып. 8, 1967, стр. 3—33.

Поступила в редакцию
18.10 1971 г.

НИИЯФ
НИВЦ