

Numerická aproximace závislostí z nepřesných dat

Barbora Salajová¹
Felicitas Holtslag²

¹ Gymnázium Litoměřická, Praha 9

² Gymnázium Jana Opletala, Litovel

Fitování dat

- Hledání matematického modelu, který nejlépe odpovídá naměřeným datům
- Mezi užívané metody patří *numerická interpolace* a *metoda nejmenších čtverců*

Úloha

- Účinné průřezy rezonančních rozptylů neutronů (jaderné reakce) jsou uvedeny v tabulce
- Určete hodnotu účinných průřezů příslušných k hodnotám energii ležících mezi údaji v tabulce

<i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	8	9
E_i (MeV)	0	25	50	75	100	125	150	175	200
$g(E_i)$ (MB)	10.6	16.0	45.0	83.5	52.8	19.9	10.8	8.25	4.7
Error (MB)	9.34	17.9	41.5	85.5	51.5	21.5	10.8	6.29	4.14

Postup

- Data aproximujeme metodou nejmenších čtverců
- Naměřené hodnoty y proložíme takovou aproximační funkcí $f(x)$, která minimalizujeme funkcionál

$$S = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i - f(x_i)]^2}$$

Postup

- Je třeba zjistit neznámé parametry a_1, a_2, a_3 v *Breit-Wignerově funkci* (ve funkcionálu S zastupuje funkci $f(x)$)

$$f(E) = \frac{a_1}{(E - a_2)^2 + a_3}$$

Postup

- Funkcionál lze přepsat následně

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^9 \frac{1}{\sigma_i^2} [g(E_i) - f(a_1, a_2, a_3)]^2$$

- Aby byl funkcionál minimální, následující parciální derivace musí být nulové

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_1} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_2} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_3} = 0.$$

Postup

- Pomocí vyjádření těchto derivací (v systému *Maple*) se získá soustava rovnic
- Jelikož jsou nelineární, řeší se numericky Newton-Raphsonovou metodou

$$\sum_{i=1}^9 \frac{g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}}{\sigma_i^2 [(E_i - a_2)^2 + a_3]} = 0$$

$$\sum_{i=1}^9 \frac{\left(g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}\right) a_1 (E_i - a_2)}{\sigma^2 [(E_i - a_2)^2 + a_3]^2} = 0$$

$$\sum_{i=1}^9 \frac{\left(g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}\right) a_1}{\sigma^2 [(E_i - a_2)^2 + a_3]^2} = 0$$

- Stejně jako v případě 1 rovnice systém linearizujeme v bodu $\vec{x}^{(k)}$ (k -tém odhadu řešení):

$$\underbrace{f_i(\vec{x}^{(k)} + \delta \vec{x}^{(k)})}_{\text{předpokl.} = 0} = \underbrace{f_i(\vec{x}^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j^{(k)}}_{\text{položíme} = 0} + \underbrace{\mathcal{O}\left[\left(\delta \vec{x}^{(k)}\right)^2\right]}_{\text{zanedbáme}}$$

- Máme tedy soustavu n rovnic o n neznámých:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}}_{\mathbf{J}} \cdot \begin{pmatrix} \delta x_1^{(k)} \\ \delta x_2^{(k)} \\ \vdots \\ \delta x_n^{(k)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(\vec{x}^{(k)}) \\ f_2(\vec{x}^{(k)}) \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}^{(k)}) \end{pmatrix}$$

Tím vypočteme $\delta \vec{x}^{(k)}$ a další odhad bude $\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \delta \vec{x}^{(k)}$

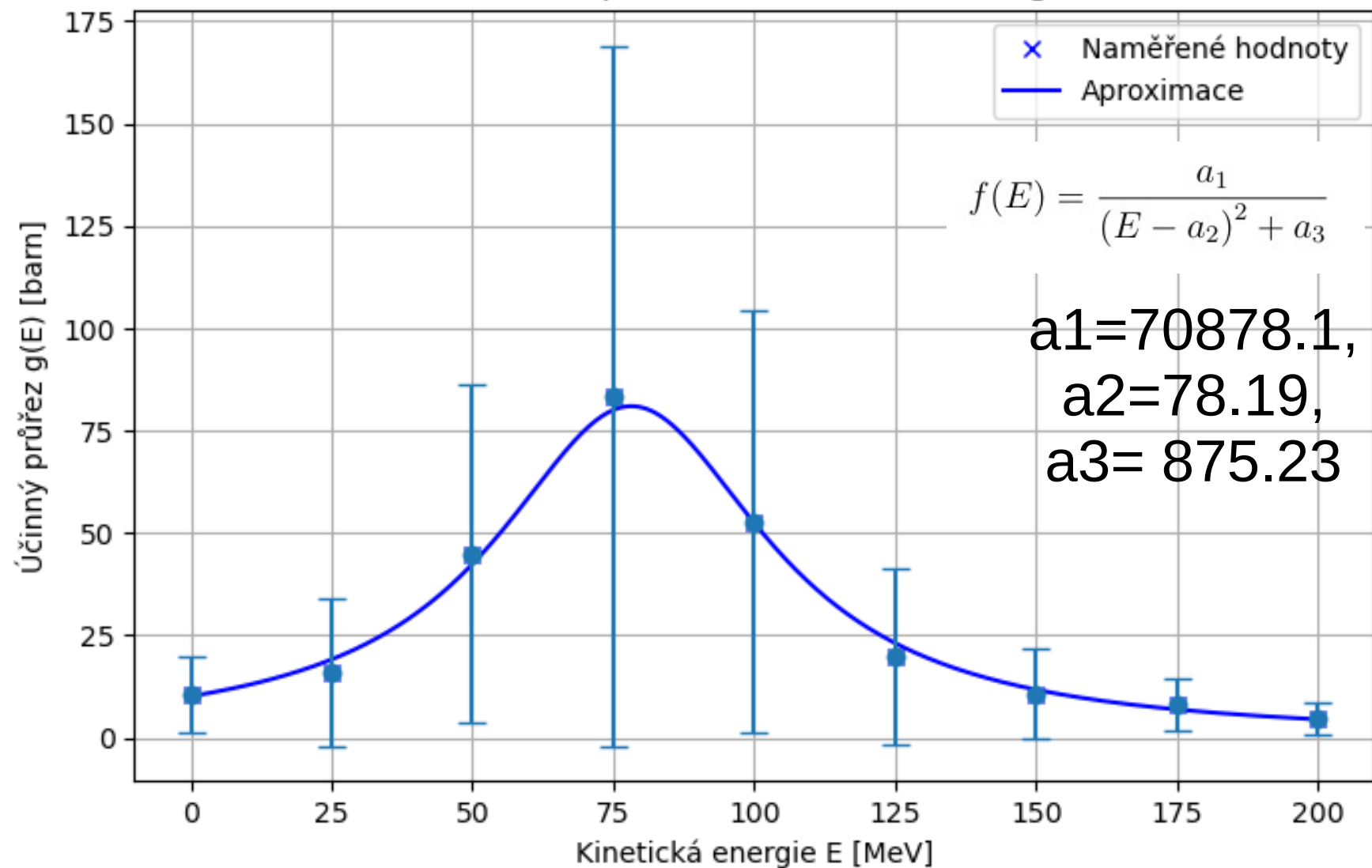
- Vektorově

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - [\mathbf{J}f(\vec{x}^{(k)})]^{-1} \cdot \vec{f}(\vec{x}^{(k)})$$

Postup

- Ve vývojovém prostředí *jupyter* jsme vytvořili program, který právě tuto metodu opakovaně provádí a upřesňuje vstupní odhad parametrů a_1 , a_2 & a_3

Závislost účinného průřezu na kinetické energii neutronu



Závěr

Pomocí metody nejmenších čtverců a Newton-Raphsonovou metodou jsme určili vhodné parametry pro aproximační funkci určující účinné průřezy jaderné reakce (tzv. rezonančního rozptylu neutronů)

Děkujeme za pozornost