

БАЗЫ ДАННЫХ В НАУЧНОМ СЕРВИСЕ — ОТ ИЗВЕСТНОГО К НОВОМУ

В.В. Варламов, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов

1. Введение.

Среди разнообразных задач научного сервиса как одна из главных может рассматриваться задача организации эффективного и удобного доступа исследователей и специалистов к данным и знаниям, накопленным ранее. Такой доступ к информации может быть реализован в самых разных формах, начиная от традиционных библиотечных (каталоги, справочники, реферативные издания) и заканчивая современными электронными, основанными, прежде всего, на возможностях Интернет. В огромном ряду средств информационного обеспечения особое место занимают электронные базы фактографических данных, которые представляют собой своеобразные «склады готовой продукции», поиску которой, по существу, подчинены все остальные формы информационного обеспечения: именно фактографическая информация о научных или технических характеристиках или свойствах является объектом любого информационного поиска. При этом искомая фактографическая информация может относиться к любой области науки, техники, знания или культуры — это могут быть сведения об авиарейсах, марках автомобилей, ценах на спиртные напитки, или свойства атомных ядер. Главное — точность, достоверность и полнота сведений об объектах, данные о которых составляют конкретную базу данных (БД), а также мощность и гибкость поисковых систем, предназначенных для оперирования с накопленным массивом фактографических сведений.

Огромные массивы информации современных электронных БД и гибкое программное обеспечение открывают перед пользователями практически неограниченные возможности поиска конкретных данных, позволяя подойти ко всей совокупности накопленных данных с единой точки зрения и впервые сформулировать к этой совокупности данных вопросы, для которых без этих возможностей не было никаких оснований. Для ответов на такие вопросы, ранее, естественно, также не было никаких оснований, а следовательно, такие ответы, полученные впервые, представляют собой, по существу, новые данные, новую информацию, а в конечном счете — новое знание. Зачастую даже относительно простая системная обработка известных результатов порождает (точнее — «выявляет») принципиально новую физическую информацию, которая ранее отсутствовала (по крайней мере, в явном виде), поскольку для ее выявления не было оснований. Прежде всего это относится к возможностям выявления неизвестных ранее систематических погрешностей результатов разных экспериментов, установлению неизвестных ранее закономерностей в таких результатах, получения точных и надежных данных на основе взаимной оценки результатов различных экспериментов с учетом их систематических погрешностей, возможностям оценки результатов экспериментов, которые не были (или не могут быть в принципе) проведены.

Принципиально важное место БД в системе получения знаний об окружающей нас действительности может быть проиллюстрировано простым бытовым примером «2 термометра». Представим себе, что необходимо измерить температуру в некотором помещении. Для решения задачи взяты 2 разных термометра, например, спиртовой и термопарный, с одинаково высокой точностью ~ 0.5 градуса. При расположении их рядом вдруг обнаруживается, что один показывает $+20.0$ градусов, а другой (для простоты дальнейших рассуждений) — $+25.0$ градусов. Очевидно, что либо один из двух термометров, либо оба они неточны (имеются значительные систематические погрешности их показаний). В такой ситуации в большинстве случаев делается вывод о том, что температура в помещении равна $+22.5$ градуса с погрешностью 0.7 градуса (систематические погрешности оцениваются так же, как и статистические). Однако, вероятность результата « 22.5 » очень низка, поскольку он достигается только в режиме тройного совпадения (оба термометра врут, на абсолютно одинаковые величины, но в разные стороны). Очевидно, что истинный результат не будет среднеарифметической оценкой — закон распределения систематических погрешностей может существенно отличаться от нормального закона распределения статистических погрешностей. Для определения истинного результата необходимы исследования, базирующиеся на БД — вероятность того, что три термометра неисправны, намного ниже вероятности того, что неисправны 2, вероятность того, что неисправны 10 термометров, еще во много-много раз меньше и т.д. Пример «2 термометра» имеет одно весьма неприятное следствие, относящееся к уникальным пионерским результатам — если представить себе, что описанные 2 термометра использовали врозь 2 человека, то один из них будет уверен, что температура в помещении равна $+20$ градусов, а другой — $+25$ градусов. И только при встрече у них вместо двух пионерских результатов появится БД из двух результатов и впервые возникнут вопросы «Кто из них прав?», «Какова же истинная температура?», ответы на которые приведут их к новому знанию.

2. Базы ядерных данных Центра данных фотоядерных экспериментов (ЦДФЭ) НИИЯФ МГУ.

ЦДФЭ Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В.Скобельцына МГУ имени М.В.Ломоносова был создан с целью решения задачи создания БД фотоядерных данных в рамках международного сотрудничества под эгидой Международного агентства по атомной энергии (МАГАТЭ).

ЦДФЭ является участником Сети Центров данных по ядерным реакциям МАГАТЭ [1] наряду с тремя другими российскими организациями (Центр по атомным и ядерным данным, ГИЦ «Курчатовский институт», Москва; Центр ядерных данных РИЦ «Физико-энергетический институт», Обнинск, Центр ядерных данных РФЯЦ ВНИИЭФ, Саров), отвечая за компиляцию, обработку, оценку и распространение данных по реакциям под действием γ -квантов. В ЦДФЭ как в сетевом центре ядерных данных [2] в рамках международной Сети наряду с международной БД по ядерным (в том числе и фотоядерным) реакциям создано несколько больших (репрезентативных) реляционных ядерно-физических БД. БД ЦДФЭ [2] функционируют в среде Интернет (<http://cdfe.sinp.msu.ru>) и содержат огромное количество разнообразных сведений об атомных ядрах, а также о процессах их взаимных превращений в ядерных реакциях и радиоактивных распадах. БД, снабженные гибкими и мощными поисковыми системами, находят широкое применение в фундаментальных и прикладных научных исследованиях, а также в учебном процессе подготовки специалистов достаточно широкого профиля [3]. Некоторые результаты использования созданных БД как средств научных ядерно-физических исследований для получения новых неизвестных ранее данных были представлены в [4—6]. Настоящий доклад посвящен развитию и обобщению способов использования БД в научном сервисе.

3. БД и проблемы расхождений результатов разных экспериментов.

3.1. Расхождение данных фотоядерных экспериментов — типичный случай задачи «2 термометра».

Сечения (вероятности) реакций под действием γ -квантов, в которых образуется различное количество вылетающих частиц, прежде всего, нейтронов, представляют особый интерес с точки зрения изучения гигантского дипольного резонанса (ГДР) — мощного широкого ярко выраженного резонанса в сечении реакции фотопоглощения, то есть в процессе, в котором налетающий фотон поглощается ядром и перестает существовать. После этого возбуждение ядра снимается путем испускания различных частиц, а сечения соответствующих реакций несут в себе информацию о механизмах электромагнитных взаимодействий, конкуренции различных каналов распада ГДР.

Подавляющее большинство данных такого типа получено в двух лабораториях, причем при наличии экспериментов для одного того же ядра (таковых насчитывается около 20) их результаты существенно различаются. С помощью созданной в рамках Сети Центров ядерных данных МАГАТЭ БД по ядерным реакциям (<http://cdfe.sinp.msu.ru/exfor/index.php>) было показано, что расхождения результатов фотоядерных экспериментов имеют ярко выраженный систематический характер (Рис. 1) — все сечения реакции (γ, n) с вылетом одного нейтрона имеют большие величины в одной лаборатории, а сечения реакции $(\gamma, 2n)$ с вылетом двух нейтронов — в другой.

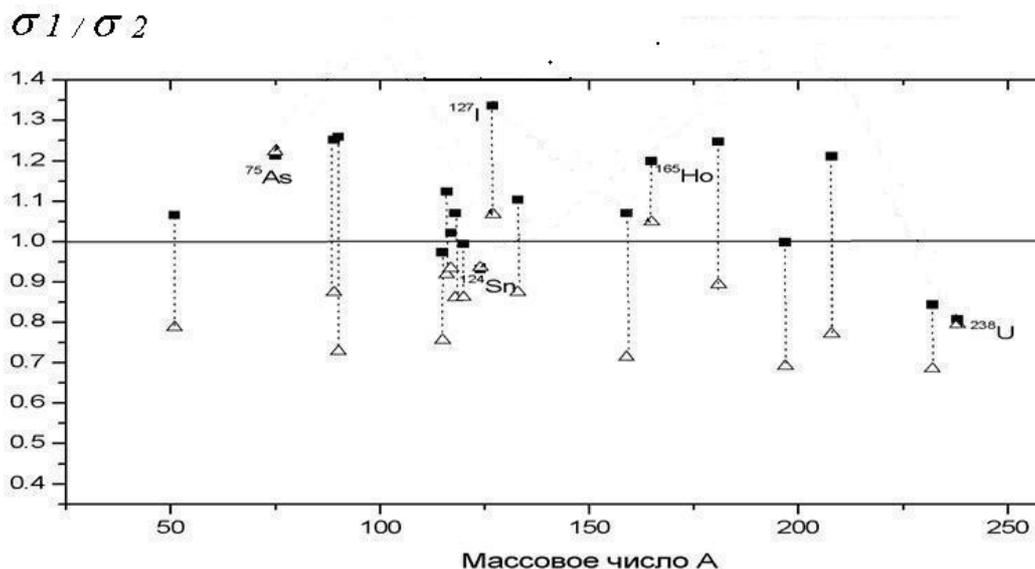


Рис. 1. Отношения данных двух лабораторий по сечениям реакций (γ, n) — квадраты и $(\gamma, 2n)$ — треугольники.

Для каждого из 20 ядер, исследованных в обеих лабораториях, результаты различаются намного больше, чем допускается приводимыми статистическими погрешностями — типичный случай задачи «2 термометра». Как было показано выше, подобная задача не решается простым усреднением (или средне-взвешиванием), она требует определения закона, по которому распределены систематические погрешности каждого результата и их индивидуального учета. Совместный анализ данных по различным фотоядерным реакциям, содержащихся в упомянутой БД позволил сформулировать задачу нахождения простых и

эффективных критериев присутствия систематических погрешностей в результатах измерений, определения с их помощью законов распределения погрешностей и их учета.

3.2. Неопределенность значения спина J верхнего одночастичного состояния.

Спин верхнего одночастичного состояния — важная характеристика ядра, определяющая, прежде всего числа нуклонов и вакансий на этом состоянии, а кроме того — возможности осуществления различных реакций, приводящих к различным состояниям конечных ядер. Для определения числа нуклонов ядерного состояния используют реакции нуклонного подхвата, в которых налетающая частица подхватывает с исследуемого состояния нуклон, а с для определения числа вакансий на состоянии — реакции срыва, в которых с налетающей частицы срывается нуклон и «садится» на исследуемое состояние. Характеристики передаваемых нуклонов прямо связаны со спином состояния, но в случае неполяризованных налетающих частиц дают возможность определения лишь пары ($\pm 1/2$) значений, отличающихся на 1. А поскольку измерения с поляризованными частицами достаточно сложны, то во многих случаях значения спина остаются вообще неизвестными.

Однако использование систематик простых выборок из БД по структуре ядер (<http://cdfc.sinp.msu.ru/services/ensdfr.html>) — соответствующих распределений вероятностей возбуждения в таких реакциях состояний с разными спинами — выявляет четкие закономерности, позволяющую не только однозначно интерпретировать значения спина, например, выбрать значение $3/2$ из пары ($1/2, 3/2$) для ядра ^{47}V , $5/2$ из пары ($5/2, 7/2$) для ядра ^{51}Mn , и т. п., но в некоторых случаях оценить значения, которые были неизвестны, например, $3/2$ для ядра ^{55}Mn .

Тем самым, систематики простых выборок данных из БД позволяют определять (оценивать) значения спинов одночастичных состояний ядер без проведения сложных долгих и дорогих экспериментов на пучках поляризованных частиц.

3.3. Расхождение данных об энергии и заселенности одночастичных ядерных состояний в экспериментах по нуклонному срыву и подхвату.

Эксперименты по исследованию реакций нуклонного срыва и подхвата, как правило, проводятся независимо один от другого и приводят к результатам с систематическими погрешностями, во многих случаях существенно превосходящими по величине достигаемые статистические точности.

Однако, совершенно очевидно, что количество нуклонов, располагающихся на конкретной оболочке ядра, исследуемое в реакциях подхвата, и количество вакансий на этой же оболочке, которое исследуется в реакциях срыва, связаны между собой жестким квантово—механическим условием для соответствующих спектроскопических сил (или факторов) $S^+(E) + S^-(E) = 2J + 1$. С использованием этого обстоятельства простой метод взаимной обработки информации из упомянутой выше БД по структуре ядер, относящейся к реакциям нуклонного срыва и подхвата на одном и том же ядре, позволяет существенно не только согласовать результаты, получаемые в реакциях разного типа, но и существенно (от десятков до единиц процентов) повысить точность ядерно-спектроскопических данных.

Новые точные значения спектроскопических сил в свою очередь, позволяют использовать их для определения впервые уникальной информации об энергетическом положении и заселенности нуклонами одночастичных состояний ядер, впервые исследовать целый ряд новых эффектов и получить целый ряд новых физических результатов. Такие новые данные были получены для ядер $^{40,42,44,46,48,50,52,54}\text{Ca}$, $^{50,52,54}\text{Cr}$, $^{54,56,58}\text{Fe}$, $^{58,60,62,64}\text{Ni}$, $^{90,92,94,96}\text{Zr}$, $^{112,114,116,118,120,122,124}\text{Sn}$ и многих других.

Рассмотренный пример показывает, каким образом использование информации из БД («складов готовой продукции — известных данных») позволяет получить новые сведения о характеристиках ядерных состояний. Ниже рассмотрены другие возможности БД для проведения новых исследований.

4. БД и возможности новых исследований.

4.1. Определение критериев достоверности экспериментальных данных о сечениях фотоядерных реакций на основе простейших комбинаций данных из БД.

Как было показано выше, вопрос от достоверности данных, получаемых в различных экспериментах, стоит очень остро.

Упомянутая выше БД по ядерным реакциям позволяет выработать простые и эффективные критерии присутствия в экспериментальных сечениях фотоядерных реакций систематических погрешностей. Это возможно сделать на основании простейших комбинаций данных, например, функций множественности $F_i = \sigma(\gamma, in) / \sigma(\gamma, xn) = \sigma(\gamma, in) / [\sigma(\gamma, n) + 2\sigma(\gamma, 2n) + 3\sigma(\gamma, 3n) + \dots]$ — отношений сечений парциальных реакций (γ, in) и полной реакции, непосредственно исследуемой в эксперименте. Значения функций F_i для $i = 1, 2, 3, \dots$ по определению не могут принимать величин, больших, соответственно, 1.00, 0.50, 0.33, Так, ситуация « $F_2 > 0.50$ » для экспериментальных данных, обозначенных треугольниками (в отличие от данных, обозначенных квадратами) однозначно свидетельствует (Рис. 2) о недостоверности данных о сечениях обеих парциальных реакций — неоправданной ошибочной «перекачке» части нейтронов в канал ($\gamma, 2n$) из канала (γ, n), вследствие

чего сечение реакции (γ, n), как правило, попадает в область физически запрещенных отрицательных значений. Тем самым, простая комбинация данных из БД позволяет строго и однозначно исследовать и контролировать достоверность экспериментальных данных.

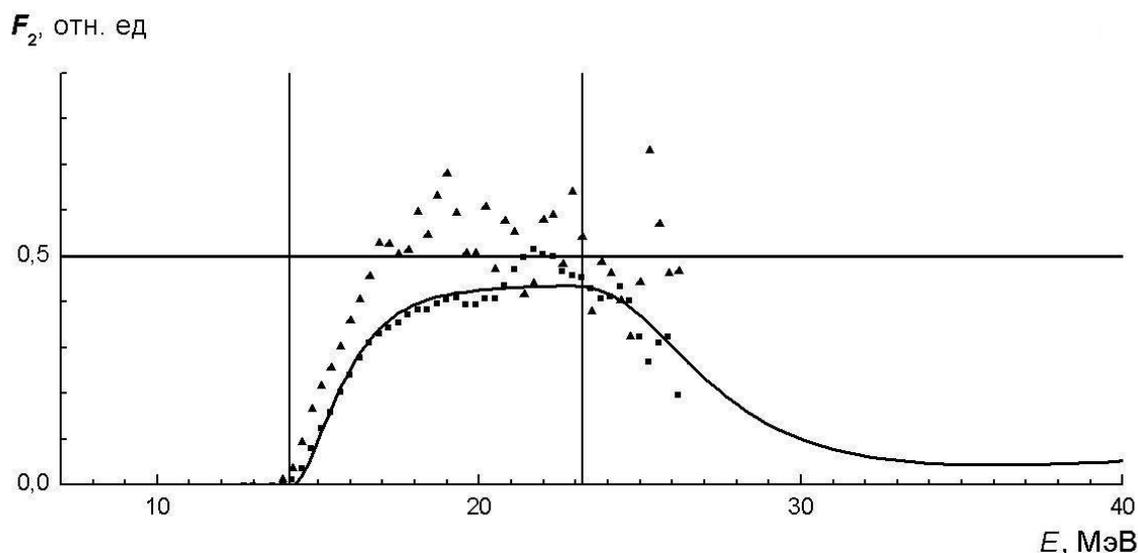


Рис. 2. Функции F_2 , полученные по данным двух экспериментов (треугольники и квадраты) в сравнении с физически достоверной функцией (теоретическая модель фотоядерных реакций - сплошная линия).

При установлении недостоверности экспериментальных данных установленные критерии достоверности позволяют получать (оценивать) достоверные данные с помощью использования функций F_2 , рассчитанных в рамках проверенных теоретически моделей. Так, в рамках нового подхода оценены сечения реакций (γ, n) и ($\gamma, 2n$), свободные от обсуждаемых недостатков экспериментальных данных, для ядер ^{75}As , ^{89}Y , ^{90}Zr , ^{115}In , ^{127}I , $^{112,114,116,117,118,119,120,122,124}\text{Sn}$, ^{133}Cs , ^{159}Tb , ^{165}Ho , ^{181}Ta , ^{197}Au , ^{208}Pb .

4.2. Изучение особенностей формы ядер в основном состоянии на основе систематики данных о параметре их квадрупольной деформации ядер.

Описание формы ядра проводится с помощью специального параметра квадрупольной деформации β_2 , характеризующего ее отклонение от сферической. Для его определения применяются два способа, один из которых использует данные о квадрупольном моменте ядра, то есть описывает, по существу, статическую деформацию ядра, а другой — данные о соотношении вероятностей особо определенных переходов (из основного состояния — в первое возбужденное состояние с $J^\pi = 2^+_{1}$) в ядре, то есть описывает динамическую деформацию ядра.

При создании в ЦДФЭ новой БД «Карта параметров формы и размеров ядер» (<http://cdfe.sinp.msu.ru/services/radchart/radmain.html>) была выявлена весьма интересная особенность экспериментальных данных: все исследованные ядра достаточно четко распределяются по двух группам.

Для ядер одной группы (Рис. 3 — изотопы Ti, Cr, Zr, Nd, Sm, Gd, Dy, Er, W, Os, Ra) данные, полученные обоими способами практически совпадают:

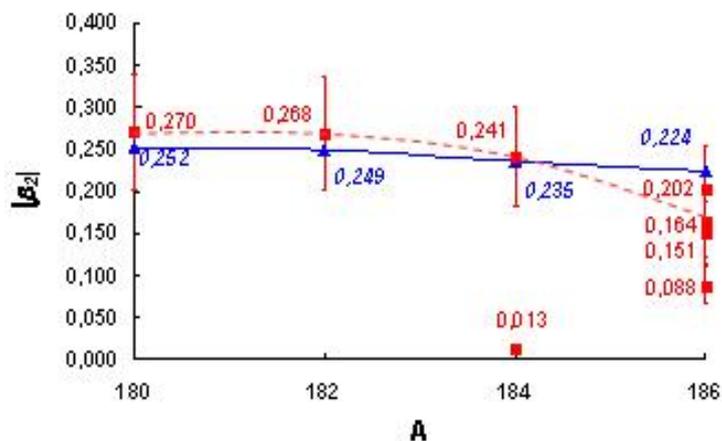


Рис. 3. Параметры квадрупольной деформации ядер W (группа ядер, у которых динамическая деформация в основном состоянии отсутствует).

Для ядер другой группы (Рис. 4 — C, Si, Ar, Ca, Fe, Ni, Zn, Ge, Se, Kr, Sr, Mo, Ru, Pd, Cd, Sn, Te, Ba, Yb, Hf, Pt, Pb) эти данные существенно (в разы) различаются:

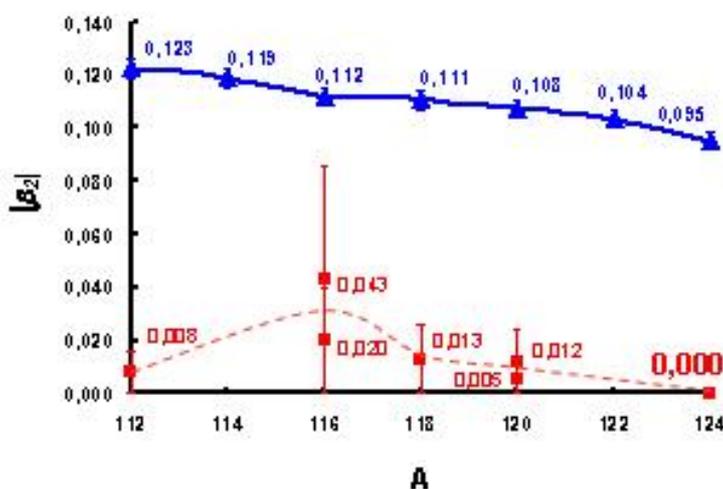


Рис. 4. Параметры квадрупольной деформации ядер Sn (группа ядер, у которых динамическая деформация в основном состоянии присутствует).

Таким образом, простейшая систематика данных из БД явно свидетельствует о существовании разных типов деформации атомных ядер в основном состоянии — статической и динамической и тавит вопрос о природе динамической деформации ядер в основном состоянии (своеобразные «нулевые» колебания — дрожание (trembling)). Возможность таких колебаний обсуждалась в научной литературе давно, но весьма осторожно, поскольку достаточно полная систематика подобных эффектов отсутствовала.

4.3. Изучение новых неклассических магических ядра на основе систематики распределений энергии E первого (нижайшего) уровня со спином $J^\pi = 2^+$.

Известны 7 классических магических чисел нуклонов в ядре — 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Ядра, у которых числа протонов Z или нейтронов N (или, тем более — оба числа) равны одному из магических, по своим свойствам (сферическая форма (меньшая деформация), меньшие размеры, большая плотность, большие энергии отделения распадов, ...) существенно отличаются от соседних. Магичность ядра связана с заполнением определенных оболочек протонами (Z) или нейтронами (N), двойная магичность — одновременно теми и другими. Самая очевидная и яркая характеристика таких ядер — энергия первого (нижнего) уровня со спином $J^\pi = 2^+$. У магических ядер энергия таких состояний, намного превышает их энергию в соседних ядрах.

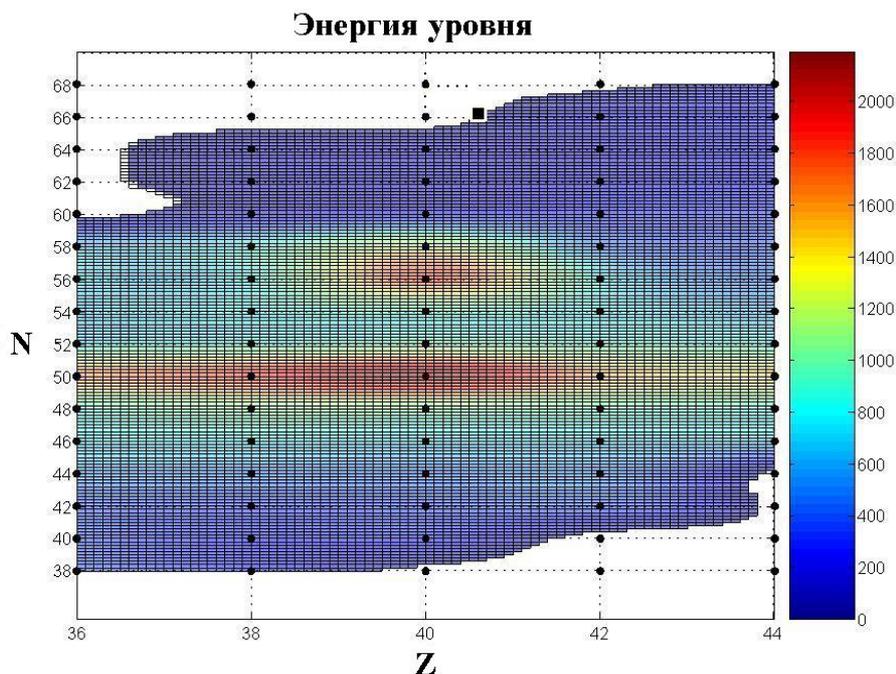


Рис. 5. Систематика энергий уровня с $J^\pi = 2^+$ в области чисел нуклонов $Z = 36 — 46$ и $N = 36 — 70$. Хорошо видны «великая стена» для классического магического числа $N = 50$ и «остров» (Z вблизи 40, N вблизи 56)— новое магическое ядро ^{96}Zr .

Тривиальная выборка из созданной БД по структуре ядер (<http://cdfc.sinp.msu.ru/services/ensdfr.html>) значений энергии уровня с $J^\pi = 2^+$ (Рис. 5) подтверждает существование классических магических ядер — в координатах $E—Z—N$ значения энергии уровня образуют «великие стены» вдоль магических значений Z и N , а дважды—магических — «башни» на пересечениях «стен». Вместе с тем эта выборка ясно выявляет новое существенное обстоятельство — кроме классических «великих стен» имеются «острова».

Это означает, что существуют дважды—магические ядра, которые проявляют магические свойства хотя ни число протонов ни число нейтронов в них не являются классическими магическими. Выборки из БД параметров формы и размеров ядер и других подтверждают магическое поведение таких ядер — меньшая деформация, меньшие размеры, характерные особенности в энергиях отделения нуклонов и т.п.

Анализ (опять же с помощью информации из БД) характеристик верхних (вблизи границы Ферми) оболочек и подоболочек таких ядер выявляет некоторую существенную общую закономерность структуры таких состояний, позволяющую объяснить существование новых дважды магических ядер (которых уже обнаружено достаточно много — ^{14}C , $^{14,24,28,40,48}\text{O}$, ^{30}Si , ^{30}S , ^{54}Ca , ^{96}Sr , ^{96}Zr): рассматривается наличие некоторого дополнительного взаимодействия между заполненными протонными и нейтронными оболочками, возможно связанного с эффектами протон—нейтронного спаривания.

Таким образом, простая выборка данных из БД открывает возможности изучения нового класса ядер — новых неклассических магических ядер.

4.4. Определение параметров гигантского дипольного резонанса (ГДР), получение которых в эксперименте сильно затруднено.

Известно, что теоретические модели, успешно справляясь с описанием энергии и амплитуды ГДР, занижают его ширину. Для ее описания необходимо привлечение дополнительных механизмов взаимодействия γ —квантов с ядрами. В 1987 г. было зарегистрировано открытие (№ 342, авторы — Б.С.Ишханов, И.М.Капитонов, В.Г.Неудачин, В.Г.Шевченко, П.Н.Юдин), предлагающее в качестве такого механизма конфигурационное расщепление резонанса: в процессах фоторасщепления ядра переходы с внешних оболочек, заполненных частично, происходят при меньших энергиях фотонов, чем переходы из внутренних заполненных оболочек.

Экспериментальное исследование такого расщепления — весьма сложная задача: необходимо одновременно изучать возбуждаемые состояния (сечения), состояния конечных ядер (спектры нуклонов), реально «работающие» оболочки (угловые распределения нуклонов). Однако, возможно использование лишь данных по сечениям реакций из упомянутой выше БД по ядерным реакциям. Так, например, поскольку ядра лития $^6,7\text{Li}$ представляют собой 4 нуклона на заполненной оболочке $1s$ (α —частица) и 2 в ^6Li (или 3 в ^7Li) нуклона на валентных $1p$ оболочках, переходы различаются по отношению к этой «сидящей внутри» α —частице — при фоторасщеплении ядра Li она или не затрагивается и в явном виде присутствует среди частиц —продуктов или разваливается и среди продуктов отсутствует. Исследования параметров расщепления ГДР

предельно упрощается: все реакции фоторасщепления разбиваются на 2 группы, в одной из которых α -частица присутствует среди продуктов реакции, а в другой отсутствует. Таким путем были впервые на основании экспериментальных данных оценены величины расщепления $\Delta E = 10.7$ и 10.8 МэВ (и соотношения компонент $R = 46.5/53.5$ и $77.0/23.0$) для изотопов ${}^{6,7}\text{Li}$, хорошо согласующиеся с предсказываемыми теорией значениями.

Таким образом, с использованием лишь «раскладывания по двум кучкам (с α -частицей и без нее)» данных о сечениях реакций на ядрах ${}^{6,7}\text{Li}$ возможно получение информации о ГДР, извлечение которой из экспериментальных данных сопряжено с огромными трудностями.

Работы проводились в Отделе электромагнитных процессов и взаимодействий атомных ядер НИИЯФ МГУ с поддержкой грантов РФФИ (№№ 99—07—90015, 03—07—90431, 05—07—90329, 09—02—00368, 13—02—00124), грантов Президента РФ, грантов поддержки ведущих научных школ, различных контрактов.

ЛИТЕРАТУРА:

1. N. Otsuka, S. Dunaeva, "International Network of Nuclear Reaction Data Centres" // INDC(NDS)-0401, IAEA, Vienna, Austria, 2010.
2. И.Н. Бобошин, В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов, В.В. Чесноков Материалы Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ: многоядерный компьютерный мир", Новороссийск, 24—29 сентября 2007 г., Изд-во Московского Университета, с.318—321.
3. В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Э.И. Кэбин, М.Е. Степанов Материалы Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ: суперкомпьютерные центры и задачи", Новороссийск, 20—25 сентября 2010 г., Изд-во Московского Университета, с.500—503.
4. И.Н. Бобошин, В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов, В.В. Чесноков Труды Десятой Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции», ОИЯИ, Дубна, 7—11 октября 2008 г., Издательство ОИЯИ, с.259—267.
5. В.В. Варламов, И.Н. Бобошин "Базы данных как метод исследования" // Природа. 2005. № 12. с.29.
6. В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов Труды 13-й Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее», Новороссийск, 19—24 сентября 2011 г., Изд-во Московского Университета, с.445—449.