

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В.Ломоносова

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

Сивер Андрей Степанович

Мониторинг оценок значений
фундаментальных физических постоянных
в системе *Mathematica*

Дипломная работа
студента VI курса
Сивера А.С.

Допущен к защите

Научный руководитель

зав.кафедрой теоретической фи-
зики, академик РАН,
д.ф.-м.н., проф. **А.А. Славнов**

к.ф.-м.н., с.н.с. ИФВЭ
В.В. Ежела

Москва 2003 г.

Содержание

1	Введение	1
2	Система ФФП в исследованиях и коммуникации	2
3	Сведения из математической статистики	7
3.1	Введение	7
3.2	Метод наименьших квадратов в NIST	9
3.3	Оценка уровня согласия теории и эксперимента	10
3.4	Мониторинг согласия теории и эксперимента	11
4	Краткий обзор технологии аналитических вычислений	13
5	Оценка и согласование ФФП в пакете PAREVAL	17
5.1	Основные результаты. Выводы. Обсуждение	21
6	Краткое описание пакета PAREVAL	24
6.1	Модуль для оценивания параметров моделей	24
6.2	Модуль для построения теоретических функций	28
6.3	Модуль сопровождения экспериментальных данных	31
6.4	Модуль представления результатов в системе \LaTeX	32

1 Введение

Работа выполнена в центре данных физики частиц КОМПАС в ИФВЭ. Основные цели работы:

- обоснование необходимости ведения работы по оценке и согласованию значений фундаментальных физических постоянных (ФФП) независимо от национального института стандартов США (NIST) – основного и единственного “издателя” ФФП;
- выяснение принципиальной возможности организации системы независимой периодической оценки и согласования значений ФФП в центре данных КОМПАС с последовательным включением в число ФФП параметров стандартной модели.

Идея работы возникла из осознания того факта, что система доступа к оцененным данным по ФФП через бумажные носители уже давно устарела, а новые решения, предложенные в NIST и другими производителями программных и информационных ресурсов, не обеспечивают удобства и надежности работы с ФФП, необходимые при высокоточных вычислениях.

В разделе 2 описания результатов работы приведена характеристика современной системы ФФП, разбираются ее недостатки и показана индуцированная ими некорректность использования ФФП в научном и образовательном сообществе. Показана необходимость модернизации системы согласования и представления ФФП. Приводятся аргументы к реализации системы оценки и согласования ФФП в системах компьютерной алгебры (КА).

Поскольку все вопросы, касающиеся сравнения теоретических моделей с реальностью принято относить к математической статистике [13], необходимые сведения приведены в разделе 3. В подразделе 3.4 представлено наше понимание того, в какой степени согласование ФФП означает также и согласование иерархии физических теорий.

Технология аналитических вычислений – достаточно новая технология, которая бурно развивается в наше время. В разделе 4 перечислены основные системы КА, которые известны в настоящее время, проведено позиционирование технологии КА в кругу других компьютерных технологий в контексте проблем оценки, согласования и использования ФФП, а также сделано несколько общих замечаний о компьютерных вычислениях.

Процедура оценки и согласования ФФП-1998, принятая в NIST и воспроизведенная в пакете PAREVAL, описана в разделе 5.

Основные результаты нашей переоценки содержатся в разделе 5.1.

Описание пакета PAREVAL приведено в разделе 6.

2 Система ФФП в исследованиях и коммуникации

Количественное описание характеристик объектов исследования в физике невозможно без использования размерных величин и выбора масштабов численного выражения наблюдаемых (измеряемых) величин.

Теоретические построения в физике опираются на свойства первичных физических объектов и процессов, которые предполагаются неизменными во всех физических явлениях, на приближенное описание которых претендуют теоретические построения. Количественные характеристики таких первичных объектов и процессов не могут быть вычислены или выведены в рамках тех теоретических построений, для которых они являются частью *понятийной базы*, и их величины в принятых шкалах “добываются” из экспериментов и наблюдений. Численные выражения характеристик первичных объектов называют физическими постоянными, или параметрами теории/модели.

Иногда первичные понятия одной теоретической схемы частично или полностью могут быть выведены (вычислены) из другого теоретического построения, с другими первичными понятиями и, соответственно, с другими физическими постоянными, которые могут быть выражены в других размерностях и шкалах. Так возникает набор функциональных соотношений между постоянными, то есть появляется иерархия (структура) на множестве наборов физических постоянных. Так как одни постоянные в этой иерархии зависят от других, то весь набор можно подразделить на базовые (фундаментальные) постоянные и выводимые.

Подразделение физических постоянных на фундаментальные и выводимые до некоторой степени условно и не умаляет прикладной значимости выводимых постоянных. Как правило, они более удобны для компактного представления соотношений и закономерностей в своей области применимости. Платой за это удобство является необходимость согласования величин постоянных и шкал, используемых в смежных предметных областях.

Физические постоянные — случайные величины, поскольку определяются с помощью теоретических формул, построенных для интерпретации наблюдений и экспериментов. Их численные значения должны становиться более точными по мере накопления и уточнения экспериментальных (наблюдательных) данных и уточнения теоретических выражений для наблюдаемых величин.

Однако может случаться так, что для некоторых теоретических построений, начиная с некоторого уровня точности, согласование значений фундаментальных постоянных невозможно: либо теоретические модели слишком грубы и имеют меньшую область применимости, либо новые экспериментальные данные противоречат старым. Возникновение такой ситуации и является сигналом для начала пересмотра как теоретических построений, так и методик экспериментальных исследований.

Таким образом, прогресс в развитии и уточнении экспериментальных и теоретических знаний невозможен без уточнения и согласования (мониторинга) системы численных представлений физических постоянных.

Мониторингом физических постоянных традиционно занимается прикладной раздел физики, специальный раздел Метрологии.

Основоположником современной метрологии фундаментальных физических постоянных, по-видимому, является Раймонд Бердж, опубликовавший в 1929 году обзор [1] “Probable Values of the General Physical Constants”, где он ясно и исчерпывающе сформулировал необходимость в Метрологии физических постоянных. Приведенная там аргументация еще более актуальна для современной ситуации в фундаментальной физике.

“Some of the most important results of physical science are embodied, directly or indirectly, in the numerical magnitudes of various universal constants, and the accurate determination of such constants has engaged the time and labor of many of the world’s most eminent scientists. Some of these constants can be evaluated by various methods. Each has been investigated by various persons, at various times, and each investigation normally produces a numerical result more or less different from that of any other investigation. Under such conditions there arises a general and continuous need for a searching examination of the most probable value of each important constant. The need is general since every physical scientist uses such constants. The need is continuous since the most probable value of to-day is not that of to-morrow, because of the never-ending progress of scientific research. These remarks appear to the writer so self-evident that the mere statement of them may be deemed superfluous. However, in spite of these facts, an investigation of the values of general constants in current use in the literature reveals a surprising lack of consistency, both in regard to the actually adopted values and to the origin of such values. This is probably due to the fact that it is almost impossible to find a critical study of the best values, sufficiently up-to-date to be really reliable, and sufficiently detailed to explain the inconsistencies found among older tables.

The situation is much better in the case of selected groups of constants. Thus the best value of the atomic weight of each element is determined annually by certain atomic weight committees, and the need of such a list of atomic weights is obvious to every chemist. There is certainly a similar need in the case of the even more important constants such as the velocity of light, the charge of the electron, the Planck constant h , etc. In attempting to respond to this need, the writer has become only too well aware of the intrinsic difficulties involved, but at the same time he has become increasingly convinced of the existence of the need itself. The present investigation was undertaken only at the express request of others, and the results given here should be considered more as a presentation of the situation than as a final solution of the problem. To obtain a satisfactory and thoroughly reliable judgment in such matters, there is required the unbiased cooperation of many persons situated in scientific laboratories throughout the world”.

(Extracted from the introductory part of the paper [1]).

Благодаря усилиям экспертов многих метрологических институтов, систематиков NIST и международной координации комиссии КОДАТА, мы, *по всей видимости*, имеем более или менее надежные процедуры сопровождения объединенной системы ФФП, их периодически уточняемых численных значений, погрешностей и корреляций.

Мы использовали выражение “*по всей видимости*” потому, что несмотря на наличие большого числа государственных и международных документов о правилах и стандартах в представлении статистических и экспериментальных данных в официальных документах¹, есть явное противоречие между правилами/стандартами и практикой обмена научными данными в прошлой и настоящей научной коммуникационной среде.

Пример такого противоречия — недостаток внимания “производителей” ФФП из NIST и координаторов комиссии КОДАТА по оценке и сертификации данных о ФФП к качеству конечного представления данных в официальных публикациях и даже в электронной форме. Представленные данные по ФФП:1998 неполны и неточны, как будет показано в дальнейшем.

Другой пример упомянутого противоречия — игнорирование корреляций погрешностей ФФП во всех перепечатках значений ФФП в авторитетных информационных ресурсах: руководствах, учебниках, монографиях, обзорах и научных программных пакетах (см., например, [4] – [10] и комментарии к ним).

Начиная с выпуска ФФП-1998, научное сообщество получило реальный и прямой доступ к корреляциям погрешностей ФФП. В приведенной ниже таблице можно заметить, что корреляции между погрешностями некоторых универсальных ФФП слишком велики и игнорировать их в высокоточных вычислениях опасно.

К сожалению, как можно проверить, корреляционная матрица, представленная на сайтах NIST и КОДАТА, частично воспроизведенная в публикации [2] (см. Таблицу XXV на стр. 453), не является положительно полуопределенной, что противоречит определению корреляционной матрицы. Глядя на коэффициенты корреляции NIST, можно заметить, что они округлены слишком “жестко.” Формат чисел подсказывает, что они были округлены единообразно и независимо (то есть игнорируя критические свойства матриц ковариаций и корреляций). Из учебников по численным вычислениям известно,

Таблица 1: Список некоторых рекомендованных ФФП КОДАТА:1998

Название ФФП	Symb.[unit]	Значение(погр.) $\times 10^x$	Корреляции			
элементарный заряд	e [C]	$1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19}$	e	h	m_e	m_p
постоянная Планка	h [J s]	$6.626\,068\,76(52) \times 10^{-34}$	0.999			
масса электрона	m_e [kg]	$9.109\,381\,88(72) \times 10^{-31}$	0.990	0.996		
масса протона	m_p [kg]	$1.672\,621\,58(13) \times 10^{-27}$	0.990	0.995	1.000	

что округление коррелированных величин — предмет специального рассмотрения (см., например, [18], стр. 499). Средние значения, стандартные отклонения и коэффициенты корреляций нельзя округлять независимо. Независимое округление может привести к “катастрофическим” нарушениям в связях средних значений, стандартных отклонений и формы *эллипсоида рассеивания*: средние значения могут “выйти” за пределы *эллипсоида рассеивания*, эллипсоид рассеивания может стать гиперболоидом после независимого округления коэффициентов корреляций.

¹Мы, однако, не смогли найти каких-либо официальных документов стандартизирующих процедуры округления значений **совместно измеренных или оцененных величин** — средних значений, стандартных отклонений и их корреляций.

Примером такой катастрофы с ФФП-1998, рекомендованных для использования в науке и технологии, является отрицательная вариация для постоянной Ридберга, вычисленная по уравнению $R_\infty = \alpha^2 m_e c / 2h$ [11]. Если эта трудность не вызвана опечатками в знаках некоторых коэффициентов корреляций, она, вероятнее всего, есть следствие несогласованности, вызванной округлением в выходных данных ФФП-1998.

Если мы правы в том, что объясняем это искажение значений коэффициентов корреляции недопустимым округлением, то тогда нельзя исключать возможность аналогичного искажения как средних значений, так и дисперсий. Для прояснения ситуации необходимо независимо воспроизвести всю процедуру уточнения ФФП, используемую экспертами NIST.

Современная система согласованных значений ФФП не может быть получена путем использования данных непосредственных измерений таких величин, как заряд электрона, постоянная Планка и др., так как точность этих определений, как правило, невелика [12]. В результате точных экспериментов в настоящее время получают численные значения некоторых комбинаций физических ФФП, например μ_{μ^+}/μ_p или $\sqrt{8\alpha/\mu_0 c \hbar}$, которые можно измерить с большой точностью. Затем, используя тот или иной метод обработки данных, например метод наименьших квадратов (МНК), получают оценку величин ФФП.

Полная процедура уточнения значений ФФП по процедуре КОДАТА:1998 не может быть выполнена “вручную.” Для решения этой задачи необходимым условием является применение современных компьютерных методов и информационных технологий ([2], стр. 357).

Одной из целей нашей работы как раз и является выяснение и формулирование требований к методологии системы мониторинга ФФП в процессе изучения и воспроизведения “передовой” на текущий момент технологии NIST.

Нам представляется необходимой реализация в будущей системе (как минимум) следующих требований высокого уровня. Система должна включать:

- согласованный набор методов для выделения параметров теорий и их представления (где это возможно) в терминах “канонических” ФФП;
- базу данных всех измеренных к настоящему времени величин, которые могут использоваться для оценки параметров;
- базу наиболее точных на текущий момент теоретических формул для этих величин, записанных в едином стандарте компьютерного представления формул;
- набор методов для проверки статистических гипотез, обнаружения и оценок возможных систематических ошибок моделей и методов;
- подсистему подготовки базы надежных данных по ФФП (после каждой сессии переоценки) в разных представлениях, в том числе пригодных для компьютерных высокоточных вычислений;

- подсистему полуавтоматического поиска и накопления новой научной информации (релевантной проблеме оценки и согласования ФФП) и подготовки ее к запуску очередной сессии переоценки ФФП.

Процедуру периодической статистической оценки степени согласия теоретической модели с экспериментальными (наблюдательными) данными мы называем, для краткости, мониторингом модели. Мониторинг модели невозможен без сопровождения соответствующей базы экспериментальных данных и сопровождения библиотеки теоретических формул. Под “сопровождением” мы понимаем периодическое изменение (исправление ошибок, дополнение и модификация) на основе новых научных работ, базы данных теоретических формул и релевантных им экспериментальных данных. Каждая итерация оценки степени согласия теории и эксперимента приводит к переоценке параметров теории, т.е. мониторинг модели — это и “мониторинг оценок значений параметров теоретической модели”.

Система, эскиз которой описан выше, все еще не создана. Контуры такой системы просматриваются в системе, используемой в NIST, однако описанные выше и в разделе 5 недостатки ФФП, производимых в NIST, показывают, что она не удовлетворяет важной части описанных выше требований.

По-видимому, наиболее подходящей средой для макетирования системы являются уже функционирующие системы аналитических вычислений (или компьютерной алгебры), см. например *Mathematica* [7], *Maple* [24], *Maxima* [10] где уже предусмотрена возможность работы (правда ограниченной) с ФФП.

Мы использовали технологию компьютерной алгебры и создали пакет PAREVAL в системе аналитических вычислений *Mathematica*, в который были внедрены методики и данные, разработанные и выбранные экспертами NIST и рекомендованные CODATA.

Отладка, освоение и развитие пакета PAREVAL производились в процессе решения задачи воспроизводства результатов NIST:1998. При этом в дополнение к целям работы, описанным во введении и выше в формулировках требований к системе, мы ставили следующие подцели:

- Проверка результатов согласования ФФП NIST/CODATA:1998. Если нам удастся воспроизвести результаты NIST с использованием данных и методик из [2], то это значит, что они тоже использовали входные данные в том виде, в котором они их представили в публикации. Если это так, то значения ФФП:1998, по-видимому, сильно смещены. Однако здравый смысл заставляет сомневаться в таком исходе. Причина сомнения кроется в том, что матрица корреляций погрешностей входных экспериментальных данных, приведенная в обзоре [2], не является положительно определенной, чего не должно быть по определению матрицы корреляций. Такой конфуз сразу в двух респектабельных организациях сомнителен.
- Проверка принципа “воспроизводимости” (traceability), который был упомянут в обзоре [2]. Это один из основных принципов компьютерной системы *мониторинга*.

- Изучение методик NIST/CODATA по обработке экспериментальных данных, выбору экспериментальных данных, которые будут использоваться для процедуры переоценки, методики переоценки ФФП, которая, как предполагается, должна иметь достаточно широкую область применимости. Было бы неразумно не использовать этот опыт, который накапливался уже не менее полувека.
- Построение макета базы экспериментальных данных и соответствующих теоретических формул в системе компьютерной алгебры *Mathematica*. Проверка пригодности системы *Mathematica* как среды для построения вышеописанной системы (включающей в себя модуль для оценивания параметров теоретической модели, базы данных теоретических формул и экспериментальных данных, а также систему для представления результатов в системе L^AT_EX и систему оптимизации вычислений).

3 Сведения из математической статистики

3.1 Введение

Теория вероятностей обычно понимается как математическая дисциплина, в рамках которой формулируются и анализируются модели соотношений между частотами разных событий, которые наблюдаются эмпирически [14].

Типичная задача математической статистики состоит в том, чтобы “оптимизировать метод проб и ошибок”, т.е. из результатов наблюдений, сформулированных в терминах частот, вывести метод выбора действий, при которых частота ошибок была бы, по возможности, наименьшей.

Можно сказать по другому [15]. В теории вероятностей мы, зная природу некоторого явления, выясняем, как будут себя вести (как распределены) те или иные изучаемые нами характеристики, которые можно наблюдать в экспериментах. В математической статистике наоборот — исходными являются экспериментальные данные (как правило это наблюдения над случайными величинами), а требуется вынести то или иное суждение или решение о природе рассматриваемого явления. Таким образом, мы соприкасаемся здесь с одной из важнейших сторон человеческой деятельности — процессом познания. Этот вопрос имеет непосредственное отношение к проблеме “искусственного интеллекта” и к созданию систем обработки знаний (см. в разделе 4).

Математическая статистика изучает методы, которые позволяют отвечать на вопрос, соответствует ли практика, представленная в виде результатов экспериментов, данному гипотетическому представлению о природе явлений или нет [13].

В физике элементарных частиц как ни в какой другой области науки, величины, подлежащие определению из экспериментов, удалены от величин, непосредственно измеряемых макроприборами [17]. Эта область экспериментальной физики в изобилии дает, казалось бы, парадоксальные примеры определения разности масс частиц ($\sim 6 \cdot 10^{-39}$ г) без их взвешивания, определения временных интервалов ($\sim 10^{-23}$ сек) и пространственных промежутков ($\sim 10^{-15}$ см) без непосредственного измерения времени и пространства.

Научно обоснованные выводы в этой области экспериментальных исследований были бы просто невозможны без привлечения всего арсенала математической статистики. Можно даже утверждать, что проникновение в микромир стало возможным в XX веке не только благодаря развитию техники, но и созданию новых методов математической статистики. Подобно тому, как астрономия и геодезия в прошлом представляли основные области для применения классической теории ошибок, так и физика элементарных частиц и атомного ядра в настоящее время для многих разделов математической статистики стала основной ареной апробации их практического использования в научных исследованиях.

Обычно чем точнее эксперимент, тем более сложной аппаратуры он требует и дороже обходится [18]. Однако хорошо продуманная математическая обработка результатов в ряде случаев позволяет выявить и частично исключить грубые ошибки (промашки) экспериментов и это может оказаться не менее эффективным, чем использование более дорогой и точной аппаратуры.

Ошибки эксперимента условно разбивают на систематические, случайные и грубые. Систематические ошибки — это те, которые не меняются при многократном повторении данного эксперимента. Примерами таких ошибок являются пренебрежение выталкивающим действием воздуха при точном взвешивании или измерение тока гальванометром, нуль которого неправильно установлен.

Различают три вида систематических ошибок.

1. Ошибки известной природы, величину которых можно определить; их называют поправками. Так, при точном взвешивании рассчитывают поправку на выталкивающее действие воздуха и прибавляют ее к измеренной величине. Внесение поправок позволяет существенно уменьшить (или даже практически исключить) ошибки такого рода.

Заметим, что иногда расчет поправок бывает самостоятельной сложной математической задачей. Например, некорректно поставленная задача о восстановлении переданного радиосигнала по принятому является, по существу, нахождением поправки на искажение принимающей аппаратуры.

2. Ошибки известного происхождения, но неизвестной величины. К ним относится погрешность измерительных приборов, определяемая их классом точности. Для таких ошибок обычно известна только верхняя граница, а как поправки их учесть нельзя.
3. Ошибки, о существовании которых мы не знаем. Например, используется прибор со скрытым дефектом или изношенный, фактическая точность которого существенно хуже, чем обозначено в техническом паспорте.

Для выявления систематических ошибок всех видов обычно заранее отлаживают аппаратуру на эталонных объектах с хорошо изученными свойствами.

Случайные ошибки вызываются большим числом факторов, которые при повторении одного и того же эксперимента могут действовать по-разному, причем учесть их влияние практически невозможно. Например, при измерении длины предмета линейка может быть неточно приложена, взгляд наблюдателя может падать не перпендикулярно шкале и т.д.

При многократном повторении эксперимента результат вследствие случайной ошибки будет различным. Однако такое повторение и соответствующая статистическая обработка позволяют, во-первых, определить величину случайной ошибки и, во-вторых, уменьшить ее. Повторяя измерение достаточное число раз, можно уменьшить случайную ошибку до требуемой величины (целесообразно уменьшать ее до величины 50-100% от систематической ошибки).

3.2 Метод наименьших квадратов в NIST

Здесь мы приводим общее описание МНК, используемого для оценки и согласования ФФП в NIST, следуя тексту и обозначениям [2] (см. также [5]).

Предположим, что у нас есть N измеренных (а в некоторых случаях вычисленных) значений q_i различных величин со стандартными отклонениями $u_i = u(q_i)$ и ковариациями $u_{ij} = u(q_i, q_j)$. Например, q_1 — измеренное значение аномального магнитного момента электрона a_e , q_2 — измеренное значение сверхтонкого расщепления в мюонии. Эти данные называются *входными* данными или *наблюдаемыми данными*.

Величины $z_i, i = 1, \dots, M$, где $M \leq N$, называемые подгоняемыми базовыми постоянными, выбираются так, чтобы каждое входное данное q_i выражалось как функция f_i от одной или нескольких подгоняемых постоянных посредством N *наблюдаемых уравнений* (*observational equations*). В дальнейшем мы будем использовать определения подгоняемые, уточняемые, согласуемые постоянные как эквивалентные КОДАТА термину — adjusted constants.

$$q_i \doteq f_i(z_1, z_2, \dots, z_M), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

Например, z_1 может быть постоянной тонкой структуры α , а z_2 — постоянной Планка h . Выбор уточняемых ФФП обычно не единственный; однако они должны быть выбраны так, чтобы ни одна из них не могла быть выражена как функция других и входила не менее чем в два наблюдаемых уравнения. Знак равенства \doteq обозначает тот факт, что, вообще говоря, левая часть уравнения (1) не равна правой.

Для того чтобы “подогнать” ФФП методом наименьших квадратов, нужно найти минимум функции (в пространстве уточняемых ФФП)

$$\chi^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq N} (q_i - f_i(z_1, \dots, z_M)) \cdot W_{ij} \cdot (q_j - f_j(z_1, \dots, z_M)), \quad (2)$$

где W_{ij} — матрица весов, равная $W = V^{-1}$, где $V_{ij} = u_{ij}$ — матрица ковариаций исходных данных.

Найдя минимум функции χ^2 , мы найдем наилучшие значения ФФП z_1, \dots, z_M и таким образом проведем их оценку.

Если экспериментальные данные независимы, то их матрица корреляций равна единичной матрице, а матрица ковариаций равна $V_{ij} = \delta_{ij}\sigma_i\sigma_i$, где σ_i — суммарная ошибка q_i .

Для того чтобы найти матрицу ковариаций базовых ФФП, то есть оценку матрицы ошибок, можно вычислить обратную матрицу вторых производных в “точке” минимума:

$$u[z_i^0, z_j^0] = 2 \cdot \left\| \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial z_i \partial z_j} \Big|_{z^0} \right\|^{-1} \quad (3)$$

Для того чтобы оценить меру согласованности входных данных, вычисляют отношение Берджа:

$$R_B = \sqrt{\chi^2 / (N - M)}.$$

Если функции распределения вероятностей каждого экспериментального значения предполагаются нормальными, со средними значениями q_i и ковариациями u_{ij} , то ожидаемое значение $\chi^2 = \nu = N - M$ со стандартным отклонением $\sqrt{2\nu}$. Таким образом, значение коэффициента Берджа, большее чем $1 + \sqrt{2/\nu}$, будет означать возможную несогласованность данных.

В разделе 3 было отмечено, что одним из видов систематических “ошибок” являются “ошибки” известной природы, но неизвестной величины. Поскольку погрешности этих поправок, как правило, можно оценить, то иногда целесообразно включить эти поправки в процедуру наименьших квадратов как *подгоночные* ФФП и таким образом оценить и эти величины. Такие дополнительные *подгоночные* ФФП как, например, теоретические неопределенности в формулах для уровней энергии атомов водорода и гелия δ_{nLj}^X , использовались в процедуре уточнений ФФП:1998.

3.3 Оценка уровня согласия теории и эксперимента

Из экспериментальных данных можно не только извлекать неизвестные значения тех или иных параметров, но и делать заключения о валидности теории/гипотезы или о предпочтительности одной из альтернативных гипотез [17].

Гипотеза, которая может быть сформулирована без каких-либо предположений, называется простой гипотезой. Совокупность гипотез, состоящая из более чем одной простой гипотезы, называется сложной гипотезой. Типичным примером сложной гипотезы является гипотеза, содержащая свободный параметр.

Предположим, что нужно проверить гипотезу H_0 (называемую нулевой гипотезой) по отношению к противоположной гипотезе H_1 на основе некоторых экспериментальных наблюдений. Пусть X будет некоторой функцией наблюдений, называемой проверочной статистикой, а W — пространством всех возможных значений. Разделим пространство W на критическую w и допустимую $W - w$ области, такие, что если функция наблюдений X попадает в область w , то это означает, что нулевая гипотеза неверна. Таким

образом, выбор критерия проверки H_0 сводится к выбору проверочной статистики X и критической области w .

Обычно размер критической области выбирается таким, чтобы получить желаемый уровень значимости α (величина критерия), определенный как вероятность попадания X в w , когда гипотеза H_0 верна: $P(X \in w|H_0) = \alpha$. Таким образом, α — вероятность того, что H_0 будет отброшена, даже если она в действительности верна.

Полезность критерия проверки зависит от его способности отделить данную гипотезу от противоположной гипотезы H_1 . Мерой этой полезности служит мощность критерия, определенная как вероятность $1 - \beta$ попадания X в критическую область, если H_1 верна $P(X \in w|H_1) = 1 - \beta$. Иными словами, β — вероятность попадания X в допустимую область, если верна противоположная гипотеза $P(X \in W - w|H_1) = \beta$.

	На самом деле: H_0	На самом деле: H_1
$X \in W - w$ (принята H_0)	Вероятность $1 - \alpha$	Вероятность β
$X \in w$ (принята H_1)	Вероятность α	Вероятность $1 - \beta$

Часто возникает необходимость проверить совместность экспериментального и теоретического значений одной и той же физической величины. Допустим, заданы экспериментально измеренное значение X_e с суммарной ошибкой σ_e и теоретическое значение X_t со стандартным отклонением σ_t , в которое включены ошибки значений ФФП и, возможно, систематическая ошибка метода вычисления. Можно проверить гипотезу о равенстве этих двух случайных величин [16]: $H_0 : \bar{X}_e = \bar{X}_t$ отвергается на уровне значимости α , если

$$|\bar{X}_e - \bar{X}_t| / \sqrt{\sigma_e^2 + \sigma_t^2} > u_\alpha,$$

где u_α определяется из уравнения $\alpha = \text{erf}(\frac{1}{\sqrt{2}}u_\alpha/\sqrt{\sigma_e^2 + \sigma_t^2})$, где erf — стандартная функция ошибок. В этом простом случае вероятность попадания $Z = X_e - X_t$ в допустимую область, если верна противоположная гипотеза, зависит от уровня значимости так: $\beta = 1 - \alpha$.

3.4 Мониторинг согласия теории и эксперимента

В разделе 3.3 говорилось о том, как проверить совместность теоретического значения X_t с экспериментальной величиной X_e . При анализе процедуры уточнения ФФП-1998 можно попробовать проверить, как теоретические функции $f_i(\{z_j\})$, которые использовались для оценки $\{z_j\}$ согласуются с экспериментальными данными $\{q_i\}$ и их ковариациями $u[q_i, q_j]$, $i, j = 1, \dots, N$ [2].

Для этого выделим некоторую $f_k(z_1, \dots, z_M)$ и проведем оценку ФФП без нее (и, соответственно, без q_k и $u[q_k, q_i]$, $i = 1, \dots, N$). Затем сравним f_k , вычисленную по найденным значениями ФФП, с экспериментально измеренным значением q_i , учитывая погрешность $\sigma[f_i]$, возникающую от погрешностей ФФП, согласно закону о переносе погрешностей, и погрешность $\sigma[q_i] = \sqrt{u[q_i, q_i]}$.

Функции $f_i(\{z_j\})$, $i = 1, \dots, N$ представляют следствия разных физических теорий, но выраженных в терминах ФФП. Поэтому проверка на совместность теоретических формул $f_i(\{z_j\})$ с экспериментальными данными $\{q_i\}$ не дает оснований подвергать сомнению какую-то одну конкретную теорию.

Далее опишем, как можно было бы оценить согласованность экспериментальных данных с теоретическими выражениями, которые входят в $f_i(\{z_j\})$ как подвыражения, и которые получены как следствия одной теории X.

Допустим, мы хотим проверить, как теория X согласуется с экспериментальными данными $\{q_i\}$. Эти данные, как обычно, рассматриваются как функции базовых ФФП: $\{q_i\} \doteq f_i(\{z_j\})$, $i = 1, \dots, N$, где $\{z_j\}$, $j = 1, \dots, M$. Предположим, мы знаем, что все остальные теории, которые используются для вывода $f(\{z_j\})$, более достоверны, чем теория X.

Также предположим, что в каждой $f_i(z)$ можно выделить подвыражение, полученное как следствие X, то есть:

$$f_i(\phi_i(z), z) \doteq q_i,$$

Допустим также, что есть наблюдаемые величины $\{q_{i_k}\}$, которые не зависят от X, то есть соответствующие $\phi_{i_k}(z) = 0$, причем их число $K > M$. Тогда из этих наблюдаемых можно извлечь значения ФФП, например по методу наименьших квадратов:

$$f_{i_k}(z) = q_{i_k} \implies \{z_{0;j}\}.$$

Допустим, наконец, что оставшиеся функции таковы, что ϕ_{m_j} можно разрешить следующим образом:

$$\phi_{m_j}(z) = \Phi_{m_j}(z) + q_{m_j}.$$

Тогда по тому, как $\phi_{m_j}(\{z_{0;j}\})$ согласуются с соответствующими $\Phi_{m_j}(\{z_{0;j}\}) + q_{m_j}$, по критерию, изложенному в разделе 3.3, можно судить о том, насколько хорошо X согласуется с экспериментальными данными.

Частный случай вышеизложенного метода использовался в книге [12] для проверки выводов квантовой электродинамики. Суть этой проверки состояла в следующем. Из полученных к тому времени экспериментальных данных, для которых вывод соответствующих теоретических выражений не опирался на квантовую электродинамику, удалось с большой точностью “извлечь” величину постоянной тонкой структуры $\alpha(\text{WQED})$. Однако, помимо этих экспериментальных данных, была еще группа данных, теоретические выражения для которых содержат α и могли быть получены только в квантовой электродинамике: аномальный момент электрона a_e и мюона a_μ , сверхтонкое расщепление в мюонии $\Delta\nu_{Mu}$. Сравнивая теоретические выражения для этих наблюдаемых величин, вычисленные с $\alpha(\text{WQED})$, с соответствующими экспериментальными величинами, можно проверить выводы квантовой электродинамики.

4 Краткий обзор технологии аналитических вычислений

Широко известно мнение, что единственными операциями, которые выполняет компьютер являются сложение и простейшие логические операции. Компьютер обычно представляют как машину для численных вычислений [18], как более совершенный прибор по сравнению с арифмометром, арифметической линейкой и калькулятором, отличающийся от них лишь высокой скоростью вычислений и малым временем на обработку "единичной" операции.

Стандартное на сегодняшний день использование ПК состоит в программировании той или иной формулы на языке высокого уровня, например, Си, Фортран или Паскаль, и в реализации тех или иных алгоритмов, в которых участвует эта формула. Однако та же формула может рассматриваться как математический объект в системе символьной алгебры, который допускает формальные преобразования, такие как, например, дифференцирование, интегрирование и разложение в ряд.

Компьютерной алгеброй называется технология символьных преобразований математических формул цифровыми компьютерами. Долгое время эту дисциплину называли по-разному: то символьными и алгебраическими вычислениями, то символьными и алгебраическими преобразованиями и, наконец, остановились на названии компьютерная алгебра [19]. В качестве примеров современных систем КА можно назвать *Mathematica* ("5", 2003) [21], *MAXIMA* ("5.9.0", 2003) [22], *REDUCE* ("3.7", 1999) [23], *Maple* ("9.0", 2003) [24], *muPAD* ("2.5", 2002) [25] (см. также [34]). Эти системы позволяют решать настолько широкий класс задач, что их стали называть КА общего назначения ("General purpose computer algebra system"). Существуют также специализированные КА, созданные для решения проблем из специальной области, например, *FORM* [26]. И, наконец, существуют библиотеки для языков программирования, дополняющие возможности языка элементами технологии КА, например, *GiNaC* [27] и *SymbolicC++* [19].

Физика элементарных частиц - одна из важнейших областей применения КА, постоянно эксплуатирует технологию КА [35]. Отметим, что эта область физики традиционно является первой областью применения новых методов компьютерных вычислений, что дает и "обратную связь" к развитию самих методов.

Отметим, что вычисления в КА принципиально отличаются от вычислений в спец. программах таких как [36], [37], (см. также [40]).

То что технология КА качественно отличается от технологии численных вычислений можно понять следующим образом. При численных вычислениях на "вход" программе подается конечный набор чисел, которые преобразуются, и на "выходе" получается другой набор чисел. В технологии КА на "вход" подается (и на "выходе" получается) набор математических выражений. Уже при таком подходе понятно, что технологию численных вычислений можно понимать как частный случай технологии КА, поскольку числа можно понимать как простейший случай математического выражения. На практике системы КА могут использоваться как "настройка" над системой, в которой производят-

ся численные вычисления. Например, в системах Maple и *Mathematica* можно провести аналитические вычисления до того момента, пока все ответы выражаются в элементарных функциях, а затем автоматически составить программу для численного счета на языке высокого уровня (система КА \rightarrow язык программирования), например, для Фортрана или Си.

Как известно, в любом физическом исследовании есть 4 источника погрешности результата [18]:

- 1) Математическая модель;
- 2) Исходные данные;
- 3) Приближенный метод;
- 4) Округления при вычислениях.

Погрешность математической модели связана с физическими допущениями.

Исходные данные зачастую неточны: например, это могут быть экспериментально измеренные величины, которые обязательно имеют систематическую составляющую “ошибки” величин, или численно вычисленные величины, которые, как правило, имеют конечную точность.

Погрешность метода связана с тем, что точные оператор заменяются приближенным. Например, заменяют интеграл суммой, производную – разностью, функцию – многочленом или строят бесконечный итерационный процесс и обрывают его после конечного числа итераций. Методы строятся обычно так, что в них входит некоторый параметр; при стремлении параметра к определенному пределу погрешность метода стремиться к нулю, так что эту погрешность можно регулировать.

Вычисления как на бумаге, так и на ЭВМ выполняют с определенным числом значащих цифр. Это вносит в ответ погрешность округления, которая может накапливаться в процессе вычислений.

Сделаем два замечания об особенностях вычислений с величинами имеющими погрешность. Любая функция от случайных величин является случайной величиной, которую можно характеризовать средним значением и стандартным отклонением. Поэтому желательным свойством всех вычислительных схем, систем и пакетов, является автоматическое вычисление дисперсии и, возможно, поправок к среднему значению, возникшему из-за “негауссовости” функций распределения “входных” случайных данных (напомним, что среднее от функции случайных величин не всегда равно значению функции от средних значений величин, от которых она зависит). Отметим, что вычисление дисперсии результата вычислений по той или иной схеме, или в том или ином пакете может быть самостоятельной задачей, сравнимой по сложности с вычислением результата. Однако скрупулезное научное исследование требует таких вычислений.

Второе замечание касается процедур принятия решения. Рассмотрим конкретный пример – задачу о нахождении глобального минимума функции одной переменной, например $\chi^2(x; a)$, где x – переменная, a – параметр.

Из рисунка видно, что глобальный минимум $\chi^2(x; 0)$ расположен с точке $x=0$. Допустим теперь, что параметр a – случайная величина с $\bar{a} = 0$. С определенной долей вероятности, отличной от нуля, a может принять значение $\bar{a} + \delta a$. В этом случае, с той же

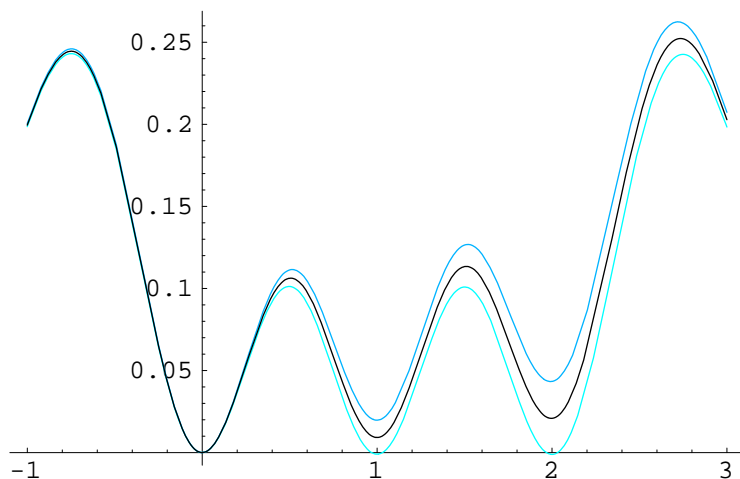


Рис. 1: $\chi^2(x; 0)$ – темная линия; $\chi^2(x; 0 + \delta a)$ – светлая (синяя) линия; $\chi^2(x; 0 - \delta a)$ – светлая (голубая) линия

самой степенью вероятности, как видно из рисунка, глобальный минимум $\chi^2(x; \bar{a} + \delta a)$ расположен либо в точке $x=2$, либо в точке $x=1$, либо в обеих точках. Таким образом, для нахождения глобального минимума $\chi^2(x; a)$ нужно использовать характеристики случайной величины a . Кроме того, ответ может носить вероятностный характер. Этот пример можно обобщить на случай любой процедуры принятия решения, на “вход” которой подают стохастические параметры.

Опишем вкратце другие современные компьютерные технологии и сравним их с технологией КА.

Переход от технологии численных вычислений к технологии КА можно рассматривать как повышение "интеллектуальности" компьютерных систем. Следующий уровень – иногда называют "концептуальным программированием" [28]. Это подход к решению задач, при котором ЭВМ применяется уже на этапе постановки задачи, а не только на этапе кодирования и выполнения программы. Здесь работают с понятиями, описывая их и далее используют описанные понятия для формулировки решаемых задач. О задаче и о пути ее решения надо говорить в терминах, которыми пользуются специалисты той области, где она возникает. Это хорошо понятно каждому человеку, говорящему о своей специальности. Существенно, что по достаточно точным описаниям задач ЭВМ автоматически составляет программы их решения. Вполне естественно, что такая программа должна быть сформулирована для вычисления на языке КА (система КП \rightarrow язык КА), аналогично тому как системы КА автоматически строят программы для универсальных языков программирования для численного счета.

Последний уровень "интеллектуальности" о котором заходит речь в работах специалистов по "искусственному интеллекту" "технология обработки знаний" [29], [30], [31], [32] (см. также [33]). Аналогично предыдущим двум уровням, результатом работы системы должна быть программа для языка программирования концептуального программирования (система ОЗ \rightarrow язык КП).

Можно предположить, что при построении любой вычислительной системы в научном исследовании можно выделить все четыре уровня "интеллектуальности" программных систем и такое разбиение должно быть сделано для повышения эффективности разработки, использования и модернизации новых систем.

Повышение "интеллектуальности" за счет специализации языка описания задачи – принципиальный момент. Ни одна из попыток построить искусственный интеллект или хотя бы систему, решающую задачи из разных областей знаний, до сих пор не увенчалась успехом. Поэтому разработку новых вычислительных ресурсов должны осуществлять специалисты в той области, систему для которой нужно построить. Либо же разработку должна вести группа людей: специалисты в области информационных технологий, специалисты в области "ИИ", и специалисты из области знаний, систему для которой нужно построить.

Мы использовали технологию КА на базе системы аналитических вычислений *Mathematica* для построения системы оценки значений фундаментальных констант (по процедуре КОДАТА:1998). Эта система будет использоваться как прообраз для построения технологии мониторинга значений фундаментальных констант.

5 Оценка и согласование ФФП в пакете PAREVAL

Наши знания о фундаментальных законах материального мира отражаются в уравнениях физики, в которых фундаментальные ФФП, например скорость света, масса электрона и протона, постоянная Планка, являются численными коэффициентами [12].

Хорошо известно, что многие разделы физики, на первый взгляд далекие друг от друга, в действительности тесно взаимосвязаны. Это единство физики подтверждается, например, широкой областью применения измеренного значения e/h , полученного на основании эффекта Джозефсона в сверхпроводящих структурах [38]. Можно сказать по-другому. Если фундаментальная теория претендует на описание наблюдаемой действительности, она должна, в конечном итоге, предоставлять наблюдаемые величины, записанные в терминах ФФП, не в зависимости от природы объектов, которые рассматриваются в ней.

Отметим, что относительная точность значений ФФП — это характеристика уровня научно-технического развития цивилизации. С каждым переоцениванием ФФП, точность их значений растет; например после уточнения по процедуре NIST/КОДАТА:1998, погрешность значений ФФП уменьшилась в 5-10 раз.

Проблема ФФП — проблема, которая стоит на пересечении теории и эксперимента, и состоит из двух разных проблем:

- 1) получение самосогласованного набора значений ФФП;
- 2) Анализ через значения ФФП того, как современные теории соотносятся с экспериментами и между собой.

Изучая проблему ФФП мы можем оценить “самосогласованность” и “полноту” современного знания о Природе. Выводы о “самосогласованности” можно сделать, путем решения вышеупомянутой проблемы 2).

Малейшая *несогласованность* системы ФФП [39], если она не может быть объяснена погрешностями эксперимента или грубыми ошибками, может потребовать коренного пересмотра наших представлений о закономерностях в природе. Отметим, однако что при этом факт несогласованности, который, очевидно, будет зависеть от уровня достоверности, должен быть определен.

Приведем пример того, как при оценивании ФФП был сделан вывод о несоответствии теории и эксперимента.

В книге “Фундаментальные константы и квантовая электродинамика” [12] было высказано обоснованное мнение, исходя из анализа имеющихся у авторов данных, о неудовлетворительном состоянии согласованности КЭД теории с экспериментом. Однако, как уже было замечено в предисловии редактора перевода книги, новые на то время работы позволили “привести во вполне удовлетворительное согласие теоретические и экспериментальные результаты”.

Укажем на особенности работы с ФФП. Очевидно, что ФФП — случайные величины, характеризующиеся средним значением и стандартным отклонением. Это утверждение не зависит от способа оценивания значений ФФП, поскольку значения ФФП либо извлекаются из результатов экспериментов, которые обычно имеют конечную систематическую ошибку, либо вычисляются как функция других ФФП, которые в свое время

были извлечены из экспериментальных данных. Современная система согласованных значений ФФП получается после процедуры обработки всех согласующихся между собой экспериментальных данных по измерениям высокоточных наблюдаемых некоторых комбинаций ФФП. Значения базовых ФФП получаются после процедуры обработки всех согласующихся между собой данных, например с помощью метода наименьших квадратов. После такой обработки для величин ФФП оценивают вектор средних значений и матрицу ковариаций, которая, как правило, оказывается недиагональной. Таким образом, ФФП имеют сложную структуру данных — это размерные вектор средних значений z^0 и матрица ковариаций погрешностей $u(z_i^0, z_j^0)$. В пространстве ФФП z конец вектора средних значений ФФП z^0 в “пределе вычислений с бесконечной точностью” лежит в центре эллипсоида рассеяния, определяемого обратной матрицей ковариаций

$$\sum_{i,j}^N (z_i - z_i^0) \cdot u[z_i^0, z_j^0]^{-1} \cdot (z_j - z_j^0) < 1.$$

Это соотношение налагает весьма жесткие ограничения на преобразования ФФП при вычислениях с заданной точностью. Из него, в частности, следует невозможность независимых округлений средних значений ФФП и матричных элементов матрицы ковариаций и корреляций для плохо обусловленных матриц. К сожалению, этот факт недооценивается многими специалистами (см. обсуждения в работе [20]).

Любое выражение, зависящее от ФФП, имеет дисперсию, связанную со “случайным характером” ФФП, для вычисления которой нужно использовать матрицу ковариаций ФФП согласно закону переноса (propagation) погрешностей [2]:

$$u[f(z_1, \dots, z_n)] = \sqrt{\sum_{i,j=1}^N \frac{\partial f}{\partial z_i} \frac{\partial f}{\partial z_j} u[z_i, z_j]}.$$

Если матрица корреляций ФФП единичная, следовательно, матрица ковариаций диагональна, и формула переноса погрешностей принимает следующий вид:

$$u[f(z_1, \dots, z_n)] = \sqrt{\sum_{i,j=1}^N \frac{\partial f}{\partial z_i} \frac{\partial f}{\partial z_j} \sigma[z_i] \sigma[z_j] \delta_{ij}} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial z_i} \sigma[z_i] \right)^2}.$$

Поскольку любое выражение, зависящее от ФФП, имеет погрешность, то интуитивно понятно, что нет особого смысла вычислять теоретические поправки к этому выражению, если их величина значительно меньше величины погрешности от ФФП.

Современные значения ФФП были получены в национальном институте стандартов и технологий (NIST) США в 1998 году, одобрены и рекомендованы для международного использования комиссией КОДАТА.

Приведем справку о комитете [2]:

- КОДАТА, комитет по данным для науки и технологии, основан в 1966 году.

- КОДАТА стремится следить за качеством, надежностью, обработкой, управлением и доступностью данных, представляющих интерес для науки и технологии.
- Международная группа по ФФП КОДАТА была основана в 1969 г. Ее цель периодически предоставлять научному и техническому сообществу набор самосогласованных ФФП, исходя из всех доступных к этому моменту данных.

В опубликованном в 2000 году отчете [2] о переоценке ФФП-1998 подробно описаны методики и процедуры уточнения ФФП. Однако на самом последнем этапе процедуры переоценки — представление результатов научному и образовательному сообществу — были допущены грубые ошибки. Так, например, матрица корреляций экспериментально измеряемых величин r_{ij} , напечатанная в [2] на стр. {434, 436}, которая входит в соответствующую величину

$$\chi^2 = \sum_{i,j=1,\dots,N} (q_i - f_i(z_1, \dots, z_M)) V_{ij}^{-1} (q_j - f_j(z_1, \dots, z_M))$$

как $V_{ij} = \sigma[q_i]\sigma[q_j]r_{ij}$ не является положительно определенной (имеет 2 отрицательных собственных числа). Можно показать, что в этом случае V^{-1} также не будет положительно определенной матрицей, и величина χ^2 просто не имеет минимума, который требуется найти в методе наименьших квадратов.

Кроме того, элементы матрицы корреляций уточненных ФФП, приведенные на официальном сайте [3] и частично приведенные в [2], округлены с точностью до трех первых десятичных знаков после запятой что и привело к появлению отрицательных собственных значений у матрицы весов(!).

Перечислим и прокомментируем проблемы, с которыми мы столкнулись при использовании данных и информации по ФФП:

- Искажения матриц корреляций, “входной” и “выходной”, как в обзоре [2], так и на официальном сайте [3].
- Отсутствие описания методики окончательной обработки результатов для представления. Эта методика нужна для того, чтобы искажений данных больше не было. Отсутствие этой методики понижает ценность представленных результатов;
- Нет “машиночитаемого” источника данных по ФФП. “Машиночитаемый” источник — источник, с которого информация может быть автоматически перенесена в персональный компьютер, например через сеть Интернет, и затем использоваться другими программами. Ни КОДАТА, ни NIST такой возможности не предоставляют. Правда, есть официальный сайт NIST, с которого ФФП, их ошибки и корреляции можно переносить по принципу “Copy-Paste.” Однако если требуется вычислить стандартное отклонение от функции N базовых ФФП, то число коэффициентов, которые нужно “перенести” с сайта, равно: $W = N + N + (N(N + 1)/2 - N) = N(N + 3)/2$. При $N = 8$, как, например, в формуле для энергии уровней атома водорода $E_H(nL_j)$, $W = 44$.

- “Соккрытие” данных по некоторым оцененным базовым ФФП. В окончательной таблице рекомендованных КОДАТА к использованию ФФП нет информации о следующих ФФП, которые использовались для процедуры уточнения ФФП-1998: $\delta_N(nL_j)$, δ_e , δ_μ , δ_{Mu} – поправки к теоретическим выражениям для уровней энергии атомы водорода ($N = H$) и дейтерия ($N = D$), аномального магнитного момента электрона и мюона, а также к сверхтонкому расщеплению в атоме мюония, а также, $d_{220}(X)$, где $X = ILL, N, W17, W04, W4.2, MO^*4, SH1$ (значения постоянных решеток для семи модификаций монокристаллов кремния).
- В процедуре КОДАТА производится поиск локального минимума χ^2 . Вопрос о глобальности найденного минимума не обсуждается в [2].
- Отсутствует методика обработки “поправочных” уточняемых ФФП после процедуры уточнения. “Поправочные” уточняемые ФФП, такие как, например, $\delta_N(nL_j)$ – поправки к теоретическим выражениям для уровней энергии атомы водорода, не являются, по сути, ФФП, как справедливо замечают авторы [2]. Однако методика обработки этих ФФП после процедуры оценивания не описана в [2].
- Отсутствуют методики для построения предсказаний и указания на “слабые места” оценивания. Выше были указаны две подзадачи, которые возникают в рамках проблемы ФФП. Если первая из них была так или иначе решена, то вторая была лишь только затронута. Процедура уточнения КОДАТА:1998 опиралась на справедливость следующих концепций ([2], с.355): специальная теория относительности, квантовая механика, КЭД, стандартная модель физики элементарных частиц совместно с СРТ инвариантностью, а также теории эффекта Джозефсона (Josephson) и квантового эффекта Холла и особенно на точность соотношений между постоянными: Джозефсона и фон Клитцинга (von Klitzing); элементарного заряда e и постоянной Планка h .

Для решения некоторых из перечисленных проблем был создан пакет PAREVAL в системе компьютерной алгебры *Mathematica*, воспроизводящий стратегию и процедуры оценивания, описанные в [2].

Для уточнения ФФП-1998 мы использовали 93 *наблюдаемых уравнений* $f_j(z)$, такое же количество наблюдаемых величин (q_j) и их ковариаций, $(u[q_k, q_l])$, которые были выбраны из 107 соотношений типа $q_i = f_i(z)$ в [2] для окончательной процедуры уточнения, и оценивали 57 базовых ФФП (среди которых было 29 “истинных” ФФП и 28 “поправочных ФФП”).

С помощью пакета PAREVAL было проведено несколько сессий согласования базовых ФФП по данным [2]. Одна сессия — с матрицей корреляций входных экспериментальных данных из [2], другая — с единичной матрицей входных экспериментальных данных (результаты см. в [20]) и третья — с “разокругленной” матрицей корреляций входных экспериментальных данных из [2]. Результаты третьей сессии представлены в следующем разделе.

5.1 Основные результаты. Выводы. Обсуждение

Ниже приведена таблица значений ФФП (см. Таблицу 2), полученных с помощью пакета PAREVAL в случае, когда использовалась разокругленная положительно определенная матрица корреляций исходных экспериментальных данных (то есть одна из возможных матриц корреляций, округление которой до трех десятичных знаков дает матрицу из [2]). Разокруглялся симметричный блок опубликованной матрицы с наибольшим количеством матричных элементов вида 0.999.

Из анализа приведенных таблиц можно сделать вывод, что мы имеем согласие между результатами уточнения ФФП-1998 и нашими результатами в пределах 5% от средней величины стандартных отклонений двух этих результатов.

Таким образом, были получены следующие результаты:

- Разработан макет системы для мониторинга значений базовых ФФП в системе *Mathematica* — пакет PAREVAL (краткое описание см. в последнем разделе). Пакет может быть использован для нового согласования ФФП, а также для решения широкого класса задач по оценке параметров теоретических моделей по экспериментальным данным. Пакет имеет лицензию GPL и будет доступен для общественного использования.
- Проверены результаты уточнения ФФП-1998 по методике КОДАТА/NIST:1998 (см. Таблицу 2).
- Результаты проверки принципа “прослеживаемости” (traceability) [2] показали, что результаты переоценки ФФП-1998 не воспроизводимы точно: нам не с чем сравнить ряд оцененных ФФП (об этом было уже написано выше).
- Получена положительно-определенная матрица корреляций базовых ФФП.
- Получены величины поправок к теоретическим выражениям уровней энергии атомов водорода и дейтерия, аномальных магнитных моментов электрона и мюона, а также сверхтонкому расщеплению в мюонии (см. Таблицу 3). До процедуры оценивания ФФП эти величины были неизвестны; была известна только оценка погрешностей этих величин. Напомним, что эти поправочные ФФП использовались как подгоночные ФФП в процедуре NIST/КОДАТА:1998. Кроме того, для каждой такой постоянной вводились *наблюдаемые уравнения* вида $0 \doteq \delta X$, где соответствующее $q_i = 0$ имело погрешность $\sigma[\delta X]$ (очевидно, *наблюдаемые соотношения* в этом случае имели простой вид $f_i(\delta X) = \delta X$).

Таблица 2: Сравнение значений NIST/CODATA:1998 (третий столбец) с соответствующими значениями (четвертый столбец), которые были получены по методу NIST с помощью нашего пакета PAREVAL. $\Delta_-/\sigma_- = (z_{CODATA} - z_{PAREVAL})/\sqrt{\sigma[z_{CODATA}]^2 + \sigma[z_{PAREVAL}]^2}$, $ndf = 93 - 57 = 36$ – число степеней свободы.

	Символ ФФК	КОДАТА:1998 значение Неискаженный коррелятор	PAREVAL значение Разокругленный коррелятор	Δ_-/σ_-
1	R_∞	$1.097\,373\,156\,8549(83) \times 10^7$	$1.097\,373\,156\,8547(83) \times 10^7$	0.018
2	$A_r(e)$	$5.485\,799\,110(12) \times 10^{-4}$	$5.485\,799\,110(12) \times 10^{-4}$	-0.048
3	$A_r(p)$	$1.007\,276\,466\,88(13)$	$1.007\,276\,466\,88(13)$	0.048
4	$A_r(n)$	$1.008\,664\,915\,78(55)$	$1.008\,664\,915\,78(55)$	-0.014
5	$A_r(d)$	$2.013\,553\,212\,71(35)$	$2.013\,553\,212\,71(34)$	0.0015
6	$A_r(h)$	$3.014\,932\,234\,69(86)$	$3.014\,932\,234\,69(86)$	0.012
7	$A_r(\alpha)$	$4.001\,506\,1747(10)$	$4.001\,506\,1747(10)$	0.036
8	α	$7.297\,352\,533(27) \times 10^{-3}$	$7.297\,352\,533(27) \times 10^{-3}$	0.0014
9	μ_{e-}/μ_p	$-6.582\,106\,875(66) \times 10^2$	$-6.582\,106\,875(66) \times 10^2$	0.000 33
10	μ_d/μ_e^-	$-4.664\,345\,537(50) \times 10^{-4}$	$-4.664\,345\,537(50) \times 10^{-4}$	-0.037
11	μ_{e-}/μ'_p	$-6.582\,275\,954(71) \times 10^2$	$-6.582\,275\,955(72) \times 10^2$	0.0058
12	μ'_h/μ'_p	$-7.617\,861\,313(33) \times 10^{-1}$	$-7.617\,861\,313(33) \times 10^{-1}$	0
13	μ_n/μ'_p	$-6.849\,9694(16) \times 10^{-1}$	$-6.849\,9694(16) \times 10^{-1}$	0.0035
14	m_e/m_μ	$4.836\,332\,10(15) \times 10^{-3}$	$4.836\,332\,11(14) \times 10^{-3}$	0
15	h	$6.626\,068\,76(52) \times 10^{-34}$	$6.626\,068\,76(52) \times 10^{-34}$	0
16	R	$8.314\,472(15)$	$8.314\,472(15)$	0.024
17	xu(Cu K α_1)	$1.002\,077\,03(28) \times 10^{-13}$	$1.002\,077\,02(29) \times 10^{-13}$	-0.000 64
18	xu(Mo K α_1)	$1.002\,099\,59(53) \times 10^{-13}$	$1.002\,099\,59(52) \times 10^{-13}$	0
19	\AA^*	$1.000\,015\,01(90) \times 10^{-10}$	$1.000\,015\,01(90) \times 10^{-10}$	0.0093
20	d ₂₂₀ (ILL)	нет	$1.920\,155\,816(56) \times 10^{-10}$	нет
21	d ₂₂₀ (N)	нет	$1.920\,155\,819(51) \times 10^{-10}$	нет
22	d ₂₂₀ (W17)	нет	$1.920\,155\,841(48) \times 10^{-10}$	нет
23	d ₂₂₀ (W04)	нет	$1.920\,155\,810(52) \times 10^{-10}$	нет
24	d ₂₂₀ (W4.2a)	нет	$1.920\,155\,799(50) \times 10^{-10}$	нет
25	d ₂₂₀ (MO*4)	нет	$1.920\,155\,607(44) \times 10^{-10}$	нет
26	d ₂₂₀ (SH1)	нет	$1.920\,155\,762(46) \times 10^{-10}$	нет
27	d ₂₂₀	$1.920\,155\,845(56) \times 10^{-10}$	$1.920\,155\,839(56) \times 10^{-10}$	0.019
28	R_p	нет	$9.07(33) \times 10^{-16}$	нет
29	R_d	нет	$2.153(14) \times 10^{-15}$	нет
		$\chi^2/ndf = 0.90$ [2], page 446	$\chi^2/ndf = 0.90$	

Таблица 3: Сравнение входных значений поправочных ФФП δ (третья колонка) с соответствующими значениями (четвертая колонка), полученными с помощью пакета PAREVAL после процедуры уточнения по методике КОДАТА:1998, ($ndf = 93 - 57 = 36$) – число степеней свободы.

	Символ ФФК	КОДАТА:1998 входные данные	PAVEVAL значение Разокругленный коррелятор
30	$\delta_H(1, 0, 1)$	$0(9.0000) \times 10^4$	$0.0082(8.9731) \times 10^4$
31	$\delta_H(2, 0, 1)$	$0(1.1000) \times 10^4$	$0.005(1.0975) \times 10^4$
32	$\delta_H(3, 0, 1)$	$0(3.300) \times 10^3$	$0.003(3.291) \times 10^3$
33	$\delta_H(4, 0, 1)$	$0(1.400) \times 10^3$	$0.009(1.3964) \times 10^3$
34	$\delta_H(6, 0, 1)$	$0(4.20) \times 10^2$	$0(4.19) \times 10^2$
35	$\delta_H(8, 0, 1)$	$0(1.80) \times 10^2$	$0(1.80) \times 10^2$
36	$\delta_H(2, 1, 1)$	$0(1.100) \times 10^3$	$-0.040(1.091) \times 10^3$
37	$\delta_H(4, 1, 1)$	$0(1.40) \times 10^2$	$-0.05(1.39) \times 10^2$
38	$\delta_H(2, 1, 3)$	$0(1.100) \times 10^3$	$0.015(1.096) \times 10^3$
39	$\delta_H(4, 1, 3)$	$0(1.40) \times 10^2$	$0.02(1.39) \times 10^2$
40	$\delta_H(8, 2, 3)$	$0(1.7) \times 10^1$	$-0(1.7) \times 10^1$
41	$\delta_H(12, 2, 3)$	$0(5.0)$	$-0(5.0)$
42	$\delta_H(4, 2, 5)$	$0(1.40) \times 10^2$	$0.01(1.400) \times 10^2$
43	$\delta_H(6, 2, 5)$	$0(4.0) \times 10^1$	$0(4.0) \times 10^1$
44	$\delta_H(8, 2, 5)$	$0(1.7) \times 10^1$	$0(1.7) \times 10^1$
45	$\delta_H(12, 2, 5)$	$0(5.0)$	$0(5.0)$
46	$\delta_D(1, 0, 1)$	$0(8.9000) \times 10^4$	$0.0041(8.8770) \times 10^4$
47	$\delta_D(2, 0, 1)$	$0(1.1000) \times 10^4$	$0.0012(1.0971) \times 10^4$
48	$\delta_D(4, 0, 1)$	$0(1.400) \times 10^3$	$0.001(1.396) \times 10^3$
49	$\delta_D(8, 0, 1)$	$0(1.70) \times 10^2$	$0(1.70) \times 10^2$
50	$\delta_D(8, 2, 3)$	$0(1.1) \times 10^1$	$-0(1.1) \times 10^1$
51	$\delta_D(12, 2, 3)$	$0(3.4)$	$-0(3.4)$
52	$\delta_D(4, 2, 5)$	$0(9.2) \times 10^1$	$0.06(9.20) \times 10^1$
53	$\delta_D(8, 2, 5)$	$0(1.1) \times 10^1$	$0(1.1) \times 10^1$
54	$\delta_D(12, 2, 5)$	$0(3.4)$	$0(3.4)$
55	δ_e	$0(1.1) \times 10^{-12}$	$0.010(1.10) \times 10^{-12}$
56	δ_{Mu}	$0(1.20) \times 10^2$	$0.010(1.2) \times 10^2$
57	δ_μ	$0(6.4) \times 10^{-10}$	$0(6.4) \times 10^{-10}$
			$\chi^2/ndf = 0.90$

6 Краткое описание пакета PAREVAL

Пакет PAREVAL состоит из нескольких независимых модулей. Условно его можно разделить на 4 подсистемы:

{file: ‘analyze-8-m.m’} Модуль для оценивания ФФП (по описанной в [2] стр. 481-484 методике NIST/CODATA:1998). На его “вход” подаются “данные” переоценивания, то есть базовый набор уточняемых ФФП, теоретические формулы (observational equations), экспериментально измеренные значения наблюдаемых величин, их погрешности и корреляции. Также для уточнения необходимо задать “стартовые” значения ФФП (которые, как правило, берутся из набора значений предыдущей сессии переоценки). На “выходе” процедуры получаются уточненные значения базовых ФФП.

{files: ‘cod-15-3.m’, ‘formulae-2.m’} Модули для построения теоретических формул для процедуры NIST/CODATA:1998. Так, например, в *Mathematica* были реализованы такие функции, как функция для уровней энергии в атоме водорода и дейтерия $E_{nL_j}^X$, где $L=S, P, \dots$ и $X=H, D$ ([2] стр. 466-474), аномальных магнитных моментов электрона a_e ([2] стр. 474-476) и мюона a_μ ([2], стр. 476-479).

{files: ‘myparser-1.m’, ‘correlations-4-pos.m’} Модули для описания, накопления, хранения и преобразования экспериментальных данных (средних значений, погрешностей и корреляций).

{files: ‘texprint-1.m’, ‘addon-5.m’} Модули для представления результатов в системе ЛАТ_ЕX.

Пакет исходно создавался для оценивания ФФП по процедуре NIST/CODATA:1998. Однако любой из модулей, перечисленных выше, можно использовать независимо от остальных, подключая его к рабочему *Mathematica* листу (notebook) с помощью команды ‘Get’ (или ‘<’). Сам *Mathematica* рабочий лист, в котором были выполнены уточнения ФФП, представляет собой обычное приложение, использующее совместно модули PAREVAL. Описание каждой подсистемы приведено ниже.

6.1 Модуль для оценивания параметров моделей

Как было отмечено в разделе 3.2, для того чтобы оценить параметры z_1, \dots, z_M из экспериментально измеренных величин q_1, \dots, q_N , которые выражаются как функции $q_1 = f_1(z_1, \dots, z_M), \dots, q_N = f_N(z_1, \dots, z_M)$ от параметров $\{z_j\}$, согласно методу МНК, нужно найти минимум квадратичной формы отклонений от нуля разностей типа $q_i - f_i(\cdot)$:

$$\chi^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq N} (q_i - f_i(z_1, \dots, z_M)) \cdot W_{ij} \cdot (q_j - f_j(z_1, \dots, z_M)), \quad (4)$$

где W_{ij} — матрица весов, равная $W = V^{-1}$, где $V_{ij} = u_{ij}$ — матрица ковариаций исходных данных.

Функции $\{f_j(z_1, \dots, z_M)\}$, как правило, нелинейны. Для того чтобы применить линейных матричный метод поиска минимума ([2], App. E), их нужно “линеаризовать”, то есть разложить их в ряд Тейлора, в малой окрестности ожидаемых значений базовых ФФП $\{s_i\}$, и ограничиться линейным членом:

$$f_i(z) = f_i(s) + \sum_{j=1, M} \left. \frac{\partial f_i}{\partial z_j} \right|_{z=s} \cdot (z_j - s_j) + \Delta_j$$

Введем новые переменные

$$y_i = q_i - f_i(s); \quad x_j = z_j - s_j; \quad a_{ij} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial z_j} \right|_{z=s}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \chi_{lin}^2 &= (Y - AX)^\top W(Y - AX); \\ \Delta_1 &= 2 \Delta^\top W(Y - AX) + \Delta^\top W \Delta. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение для χ^2 тогда примет вид

$$\begin{aligned} \chi^2 &= (Y - AX)^\top W(Y - AX) + 2 \Delta^\top W(Y - AX) + \Delta^\top W \Delta = \\ &= \chi_{lin}^2 + 2 \Delta^\top W(Y - AX) + \Delta^\top W \Delta = \chi_{lin}^2 + \Delta_1. \end{aligned}$$

Выражение для столбца X_{min} , которое минимизирует χ_{lin}^2 , задается выражением

$$X_{min} = GA^\top WY, \quad (7)$$

где $G = (A^\top W A)^{-1}$. Матрица ковариаций X_{min} , в свою очередь, задается выражением

$$\text{cov}(X_{min}) = G.$$

Конечно, нас интересует не столбец X_{min} как таковой, а наилучшая оценка Z_{min} :

$$Z_{min} = S + X_{min}$$

Поскольку уравнения нелинейны, решение линейной аппроксимации не дает точного решения нелинейной проблемы, но это решение дает значения ФФП, которые, как ожидается ([2], p.482), лежат ближе к точке, в которой достигается минимальное значение величины χ^2 . Для того, чтобы получить более точные значения ФФП, мы используем улучшенные значения ФФП в качестве новой “стартовой” точки для линейной аппроксимации. Эта процедура, повторяется до тех пор, пока стартовые значения ФФП будут отличаться от новых оцененных ФФП на очень малую долю от погрешности ФФП. Мы использовали следующее условие сходимости вычислительной схемы:

$$\sum_{j=1, M} \frac{x_{min;j}^2}{u[x_{min;j}]^2} < 10^{-20}, \quad (8)$$

которое следует из уравнения для эллипсоида в пространстве параметров $\{x_{min;j}\}$ с полуосями $\{u[x_{min;j}] \cdot 10^{-10}\}$.

В модуле есть три функции, которые реализуют вычислительные схемы, о которых говорилось выше.

Имя функции	Краткое описание
makeAY	Создает матрицы A и Y , см. (5)
AdjustStep	Находит минимум $S(X, X_{it})$ по формуле (7),
AdjustFull	Реализует метод последовательных приближений для поиска стационарных точек (в том числе, минимума) величины χ^2 , с заданным критерием сходимости

Функция MakeAY

Input: {func, data, fpc, subsfpc00}

Output: {A, Y}

Description: func — список функций; data — список данных; fpc — список параметров; subsfpc00 — список подстановок для параметров в точке, в которой происходит вычисления; A — матрица a_{ij} , Y — столбец y_i из (5).

Пример:

```
In[11]= makeAY[{x^2 + 2*y + 1, 2*x + y}, {1/2, 1}, {x, y}, {x -> 1, y -> 0}]
```

```
Out[11]= {{2, 2}, {2, 1}}, {-3/2, -1}}
```

Функция AdjustStep

Input: {func, data, matcov, fpc, subsfpc00}

Output: {{X, CovX}, {Y, CovY}, χ^2 , S0}

Description: func — список функций; data — список данных; fpc — список параметров; subsfpc00 — список подстановок для параметров в точке, в которой происходит вычисления; matcov — матрица ковариаций экспериментальных данных.

X — столбец X_{min} из (7), который минимизирует χ^2_{lin} из (6); CovX — матрица ковариаций вектора X; Y — столбец Y из (5); CovY — матрица ковариаций вектора Y; χ^2 — величина χ^2 , соответствующая найденному X_{min} ; S0 — величина χ^2_{lin} в точке X_{min} .

Пример:

```
AdjustStep[{x^2 + 2*y + 1, 2*x + y}, {1/2, 1},
{{1, 1/10}, {1/10, 1}}, {x, y}, {x -> 1, y -> 0}]
```

```
{{{-1/4}, {-1/2}}, {{23/20, -27/20}, {-27/20, 9/5}}},
{{{-3/2}, {-1}}, {{1, 1/10}, {1/10, 1}}}, {295/99, 0}}
```

Функция AdjustFull

Input: {func, data, matcov, fpc, subsfpc00, cret}

Output: {{X, CovX}, {Y, CovY}, subsfpc00, S0}

Description:

func — список функций; data — список данных; fpc — список параметров; subsfpc00 — список подстановок для параметров в точке, в которой происходит вычисления; matcov — матрица ковариаций экспериментальных данных; cret — условие сходимости 8.

X — столбец X_{min} из (7), который минимизирует χ_{lin}^2 из (6); $CovX$ — матрица ковариаций вектора X ; Y — столбец Y из (5); $CovY$ — матрица ковариаций вектора Y ; χ^2 — величина χ^2 , соответствующая найденному X_{min} ; $subsfpc00$ — значения параметров 'fpc', заданные в виде списка подстановок $\{z_j \rightarrow z_{j,min}\}$; $S0$ — величина χ_{lin}^2 в точке X_{min} .

Пример:

```
In[21]:= AdjustFull[{1+x^2+x+y, 1+2*x+2*y, x-y}, {1, 2, 1/2},
  {{1., 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}}, {x, y}, {x->1/2, y->0}, 10^(-5)]

Number of the equations:3 (3,3,3)
Number of the adjusted constants:2 (2)
Creterion:  $\frac{1}{100000}$ 
*** Make less then 10 iterations ***
Iteration #1
chi^2=0.5625 with `Precision`=MachinePrecision
S0=0.310345 with `Precision`=MachinePrecision
R\B=0.75
Precision of the correction X[[1]] MachinePrecision
Creterion=0.16056
New substitutions: {x->0.318966, y->0.0258621}
Iteration #2
-----
Iteration #5
chi^2=0.335425 with `Precision`=MachinePrecision
S0=0.335425 with `Precision`=MachinePrecision
R\B=0.579159
Precision of the correction X[[1]] MachinePrecision
Creterion= $6.63945 \times 10^{-7}$ 
New substitutions: {x->0.342992, y->0.00173169}
*** Creterion was achieved ***
Out[21]= {{{{-0.362069}, {0.0517241}}, {{0.239006, -0.186689}, {-0.186689, 0.312491}}},
  {{{-0.672414}, {-0.62069}, {-0.413793}}, {{0.36265, 0.428083, 0.218815},
  {0.428083, 0.712474, -0.14697}, {0.218815, -0.14697, 0.924876}}},
  {x->0.342992, y->0.00173169}, 0.335425}
```

6.2 Модуль для построения теоретических функций

Для того чтобы оценить параметры в пакете PAREVAL, на “вход” функции 'AdjustFull' нужно, в том числе, задать список функций $\{f_j(\{z_k\})\}$. Для процедуры переоценки ФФП:1998 мы создали два *Mathematica* модуля, в которых описали четыре основные функции:

Имя функции	Символ Обозначение	Описание
El1tot	$E_X(n, L, j)$	Уровни энергии атомов H и D ([2], App. A)
a_e	a_e	Аномальный магнитный момент электрона ([2], App. B)
a_μ	a_μ	Аномальный магнитный момент мюона ([2], App. C)
$\Delta\nu_{Mu}$	$\Delta\nu_{Mu}$	Сверхтонкое расщепление в мюонии ([2], App. D)
ν	ν	Функция, сопряженная функции сверхтонкого расщепления в мюонии ([2], p.387)

Таким образом, мы решили сразу несколько проблем:

- возможность тестирования реализованных функций на наличие в них ошибок программирования (“bugs”) после построения всей цепи вычислений;
- возможность достаточно простой модификации функций без изменения остальных цепей вычислений;
- возможность использовать функции в других приложениях. Упрощение механизма отчуждения пакета.

Функция a_e

Input: {alpha, dae}

Output: {Expr}

Description:

alpha - постоянная тонкой структуры; dae - величина теоретической поправки к a_e .

Feature:

Ответ записывается в терминах ФФП Ci_e , подстановки для которых есть в 'subsC01'

Example:

`N[ae[α, δae] /. subsC01 /. subsCONST, 17]`

`Out[40]=` $1.6610000000000000 \times 10^{-12} + 0.159154943091895336 \alpha - 0.033281824747073364 \alpha^2 +$
 $0.038096609572942051 \alpha^3 - 0.0154995800081224093 \alpha^4 + \delta a_e$

Функция a_μ

Input: {alpha, damu}

Output: {Expr}

Description: alpha — постоянная тонкой структуры; damu — величина теоретической поправки к a_μ .

Feature: Ответ записывается в терминах ФФП Ci_μ , подстановки для которых есть в 'subsC02'.

Функция $\Delta\nu_{Mu}$

Input: {mE, mM, aMU, alpha, R}

Output: {Expr}

Description:

alpha — постоянная тонкой структуры;

mE — масса электрона;

mM — масса мюона;

R - постоянная Ридберга;

Feature: Ответ записывается в терминах ФФП 'dnXi', подстановки для которых есть в 'subsX'.

Example:

In[49]:= **N[Simplify[$\Delta\nu_{Mu}[m_e, m_\mu, a_\mu, \alpha, R]$ /. subsX /. dMu \rightarrow $\delta\Delta\nu_{Mu}$,
 $\alpha > 0 \&\& \alpha < 1/2 \&\& m_e > 0 \&\& m_\mu > m_e]]$**

$$\begin{aligned} \text{Out[49]} = & 0.333333 \left(525. + \frac{1}{\left(1. + \frac{m_e}{m_\mu}\right)^3 m_\mu^2} \right. \\ & \left(16. c R \alpha^3 m_e^2 \left(-0.106103 \alpha^2 \left(171. + 2. \text{Log}[\alpha]^2 - 9. \text{Log}[\alpha] \text{Log}\left[\frac{m_\mu}{m_e}\right] \right) - \right. \right. \\ & \left. \frac{3. \text{Log}\left[\frac{m_\mu}{m_e}\right]}{3.14159 - \frac{3.14159 m_e^2}{m_\mu^2}} + \frac{\alpha (-1.93407 - 2. \text{Log}[\alpha])}{\left(1. + \frac{m_e}{m_\mu}\right)^2} \right) \left. \right) - \frac{101.209 c R \alpha^4 m_e^2}{(m_e + m_\mu)^3} + \\ & \frac{1}{(m_e + m_\mu)^3} \left(0.0028668 c R \alpha^4 \left(10266.6 + 7758. \alpha + 9474.82 \alpha \text{Log}[\alpha]^2 + 612.611 \right. \right. \\ & \left. \left. \text{Log}\left[\frac{m_\mu}{m_e}\right] - 120. (9.42478 - 2. \alpha) \text{Log}\left[\frac{m_\mu}{m_e}\right]^2 - 240. \alpha \text{Log}\left[\frac{m_\mu}{m_e}\right]^3 \right) m_e^2 m_\mu \right) + \\ & \frac{2. c R \alpha^2 (8. + 12. \alpha^2 + 17. \alpha^4) (1. + a_\mu) m_e m_\mu^2}{(m_e + m_\mu)^3} - \frac{1}{(m_e + m_\mu)^3} \\ & (1.59267 \times 10^{-7} c R \alpha^3 \\ & (2.07962 \times 10^8 \alpha - 3.96458 \times 10^7 \alpha^2 + 70685.8 \alpha (-326.822 + 12384. \alpha^2) + \\ & 78.9568 (-202500. - 6.70489 \times 10^6 \alpha^2 + 4.86 \times 10^6 \alpha^3) + \\ & 44413.2 (-1537.69 - 17937.5 \alpha) \alpha^2 \text{Log}[\alpha] + \\ & \left. 1.35717 \times 10^7 \alpha^2 (6.28319 + \alpha) \text{Log}[\alpha]^2) (1. + a_\mu) m_e m_\mu^2) + 3. \delta\Delta\nu_{Mu} \right) \end{aligned}$$

Функция ν

Input: {fr}

Output: {Expr}

Description:

fr - протонная NMR частота;

Feature: Ответ записывается в терминах ФФП {muecip, memmu, damu, dae, dMu}

Функция E1tot

Input: {X, n, L, j}

Output: {Expr}

Description: $X=(1|2)$,

$X=1$ для атома водорода,

$X=2$ для атома дейтерия;

n — главное квантовое число;

L — квантовое число орбитального момента импульса;

j — квантовое число полного момента импульса;

Expr — выражение для $E_X(n, L, j)$.

Feature:

1) Ответ записывается в терминах ФФП {h (постоянная Планка), m_e — масса электрона, m_i (масса протона ($i=1$) или дейтрона ($i=2$)), $RR[i]$ (протонный ($i=1$) и дейтронный ($i=2$) среднеквадратический радиус заряда), alpha} и нек. другие.

2) Иногда в выражении могут появиться переменные m_N . Это связано с особенностью использованного в *Mathematica* способа сборки, компиляции, функции, зависящей от дискретных переменных. Эта трудность пока не преодолена, поэтому в этих случаях нужно дополнительно выполнять подстановки $m_N \rightarrow m_i$.

Пример: (см. на следующей странице.)

Пример: Классический Лэмбовский сдвиг:

```

In[27]:= Collect[
  Simplify[(Eltot[HH, 2, 0, 1/2] - Eltot[HH, 2, 1, 1/2]) /.
    {Z -> 1, mH -> mp, m1 -> mp, RR[1] -> RP}, α > 0 && α < 1/2 && me > 0 && mp > me && h > 0], ]

Out[27]= 1/810000000000
(
  -718875000000 h + 13500000000 c^2 α^5 me^4 mp^2 (
    -15 Log[1 + mp/me] - 68 c^2 π^4 RP^3 me^2/mp^2
  ) / (π (me + mp)^4) + 1 / (h^2 π (me + mp)^3 me^2/mp^2)
  (
    27 c^2 α^4 me^3 mp (
      -h^2 (
        62500000 π + 1420893301 α + 10000000000 α Log[α] - 5000000000 α Log[1 + mp/me]
      )
      me^2/mp^2 - 1000 mp^2 (
        167100 h^2 α + c^2 π^3 RP^2
        (
          -1000000 + α^2 (1762043 - 1000000 Log[2]) + 1000000 α^2 Log[2 c π RP α me mp / (h (me + mp))]
        ) me^2/mp^2
      )
    )
    + 1 / (π^2 mp) (
      6 c^2 α^5 me^2 (
        -16875 π (2389 + 136449 π α) + 3375000000 π Log[1 + mp/me] me^5/mp^2
      ) / ((me - mp) (me + mp)^4) -
      1 / ((me + mp)^2) (me^3 (-5680710291 π + 187500000 π^2 α (-1 + Log[64]) +
        1125000000 π Log[α] - 15625000 α (197 + 108 Zeta[3])))
    ) - 1 / (π^2 (me + mp)^2)
    (
      c^2 α^5 me^3 mp^2 (
        3750000000 π^3 α^2 + 108984375 π^4 α^2 + 9 π (3125179903 + 34326724250 α^2) -
        11718750 π^2 α (3547 + 54 α^2 + 1296 Log[2] - 864 Log[4] - 24 Log[64]) -
        281250000 π (48 + α^2 (55 + 192 Log[2])) Log[me + mp / α^2 mp] +
        1125000000 α^2 (9 π + 8 α (-1 + 2 EulerGamma + Log[4])) Log[me + mp / α^2 mp]^2 +
        1250 α (203760603 α + 6250 (3767 + 2592 Zeta[3]))
      )
    )
  )
)

```

6.3 Модуль сопровождения экспериментальных данных

Экспериментальные данные, которые использовались в процедуре уточнения ФФП:1998 хранятся в двух ASCII файлах: 'data-A.txt' и 'data-B.txt'. Файлы имеют следующий формат. В первой строке стоит число N записанных данных в файле. В следующей строке стоит первое данное, затем пустая строка, затем второе данное, пустая строка и так далее до N данных. Каждое данное имеет такую структуру $X(Y)[U]$, где X — среднее

значение, Y — погрешность к последним цифрам среднего значения, U - обозначение величины измерения. Например, '0.8545(120) [fm]' означает, что среднее значение равно 0.8545 fm, погрешность 0.0120 fm, fm = 10^{-15} [m] в системе СИ.

Матрица корреляций хранится в модуле 'correlations-4-pos.m'. Общая матрица корреляций строится из двух некоррелирующих блоков Aa и Bb: Aa – верхний левый блок, а Bb — нижний правый.

Ниже приведено описание некоторых функций.

Функция Parse1

Input: {String}

Output: {res, un}

Description:

Читает формат "X(Y)[U]" и возвращает среднее значение (res) и его погрешность (un).

Example:

```
In[80]:= N[Parse1["11.192(222)[x10-2]"]]
```

```
Out[80]:= {0.11192, 0.00222}
```

Функция ReadData

Input: {Stream}

Output: {data, err}

Description:

Читает файл, который открыт с дескриптором Stream, формат которого описан выше, и возвращает список средних значений (data) и список соответствующих погрешностей (un).

6.4 Модуль представления результатов в системе L^AT_EX

При большом объеме получаемых с помощью пакета данных, таком как, например, 57 значений ФФП с погрешностями и корреляциями, представление их в обозримом виде это трудоемкая задача, при выполнении которой могут возникать ошибки. Для решения этой проблемы были созданы модули 'texprint-1.m', 'addon-5.m'.

Модуль texprint-1.m

Переменная subsList

Description:

subsList - список соответствия символов ФФП, которые использовались при уточнении, и L^AT_EXкоманды, которые должны им соответствовать в отчете.

Example:

```
subsList = {{R, "R_{\\infty}"}, {RP, "R_p"}}
```

Функция TeXPrint

Input: {matrix}

Output: {String}

Description:

Создает команды L^AT_EX для матрицы `matrix` (в формате String).

Example:

```
In[9]:= TeXPrint[mat111 = {{RP, "2.4*10^(-5)"}, {RD, -4}, {5, 6}}]
```

```
Out[9]= \begin{tabular}{ll} \R_p & \& \phantom{-}2.4*10^(-5) \\ \R_d & -4 \\ 5 & 6 \end{tabular}
```

Модуль `addon-5.m`

Функция `WithUncForm01`

Input: {x, un, fig}

Output: {"X(Y)\times 10^{\hat{z}} "}

Description:

Записывает среднее значение (x) с погрешностью (un) с формате $X(Y) \times 10^z$, ошибка погрешности при этом округлена не менее чем с точностью до fig значащих цифр (среднее значение при этом если $x > un$ округляется соответственно числу оставшихся значащих цифр у погрешности). Кроме того, числа переводятся в научную запись (scientific notation). X — округленное среднее значение, Y — округленная погрешность, z — порядок по основанию 10 в научной записи (scientific notation) числа.

Example:

```
In[20]:= WithUncForm01[-62.9157, 2.5754, 2]
```

```
Out[20]= -6.29(26)\times 10^{1}
```

Функция `unFPC`

Input: {cov}

Output: {un}

Description:

Возвращает список погрешностей (un) из матрицы ковариаций (cov). Напомним, что $un[i] = \sqrt{cov[i, i]}$.

Список литературы

- [1] R. T. Birge, “Probable Values of the General Physical Constants”, Rev. Mod. Phys. **1** (1929) 1.
- [2] P. J. Mohr and B. N. Taylor, “CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 1998”, Rev. Mod. Phys. **72** (2000) 351.
- [3] NIST, <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>.
- [4] D. R. Lide (Editor-in-Chief), “CRC Handbook of Chemistry and Physics, 82nd edition”, CRC Press LLC, 2001.

Во введении к таблице ФФП было бы весьма полезным примечание о том, что данные NIST воспроизводятся без корреляций погрешностей, которые не малы для многих пар ФФП.

- [5] K. Hagiwara *et al.* [Particle Data Group Collaboration], “Review of Particle Physics”, Phys. Rev. D **66** (2002) 010001.

Во введении к таблице ФФП (стр. 010001-77) было бы весьма полезным примечание о том, что отобранные данные NIST воспроизводятся без корреляций погрешностей, которые не малы для многих пар ФФП.

- [6] [Редакция], “Фундаментальные физические постоянные (1998)”, УФН **173** (2003) 339.

Перепечатка в УФН постоянных NIST:1998 через пять лет после их “обнародования” в публикациях NIST и на сайтах NIST/CODATA представляется нелепой без комментариев и без примечания о существовании на сайтах NIST и CODATA корреляций погрешностей.

- [7] <http://library.wolfram.com/howtos/constants/>

Вызывает удивление то, что в системе аналитических вычислений ориентированной на использование в научных вычислениях в подсистеме для работы с ФФП используется файл с данными только о средних значениях ФФП. В структуре данных нет места для погрешностей ФФП и их корреляций.

- [8] <http://www.mapleapps.com/categories/maple8/html/scientificconstants.html>

В этой системе предусмотрено использование как средних значений, так и погрешностей (но без корреляций). К сожалению нет информации об источнике данных по ФФП.

- [9] V. McLine (editor), BNL-NCS-44945-01/04-Rev. Informal Report [ENDF-102](#) Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6 (see: APPENDIX H. Recommended values of Physical Constants to be used in ENDF.)

Весьма странно, что в документации по методикам оценивания ядерных данных, в которой сформулированы рекомендации по использованию ФФП в системе ядерно-физических данных, приводятся данные только по средним значениям ФФП, без упоминания величин погрешностей и их корреляций. В Аппендиксе Н к цитируемой документации было бы весьма полезным привести примечание о том, что данные NIST воспроизводятся без погрешностей и корреляций погрешностей, которые не малы для многих пар ФФП.

- [10] The MAXIMA computer algebra system, “physconst” package.
<http://maxima.sourceforge.net/>

В этом пакете данные по ФФП также представлены без корреляций. Примечание о том, что данные NIST воспроизводятся без корреляций погрешностей, которые не малы для многих пар ФФП, было бы весьма полезным так как система используется в образовательных проектах.

- [11] В. В. Ежела, В. Н. Ларин, препринт ИФВЭ 2003-17, Протвино 2003,
 “Развитие пакета ‘StandardPhysicalConstants’ в среде системы *Mathematica*”.
- [12] Б. Тейлор, В. Паркер, Д. Лангенберг, “Фундаментальные константы и квантовая электродинамика”, Москва, Атомиздат, 1972.
- [13] Ю.П. Пытьев, И.А. Шишмарев, Курс теории вероятностей и математической статистики для физиков.
- [14] Ю.Нейман, Вводный курс теории вероятностей и математической статистики, 1968.
- [15] А. А. Боровков, Математическая статистика. Оценка параметров. Проверка гипотез, 1984.
- [16] В.А. Колемаев и др., Теория вероятностей и математическая статистика, 1991.
- [17] В. Эдье и др., Статистические методы в экспериментальной физике, 1976.
- [18] Н. Н. Калиткин, Численные методы, “Наука”, 1978.
- [19] К.Ш. Тан, В.-Х. Стиб, Й. Харди, Символьный C++: Введение в компьютерную алгебру с использованием объектно-ориентированного программирования, Москва, “Мир”, 2001.
- [20] A. S. Siver, V. V. Ezhela, On the CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: V3.2(1998) & V4.0(2002)
 preprint IHEP-2003-34, Protvino, 2003.
- [21] *Mathematica*, <http://www.wolfram.com>
- [22] MAXIMA, <http://maxima.sourceforge.net>

- [23] REDUCE, <http://www.uni-koeln.de>
- [24] Maple, <http://www.maplesoft.com>
- [25] muPAD, http://www.mupad.de/index_uni.shtml
- [26] FORM, <http://www.nikhef.nl/~form/>
- [27] GiNaC, <http://www.ginac.de> (Bauer, A. Frink, R. Kreckel, arXiv:cs.SC/0004015).
- [28] Э. Х. Тыгу, Концептуальное программирование, Москва, “Наука”, 1984.
- [29] С. Осуга, Обработка знаний, Москва, “Мир”, 1989.
- [30] Х. Уено, М. Исидзука, Представление и использование знаний, Москва, “Мир”, 1989.
- [31] Д. Уотермен, Руководство по экспертным системам, Москва, “Мир”, 1989.
- [32] AAAI, <http://www.aaai.org>
- [33] “GNU/Linux AI & Alife HOWTO”, John Eikenberry, <http://zhar.net/gnu-linux/howto>
- [34] M. Wester, http://www.math.unm.edu/~wester/cas_review.html
- [35] S. Weinzierl, arXiv:hep-ph/0209234.
- [36] CompHEP, А. Пухов, arXiv:hep-ph/9908288.
- [37] GRACE, <http://www-sc.kek.jp/minami/>; H. Tanaka et al, Comp. Phys.Comm. **64** (1991) 149.
- [38] Parker W.H. et al., Phys. Rev. **177** (1969) 639.
- [39] Cohen E.R. et al., Rev. Mod. Phys. **37** (1965) 537.
- [40] G. Barrand, 'GAUDI', Comp. Phys. Comm. **140** (2001) 45-55.
- [41] N. Baker, Comp. Phys. Comm. **140** (2001) 1-12.