



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Егорова В.А., Иноземцева К.К.,
Жуковский М.Е.

Подход к моделированию
радиационно-
индуцированных вторичных
эффектов в сложных
технических объектах

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Егорова В.А., Иноземцева К.К., Жуковский М.Е. Подход к моделированию радиационно-индуцированных вторичных эффектов в сложных технических объектах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 110. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2018-110](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-110)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-110>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

В.А. Егорова, К.К. Иноземцева, М.Е. Жуковский

**Подход к моделированию
радиационно-индуцированных
вторичных эффектов
в сложных технических объектах**

Москва — 2018

Егорова В.А., Иноземцева К.К., Жуковский М.Е.

Подход к моделированию радиационно-индуцированных вторичных эффектов в сложных технических объектах.

Разработан способ расчета исходных данных для компьютерного моделирования радиационно-индуцированных вторичных эффектов в сложных технических объектах, находящихся в полях ионизирующих излучений. Способ основан на многомерной аппроксимации результатов статистического моделирования взаимодействия излучения с веществом объекта на разностную сетку, предназначенную для численного решения уравнений термодинамики. Аналогичный подход применим для моделирования электродинамических эффектов. Сформулированы различные типы аппроксимации и способы их реализации, применимость которых определяется доступной априорной информацией о свойствах аппроксимируемых функций и геометрической структуре объекта. Приведены примеры, в которых для многомерной аппроксимации в рассматриваемых задачах применяется технология нейронных сетей.

Ключевые слова: математическое моделирование, ионизирующее излучение, многомерная аппроксимация, нейронные сети

Varvara Alekseevna Egorova, Kseniya Konstantinovna Inozemtseva, Mikhail Evgenievich Zhukovskiy

An approach to modeling of the secondary radiation-induced effects in complex technical objects.

The technique of the calculation of initial data for computing the secondary radiation-induced effects in complex technical objects being under radiation is developed. The method is based on the multidimensional approximation of the results of the statistical modeling of the interaction between radiation and matter to a difference grid destined for numerical solving the thermodynamic equations. Various types of the approximation and methods of their implementation are formulated. Applicability of the types is determined by the available a priori information on the function to be approximated and geometrical properties of an object. Examples of the multidimensional approximation in discussed problems by use of the neural networks are given.

Key words: mathematical modeling, ionizing radiation, multidimensional approximation, neural networks

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-01-00582.

Оглавление

Оглавление	3
Введение	3
1 Особенности моделирования вторичных радиационно-индуцированных эффектов	5
2 Задача многомерной аппроксимации	6
2.1 О технологии машинного обучения	7
2.2 Применение нейронных сетей в задачах многомерной аппроксимации	8
3 Многомерная аппроксимация в задачах комплексного воздействия излучения	10
3.1 Типы аппроксимации	10
3.2 О выборе типа аппроксимации	13
4 Моделирование энерговыделения излучения	14
4.1 Однородная среда	14
4.2 Гетерогенные материалы регулярной замкнуто-ячеистой структуры	17
Заключение	22
Библиографический список	23

Введение

Актуальной отраслью современных научных исследований является изучение функционирования сложных технических объектов в условиях комплексных физических воздействий различной природы. Среди них потоки проникающего излучения и тепла, механические напряжения и электромагнитные поля и т.д. Примером являются космические аппараты, находящиеся в полях ионизирующих излучений космического пространства. Электроны и протоны радиационных поясов, галактические и солнечные лучи рассеиваются в материалах космических аппаратов, электризуют конструкции, генерируют электромагнитные поля, порождают тепловые и механические нагрузки. Эти эффекты разрушают защитные покрытия, нарушают работу приборных комплексов и порождают ряд других нежелательных эффектов. Длительная устойчивая работа спутника на заданной орбите требует применения материалов, стойких к таким воздействиям. Разработка и анализ свойств таких материалов являются важными практическими задачами.

Эффективным путем исследования комплекса механизмов воздействия в настоящее время является детальное математическое моделирование процессов взаимодействия ионизирующего излучения с веществом в комплексе с сопутствующими тепловыми, механическими, электродинамическими и другими механизмами, приводящими к изменению или деградации функциональных свойств материалов.

Последние 10-15 лет в России и за рубежом идет интенсивная разработка эффективных моделей и алгоритмов для исследования взаимодействия ионизирующего и электромагнитного излучений с композиционными гетерогенными материалами. Создаются мощные универсальные программные комплексы для исследования взаимодействия проникающего излучения с веществом. К ним можно отнести MCNP (Monte Carlo N-Particle Transport Code System for Multiparticle and High Energy Applications, RSICC Computer Code, LANL, Los Alamos, 2008); PENELOPE (Nuclear Energy Agency 2009), ITS/ETRAN systems (Halbleib and Melhorn, 2003), PEREGRINE code (Hartmann Siantar et al. 2001), GEANT4 (Agostinelli et al. 2003). Эти комплексы широко используются в России и за ее пределами в таких областях, как неразрушающий радиационный контроль, медицинская диагностика, моделирование распространения частиц в сложных объектах. Для эффективного решения ряда специальных вопросов теории переноса, в которых быстрое действие является приоритетным по сравнению с универсальностью (задачи радиотерапии, радиационный таможенный контроль, анализ сварных швов трубопроводов) разрабатываются специализированные программные комплексы (BEAMnrc code, Rogers, Walters, and Kawrakow, 2005; Dose Planning Method (DPM), Sempau, Wilderman, and Bielajew 2000; РЭМП, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и др.).

Важным вопросом при решении задач исследования комплексного физического воздействия является выбор способа совместного применения программных средств для оценки влияния различных взаимозависимых факторов на функциональные свойства объектов. Основной проблемой здесь является использование результатов моделирования одного физического процесса в качестве исходных данных для моделирования процесса другой природы.

Моделирование различных физических процессов проводят в различных физико-математических постановках с применением разных численных методов. Особенности построения математических моделей и численных методов обуславливают применение различных дискретных геометрических приближений для описания объекта и расчетной области, в рамках которых моделируются рассматриваемые процессы.

Таким образом, актуальной является задача адекватного переноса данных из одной геометрической структуры (например, системы детекторов для оценки искомых величин при моделировании взаимодействия излучения с веществом) на другую (например, прямоугольную декартову термодинамическую разностную сетку). Эта задача решается с помощью подходов, основанных на том или ином методе аппроксимации.

Некоторые из таких подходов рассмотрены в настоящей работе.

1 Особенности моделирования вторичных радиационно-индуцированных эффектов

Рассмотрим задачу по оценке комплексного влияния высокоэнергетического фотонного и электронного излучений на облучаемый объект. В процессе распространения в объекте частицы излучения взаимодействуют с веществом конструкционных материалов. Результатом взаимодействия является изменение состояния частицы, в частности потеря энергии. Часть этой энергии идет на появление новых «вторичных» частиц, а часть поглощается веществом, что приводит к нагреву вещества. Этот нагрев вызывает термомеханические изменения в объекте, которые могут привести к деградации функциональных характеристик материалов и конструкций, в частности к ухудшению защитных свойств внешних покрытий корпусов космических аппаратов. Часть вторичных заряженных частиц способна эмитировать с внешних и внутренних поверхностей объекта, порождая самосогласованное электромагнитное поле, которое может нарушить работу электронной аппаратуры.

Таким образом, при проведении вычислительного эксперимента для исследования комплексного воздействия ионизирующего излучения требуется провести математическое моделирование различных взаимосвязанных эффектов из различных областей физики:

- развитие фотон-электронного каскада, приводящее к энерговыделению в веществе объекта и сопровождающееся радиационной электронной эмиссией [1, 2];
- генерация и развитие термодинамических и термомеханических явлений [3];
- генерация самосогласованного электромагнитного поля внутри и около объекта [4].

Исследования в этих областях проводят с применением различных физико-математических моделей и вычислительных алгоритмов. При этом строятся разные дискретные геометрические описания объекта и расчетной области. Так, при моделировании развития фотон-электронного каскада облучаемые объекты описываются с помощью граничных поверхностей (оболочек), ограничивающих гомогенные составляющие объекта [5 - 8], а в качестве регистрирующей системы используется, как правило, совокупность равномерно распределенных детекторов различной формы, в которых рассчитываются функционалы на пространстве решений уравнения переноса. Термодинамические и термомеханические процессы, а также процесс генерации электромагнитного поля моделируют, как правило, на прямоугольных пространственных декартовых разностных сетках [4, 6]. Термодинамические эффекты могут моделироваться на нерегулярных тетраэдральных пространственных сетках [9, 10].

Применение различных дискретных моделей объекта и расчетной области требует аппроксимации данных с одной геометрической структуры (системы детекторов частиц излучения) на другую (например, прямоугольную декартову разностную сетку). Так, плотность потока эмитирующих электронов, рассчитанную

с помощью набора плоских детекторов на поверхности объекта, необходимо аппроксимировать на границы ячеек прямоугольной декартовой разностной сетки для численного решения уравнений Максвелла, описывающих генерацию электромагнитного поля. Значения объемной плотности энерговыделения, полученные в наборе равномерно распределенных объемных детекторов внутри объекта с помощью моделирования переноса излучения, необходимо «перенести» в центры ячеек разностной сетки для расчета термомеханических эффектов. При этом различными являются не только положение и форма детекторов излучения и ячеек разностных сеток, но и их число (как правило, число разностных ячеек превосходит количество детекторов излучения на порядок или больше).

Пример подобной ситуации схематично представлен на Рис. 1.

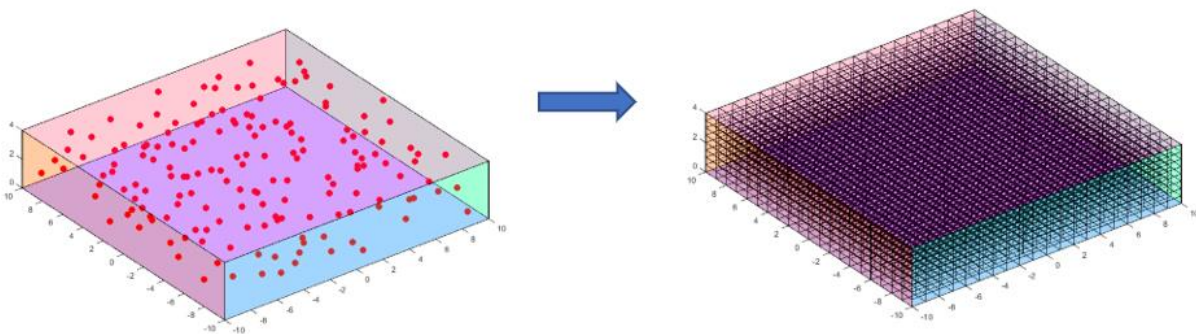


Рис. 1 – Значения плотности энерговыделения, рассчитанные на множестве детекторов излучения (слева), нужно перенести в ячейки термодинамической разностной сетки (справа)

В данном примере актуальной является задача многомерной аппроксимации данных, обусловленная различием геометрических приближений, используемых для моделирования разных физических процессов.

Современные конструкционные материалы имеют сложную внутреннюю структуру (пористые вещества, мелкодисперсные среды), что заметно осложняет выбор типа аппроксимации и метода построения аппроксимирующих функций. Например, в квазиоднородных средах с «медленным» изменением свойств иногда удается построить единую аппроксимацию для всей расчетной области [11]. Для периодических структур, обладающих тем или иным свойством симметрии, полезным может оказаться разбиение всей области на некоторое число подобластей, в которых аппроксимация строится аналогичным образом. В ряде случаев, например для пористых сред или веществ с мелкодисперсными включениями, может потребоваться построение аппроксимирующей функции для каждой точки множества, на которое переносится требуемая информация.

Ниже рассмотрены указанные вопросы.

2 Задача многомерной аппроксимации

Вопросы многомерной аппроксимации данных применительно к решению обсуждаемых задач предлагается рассматривать в рамках технологии машинного обучения.

2.1 О технологии машинного обучения

Машинное обучение (МО) [12] – это подраздел искусственного интеллекта, изучающий методы построения алгоритмов, способных обучаться или адаптировать свою структуру на основании известной выборки данных [13]. МО находится на стыке математической статистики, методов оптимизации и классических математических дисциплин [12]. Характерной чертой методов МО является не прямое решение задачи, а построение и обучение некоторой стохастической модели на основе анализа решений множества сходных задач. Обучением модели в данном случае называется настройка её внутренних параметров таким образом, чтобы модель определяла решение задачи с заданной точностью. Для построения таких методов используются средства математической статистики, численных методов, теории вероятностей, теории графов, а также различные техники работы с данными в цифровой форме.

Различают два типа обучения.

Обучение по прецедентам [13], или *индуктивное обучение*, основано на выявлении эмпирических закономерностей в данных. В этом случае предполагается наличие некоторой (обучающей) выборки известных (эмпирических) данных, полученных путем наблюдения или вычислительного эксперимента. Общим подходом к решению задач индуктивного обучения является метод минимизации эмпирического риска. *Эмпирическим риском* называется средняя ошибка алгоритма на обучающей выборке. Метод *минимизации эмпирического риска* состоит в том, чтобы в рамках заданного класса моделей выбрать такую, которая имеет минимальное значение эмпирического риска на имеющихся эмпирических данных.

Пример. Пусть требуется аппроксимировать некоторую функцию $f(x)$, значения которой на множестве $X = \{x_i\}_{i=1}^n$ получены в результате физического или вычислительного эксперимента. То есть известна выборка данных $\{(x_i, f(x_i) = f_i)\}_{i=1}^n$. Пусть также для искомой аппроксимации выбран класс моделей $\tilde{f}(x) = ax^2 + bx + c$, где a, b, c – параметры модели. Эмпирическим риском в данном случае будем считать среднеквадратичное отклонение:

$$Q = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\tilde{f}(x_i) - f_i)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (ax_i^2 + bx_i + c - f_i)^2.$$

Тогда решение задачи аппроксимации функции $f(x)$ заключается в нахождении «оптимальных» коэффициентов $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ путем минимизации эмпирического риска Q по параметрам a, b, c .

В общем случае функция эмпирического риска имеет вид

$$Q = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(\tilde{f}(x_i), f_i),$$

где l называется *функцией потерь* и отражает, насколько сильно модель «ошибается» в отношении конкретного примера из выборки данных. Выбор функции

потерь зависит от поставленной задачи. В рассматриваемом примере $l = (\tilde{f}(x_i) - f_i)^2$.

Дедуктивное обучение предполагает формализацию знаний экспертов и их перенос в компьютер в виде базы знаний. Дедуктивное обучение принято относить к области *экспертных систем* [14]. Это компьютерные системы, способные частично заменить специалиста-эксперта в разрешении проблемной ситуации. В информатике экспертные системы рассматриваются совместно с базами знаний как модели поведения экспертов в определённой области с использованием процедур логического вывода и принятия решений, а базы знаний — как совокупность фактов и правил логического вывода в выбранной предметной области деятельности.

Примерами экспертных систем являются поисковые или справочные (энциклопедические) системы. По запросу пользователя они предоставляют наиболее подходящие (релевантные) разделы базы статей (представления об объектах областей знаний, их виртуальную модель). Ещё одним известным примером является *WolframAlpha* — база знаний и набор вычислительных алгоритмов, интеллектуальный «вычислительный движок».

Ниже в работе рассмотрены вопросы применения технологии нейронных сетей и модели нелинейной регрессии, которые относятся к первому типу машинного обучения (обучение по прецедентам).

2.2 Применение нейронных сетей в задачах многомерной аппроксимации

Рассмотрим нелинейное отображение типа «вход-выход»

$$D = f(x),$$

где x — входной сигнал, а D — выходной сигнал (отклик). Функция $f(x)$ является неизвестной.

Ставится задача аппроксимации функции $f(x)$ некоторой функцией $F(x)$ с заданной точностью $\varepsilon > 0$ в норме соответствующего функционального пространства:

$$\|F(x) - f(x)\| < \varepsilon, \quad \forall x \in \Omega,$$

Ω — некоторое множество из области определения $f(x)$.

Решение указанной задачи аппроксимации предлагается проводить с помощью технологии нейронных сетей или, точнее, определять искомую функцию $F(x)$ в процессе *обучения* некоторой нейронной сети.

С математической точки зрения, обучение нейронных сетей — это многопараметрическая задача нелинейной оптимизации.

Основной принцип применения технологии нейронных сетей к многомерной аппроксимации применительно к задачам исследования комплексного физического воздействия сводится к следующему. Результаты моделирования одного

физического процесса, а именно совокупность точек на поверхности или внутри облучаемого объекта и рассчитанные в этих точках значения физической величины, используются в качестве *обучающего множества* для определенного типа нейронной сети, а совокупность точек, в которых необходимо рассчитать приближенные значения физической величины для моделирования другого физического процесса, определяются как *целевое множество*. Затем нейронная сеть с использованием определенных стохастических алгоритмов оптимизации [14, 15] «учится» аппроксимировать функцию, описывающую поведение физической величины в данной точке, опираясь на обучающее множество.

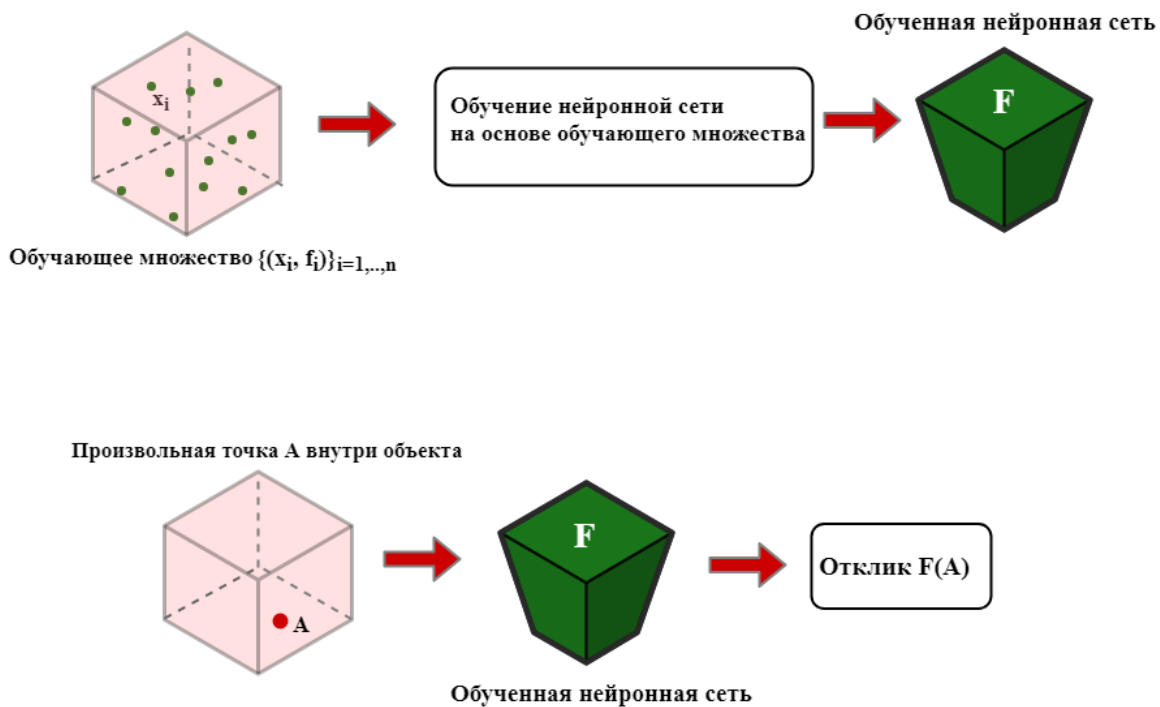


Рис. 2 – Схема применения нейронной сети для аппроксимации функции и вычисления отклика в точке A целевого множества

В процессе обучения происходит настройка всех внутренних параметров сети и её архитектуры. После обучения сети значения искомых физических величин в точках целевого множества являются результатом отклика нейронной сети, топология и числовые характеристики которой получены в процессе её обучения (настройки). Схема обучения и вычисления отклика нейронной сети представлена на Рис. 2.

Существует несколько типов нейронных сетей, применяемых в задачах аппроксимации функций многих переменных: многослойный персептрон (MLP), сети на основе радиальных базисных функций (RBF) [15, 16], сети каскадной корреляции (CNN) [16]. Эти сети различаются архитектурой и способами обучения. Сети CNN и многослойный персептрон являются примерами нелинейных многослойных сетей прямого распространения сигнала. Сеть RBF также является нелинейной сетью прямого распространения, но содержит лишь один слой

нейронов, обладающих определенными свойствами. Эти сети являются универсальными аппроксиматорами [17]. Основное отличие между ними заключается в том, что MLP и CNN обеспечивают глобальную аппроксимацию нелинейного отображения, в то время как сеть RBF создает локальную аппроксимацию исследуемой функции. Во многих практических случаях многослойный персептрон является более эффективным инструментом в задачах аппроксимации функции многих переменных, а также имеет способность к сглаживанию аппроксимирующей функции. Недостатком же персептрона является фиксированная топология. В свою очередь, сеть каскадной корреляции является динамической, т.е. её топология настраивается автоматически в процессе обучения. Однако, CNN не обладает эффектом сглаживания, что в некоторых случаях является существенным недостатком.

Подробно вопросы применения нейронных сетей в рассматриваемых задачах многомерной аппроксимации рассмотрены в работе [11].

Ещё одним подходом к решению задачи многомерной аппроксимации может быть модель нелинейной регрессии [12,18]. Этот подход и способ его реализации применительно к рассматриваемым задачам будут рассмотрены рассмотрены в следующей работе.

3 Многомерная аппроксимация в задачах комплексного воздействия излучения

Математическое моделирование комплексного физического воздействия ионизирующего излучения подразумевает использование результатов расчетов первичного физического процесса (переноса излучения) для компьютерного моделирования вторичных (радиационно-индуцированных) процессов. Таким образом, актуальной является задача многомерной аппроксимации.

3.1 Типы аппроксимации

В рассматриваемых задачах можно выделить несколько типов аппроксимации, применяемых в зависимости от характера физической величины, которую необходимо аппроксимировать, от геометрии и свойств материала облучаемого объекта, а также от характеристик источника излучения. Назовем эти типы глобальная аппроксимация, локальная аппроксимация и локальная аппроксимация по целевому множеству.

Глобальная аппроксимация подразумевает поиск одной аппроксимирующей функции для физической величины во всем объекте (на всей области определения искомой функции). В этом случае для обучения моделей аппроксимации используются сразу все точки обучающего множества, а отклик модели в точках целевого множества вычисляется одновременно с использованием одной настроенной модели аппроксимации.

Локальная аппроксимация заключается в разбиении рассматриваемой области (объекта) на подобласти, в каждой из которых строится своя аппроксимирующая функция. Отклик такой модели в точках целевого множества осуществляется следующим образом. Сначала определяется, в какую из подобластей попадает точка целевого множества, а затем приближенное значение физической величины в этой точке рассчитывается с помощью аппроксимирующей функции, которая была построена для этой подобласти. Этот процесс производится для каждой точки целевого множества.

Локальная аппроксимация по целевому множеству заключается в следующем. Рассматривается фиксированная точка P целевого множества. Выделяется некоторая подобласть, содержащая указанную точку так, чтобы в нее попадало некоторое количество точек N_i обучающего множества, достаточное для построения аппроксимирующей функции в этой подобласти (эмпирическое значение N_i определяется для конкретной задачи и, как правило, не превышает 100). Далее с использованием некоторого аппроксиматора (нейронной сети или модели нелинейной регрессии) строится аппроксимирующая функция в указанной подобласти с использованием точек обучающего множества, которые в неё попали. Затем вычисляется значение этой функции в точке P . Процесс повторяется для всех точек целевого множества. При таком подходе подобласти, о которых идет речь, будут, вообще говоря, пересекаться, что обеспечивает достаточно плавный переход между приближенными значениями физической величины, рассчитанными в близких точках целевого множества. Построение аппроксимации и получение отклика выполняется последовательно для каждой точки целевого множества.

Глобальная аппроксимация хорошо воспроизводит гладкие функции, которые не испытывают сильных скачков или флуктуаций. Локальная аппроксимация является эффективной, когда область можно разделить на подобласти, в каждой из которых можно применить глобальный тип аппроксимации. То есть, если априори известно, что в таких подобластях функция ведет себя достаточно гладко и имеет малое количество экстремумов. Локальная аппроксимация по целевому множеству применима для функций, не обладающих гладкостью, имеющих неопределенное количество резких скачков, или когда нет никакой априорной информации о свойствах гладкости аппроксимируемой функции.

Основное отличие глобальной и локальной аппроксимации от локальной аппроксимации по целевому множеству заключается в том, что первые два типа опираются, как правило, на априорную информацию об аппроксимируемой функции и геометрическую структуру исходного объекта, их построение проводится независимо от целевого множества, в то время, как третий тип аппроксимации «привязан» главным образом к структуре и расположению точек целевого множества.

Рассмотрим пример. Пусть прямоугольная пластина, часть которой сделана из материала A , а другая часть — из материала B , с различными физическими свойствами, облучается рентгеновским излучением (рис. 3). В результате взаимодействия излучения с веществом в пластине выделяется энергия W , которая рассчитана на некотором множестве точек Ω_{rr} (обучающее множество —

$\{W(\Omega_{tr}), \Omega_{tr}\}$). Необходимо построить функцию, аппроксимирующую энерговыделение в произвольной внутренней точке пластины (исключая границу между материалами A и B).

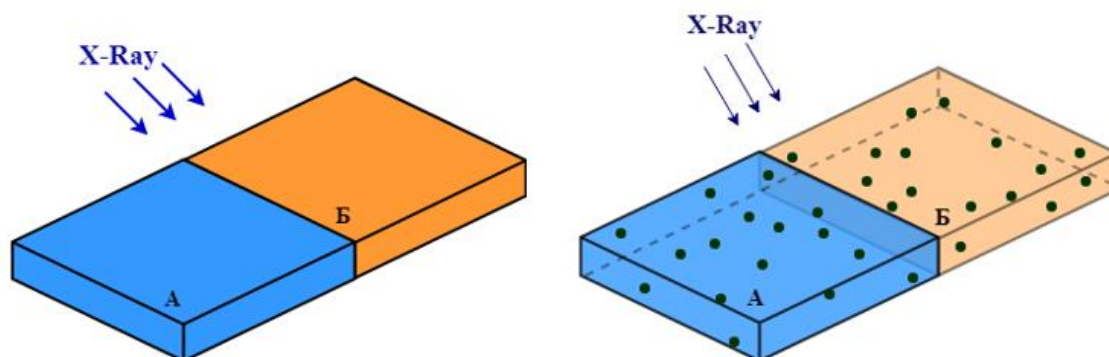


Рис. 3 – Прямоугольная пластина, состоящая из разных материалов. Точками показано множество Ω_{tr}

Для решения этой задачи разобьем пластину на две подобласти A и B . Такой выбор подобластей обусловлен различием свойств материалов и геометрией объекта. В каждой подобласти строится своя аппроксимирующая функция (F_A и F_B соответственно) с использованием своего обучающего множества ($\{W(\Omega_{tr}^A), \Omega_{tr}^A\}$ и $\{W(\Omega_{tr}^B), \Omega_{tr}^B\}$ соответственно). То есть в данном случае применяется локальная аппроксимация. Результаты аппроксимации при этом будут применимы для любого целевого множества, не содержащего граничных точек между A и B .

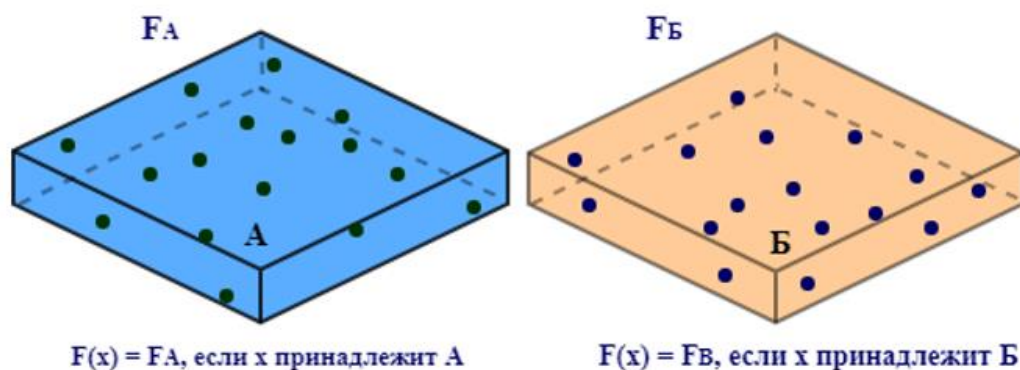


Рис. 4 – Локальная аппроксимация. Для каждой подобласти обучающими являются множества $\{W(\Omega_{tr}^A), \Omega_{tr}^A\}$ и $\{W(\Omega_{tr}^B), \Omega_{tr}^B\}$ соответственно

Предположим теперь, что требуется рассчитать значения энерговыделения в точках, расположенных на стыке двух материалов в пластине. Для каждой целевой точки в таком случае можно построить окрестность с центром в этой точке. В каждой такой окрестности получить свою аппроксимирующую функцию, а затем рассчитать отклик в этой целевой точке. То есть в этом случае применяется локальная аппроксимация по целевому множеству.

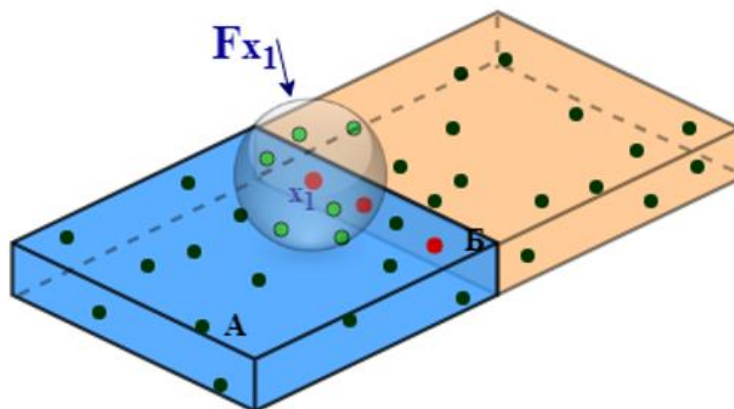


Рис. 5 – Пример построения локальной аппроксимации по целевому множеству

Построение аппроксимации схематично приведено на рис. 5. Красным цветом выделены точки на границе материалов. Схема приведена для точки целевого множества x_1 . Строится сфера с центром в этой точке, затем строится аппроксимирующая функция F_{x_1} с использованием обучающих точек, которые попали внутрь сферы (на рис. 5 выделены зеленым цветом).

3.2 О выборе типа аппроксимации

Следует отметить, что типы аппроксимации, рассмотренные в предыдущем пункте, не вполне идентичны строгим математическими понятиями глобальной и локальной аппроксимации [19]. Описанные выше разновидности подходов к решению задачи многомерной аппроксимации сформулированы в силу специфики задач исследования комплексного физического воздействия ионизирующего излучения на объекты и априорной информации о функциях, описывающих физические величины, которые необходимо аппроксимировать в таких задачах.

Одним из важных факторов при решении вопроса о выборе одного из рассмотренных типов аппроксимации является наличие и количество экстремумов у функции, описывающей исследуемую физическую величину, а также априорная информация о гладкости этой функции.

Рассмотрим несколько типичных ситуаций, в которых удастся сделать наиболее эффективный выбор подхода к построению аппроксимирующей функции.

- Пусть известно, что функция, которую необходимо аппроксимировать, обладает малым числом экстремумов (например, 1 или 2), а также является достаточно гладкой. В этом случае эффективно применять глобальную аппроксимацию и строить одну аппроксимирующую функцию на всей исследуемой области (для объекта целиком). Такая ситуация рассмотрена в работе [11].

- Если искомая функция имеет конечное небольшое число экстремумов (например, до 50), происхождение которых можно физически интерпретировать и локализовать (например, если положения экстремумов имеют регулярную геометрическую структуру), то представляется целесообразным использовать локальную аппроксимацию с разбиением исходного объекта на подобъекты, содержащие по одному или несколько экстремумов. Пример такой конфигурации рассмотрен ниже в этой работе.
- В случае, когда аппроксимируемая функция не обладает гладкостью и имеет большое количество экстремумов, расположение которых неизвестно, эффективным является применение локальной аппроксимации по целевому множеству. Такая аппроксимация чувствительна к сильным изменениям на коротких пространственных промежутках и способна их правильно учесть, что особенно важно для стохастических структур, например для гетерогенных сред пористого типа.

Таким образом, важную роль при выборе способа аппроксимации играет имеющаяся априорная информация о свойствах функциональной зависимости физической величины, которую необходимо аппроксимировать. Это позволяет сделать правильный выбор типа аппроксимации и адекватно интерпретировать полученные результаты.

Далее в работе рассмотрены несколько типичных ситуаций, иллюстрирующих приведенные соображения на примере задачи аппроксимации плотности энерговыделения в объектах разных конфигураций из материалов с различными свойствами.

4 Моделирование энерговыделения излучения

В этом разделе приведены результаты применения разработанной технологии аппроксимации результатов статистического моделирования энерговыделения $\{W(\Omega_{tr}), \Omega_{tr}\}$, рассчитанных в точках множества дискретной детекторной системы Ω_{tr} , на множество точек Ω_{tg} – центров ячеек термодинамической разностной сетки.

В качестве обучающего множества в рассмотренных примерах используется совокупность точек четырехмерного пространства $\{W(\Omega_{tr}), \Omega_{tr}\}$, целевым множеством является Ω_{tg} .

4.1 Однородная среда

Рассмотрим пример, в котором однородная металлическая пластина в форме прямоугольного параллелепипеда облучается аксиально симметричным пучком проникающего излучения (Рис. 6). Предполагается, что распределение интенсивности излучения в плоскости, перпендикулярной оси пучка, близко к гауссовому.

Ось пучка перпендикулярна одной из поверхностей пластины (Рис. 6). В качестве оси z декартовой системы координат выбрана ось пучка излучения.

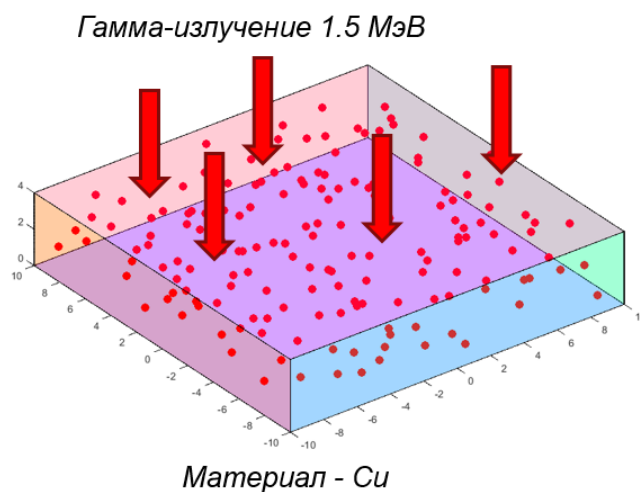


Рис. 6 – Вычислительный эксперимент с однородной металлической пластиной. Красными точками обозначена детекторная система

В качестве центров детекторов регистрирующей системы используется совокупность равномерно распределенных по объему пластины точек. Все детекторы имеют форму шара одинакового размера. Детекторы не пересекаются между собой.

Пусть задана прямоугольная разностная сетка для численного решения задачи термодинамики, источником тепла в которой являются результаты моделирования энерговыделения излучения.

Требуется перенести значения плотности энерговыделения из точек детектирующей системы в центры ячеек термодинамической разностной сетки (Рис. 7) для дальнейшего численного моделирования радиационно-индуцированных термодинамических эффектов.

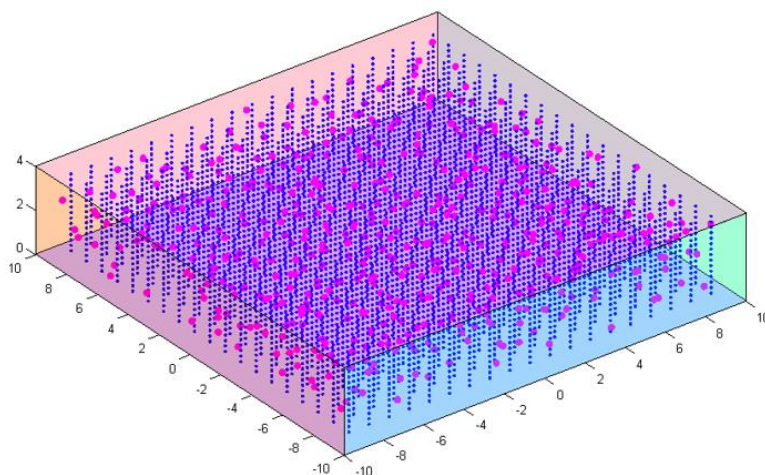


Рис. 7 – Центры ячеек термодинамической сетки отмечены синим цветом (целевое множество), центры детекторов – цветом magenta

Априорная информация о задаче позволяет сделать утверждать, что функция распределения энерговыделения $W(x, y, z)$ в пластине является гладкой, а при любом фиксированном z^* функция $W(x, y; z^*)$ аксиально симметрична и имеет один экстремум.

Имея в виду указанные свойства функции W , в рассматриваемой ситуации использовалась глобальная аппроксимация, то есть была построена единая аппроксимирующая функция $F(\Omega_{tg})$ для всей расчетной области (для всего объекта).

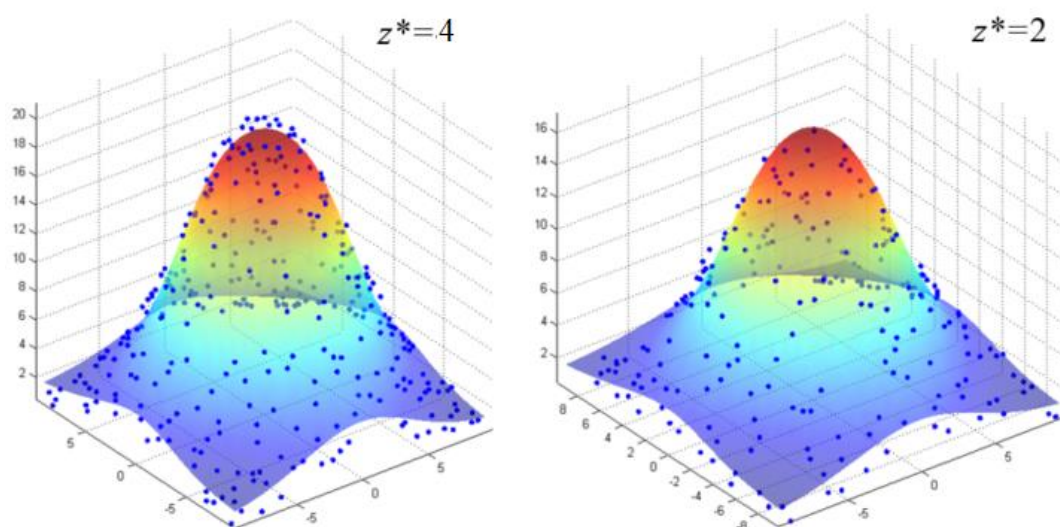


Рис. 8 – Синие точки – значения функции $W(\Omega_{tr}(x, y, z^*))$ вблизи $z=z^*$;
поверхность – функция $F(\Omega_{tg}(x, y, z^*))$

На рис. 8 приведен пример построения такой аппроксимации с помощью многослойного персептрона. Для визуальной оценки качества аппроксимации делается срез целевого множества при некотором значении $z=z^*$ и рассчитывается значение энерговыделения в этих точках, полученное с помощью нейронной сети. Затем выбираются точки множества Ω_{tr} , которые отстоят от плоскости $z=z^*$ на расстояние, меньшее, чем размер детектора. Поверхность, изображенная на рис. 8, представляет собой графическое изображение отклика построенной нейронной сети (многослойного персептрона) в точках целевого множества $\Omega_{tg}(x, y, z^*)$.

Приведенный пример показывает, что в ряде случаев многослойный персептрон применим для аппроксимации результатов статистического моделирования процессов переноса излучения с удовлетворительной точностью. Использование персептрона позволяет сглаживать нефизичные флуктуации результатов моделирования.

4.2 Гетерогенные материалы регулярной замкнуто-ячеистой структуры

Рассмотрим следующий пример. Пусть объект кубической формы со стороной 90 мкм, состоящий из наполнителя (эпоксидная смола) и алюминиевых сферических включений (рис. 9) облучается рентгеновским излучением с энергией 20 кэВ. Источник излучения – плоский, направление потока фотонов перпендикулярно верхней грани куба (рис. 9). Включения имеют одинаковый размер (диаметр 20 мкм) и расположены регулярным образом так, как изображено на рис. 9.

Внутри объекта построена регистрирующая система, состоящая из равномерно распределенных непересекающихся сферических детекторов (диаметр 2 мкм). Каждый детектор целиком находится либо в наполнителе, либо во включении. В точках-центрах детекторов (Ω_D) с помощью статистического моделирования каскадных процессов переноса излучения [2] рассчитана плотность энерговыделения W_D .

Кроме того, задана прямоугольная декартова разностная сетка для численного моделирования термодинамических процессов, являющихся следствием энерговыделения излучения при прохождении фотонов через вещество. Необходимо вычислить значения плотности энерговыделения в точках-центрах термодинамической сетки (Ω_T) с помощью технологии многомерной аппроксимации.

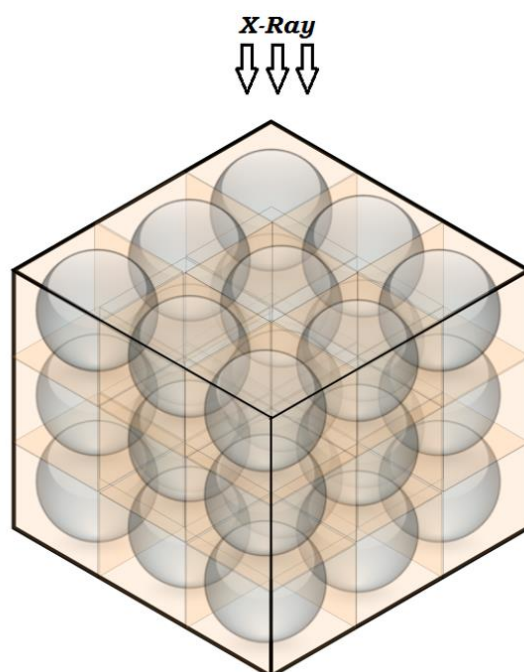


Рис. 9 – Куб, содержащий 27 сферических включений

Множество $\{\Omega_D, W_D\}$ является обучающим множеством. Количество детекторов в рассматриваемом примере составило $N_D = 4320$.

Целевым множеством является множество центров ячеек заданной термодинамической разностной сетки Ω_T , количество точек целевого множества $N_T = 91125 (45^3)$.

Отметим следующее. Свойства связующего и материала включений таковы, что значения энерговыделения внутри включений априори выше, чем значения энерговыделения в связующем. Поэтому можно предположить, что функция, которую необходимо аппроксимировать, имеет количество экстремумов, равное количеству включений в материале объекта, в данном случае – 27. Экстремумы достигаются в центрах включений. Это предположение подтверждается результатами статистического моделирования. Изображение функции распределения плотности энерговыделения в детекторах, находящихся на расстоянии, меньшем, чем размер детектора, от плоскости $z=45$ мкм, приведено на рис. 10 (поверхность построена с помощью триангуляции Делоне).

Очевидны следующие свойства симметрии функции распределения энерговыделения $W(x, y, z)$ в рассматриваемом объекте. W должна обладать свойствами осевой симметрии в каждом горизонтальном слое объекта $z = const$. Ось симметрии проходит через центр куба перпендикулярно верхней грани.

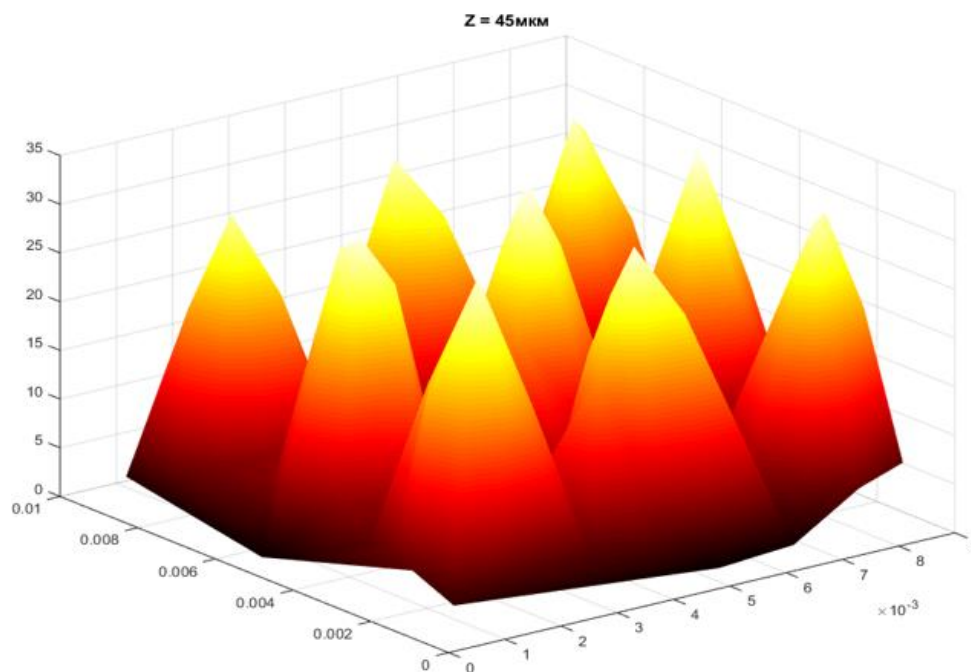


Рис. 10 – Энерговыделение (отн. ед.) в кубе на глубине $z=45$ мкм

Разобьем объект на 27 кубических частей, каждая из которых содержит внутри себя одно включение (Рис. 9). Введем нумерацию для каждой части ($C_i, i = 1, \dots, 27$), как это показано на рис. 11.

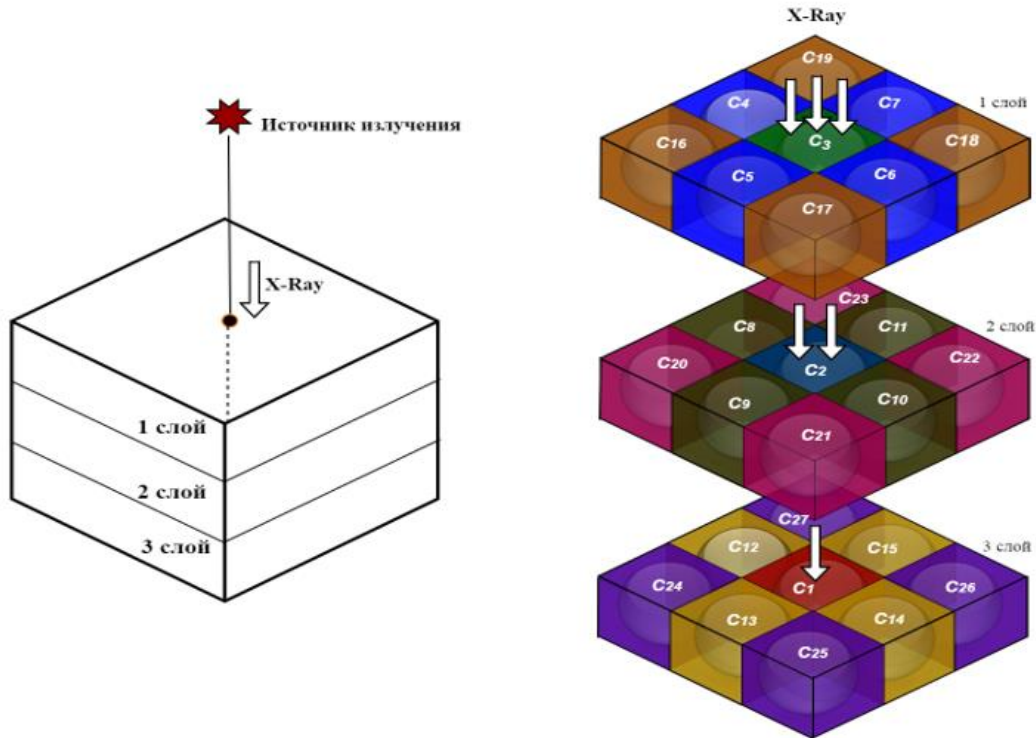


Рис. 11 – Разбиение объекта на части кубической формы.
Области, выделенные одинаковым цветом, имеют одинаковую плотность
энерговыведения

Очевидно, что в областях, выделенных одинаковым цветом на рис. 11 (области, симметричные относительно центральной оси объекта $x = y = 45$ мкм), плотность энерговыведения должна быть одинаковой.

Приведенные соображения позволяют сделать вывод о том, что в рассматриваемом примере уместно применение локальной аппроксимации с использованием многослойного персептрона независимо в каждой из 27 частей объекта. При этом для областей, симметричных относительно указанной оси куба, целесообразно проведение симметризации полученных результатов. Это позволяет снизить как погрешность аппроксимации, так и сгладить нефизичные флуктуации статистического моделирования переноса излучения.

Множества Ω_D и Ω_T также представляются в виде 27 частей соответственно введенному разбиению объекта. На рис. 12 – 14 изображены эти части в каждом из «горизонтальных» слоев.

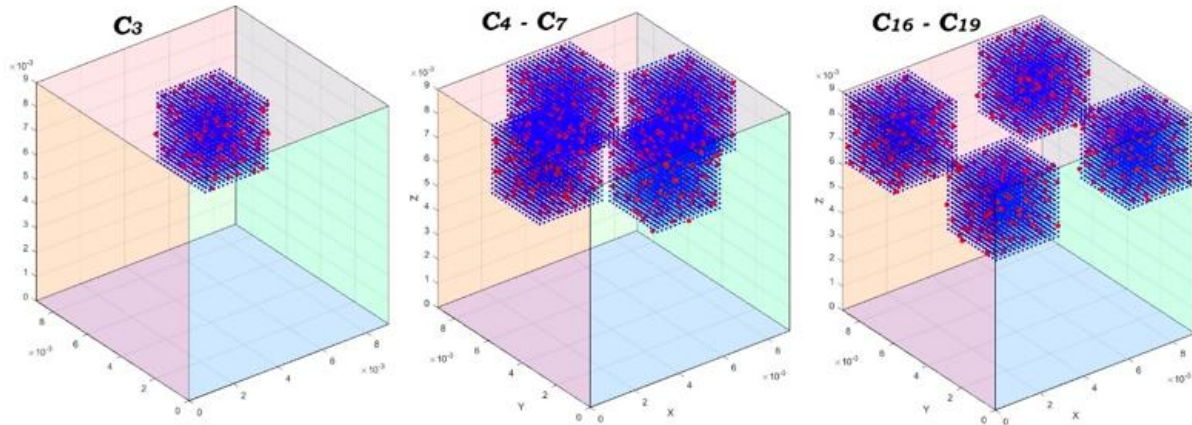


Рис. 12 – Подмножества Ω_D и Ω_T в верхнем слое.
Области $C_4 - C_7$ и $C_{16} - C_{19}$ симметричны относительно центральной оси

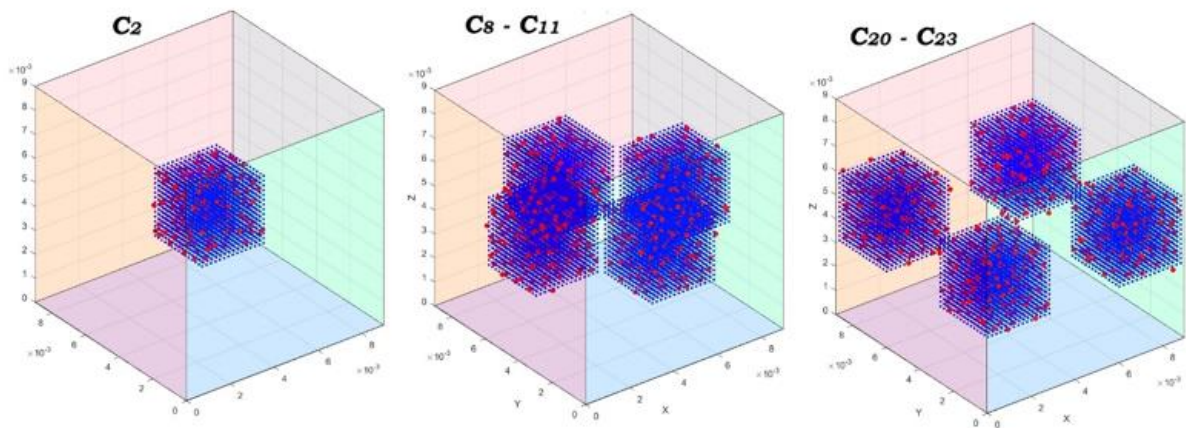


Рис. 13 – Подмножества Ω_D и Ω_T в среднем слое.
Области $C_8 - C_{11}$ и $C_{20} - C_{23}$ симметричны относительно центральной оси

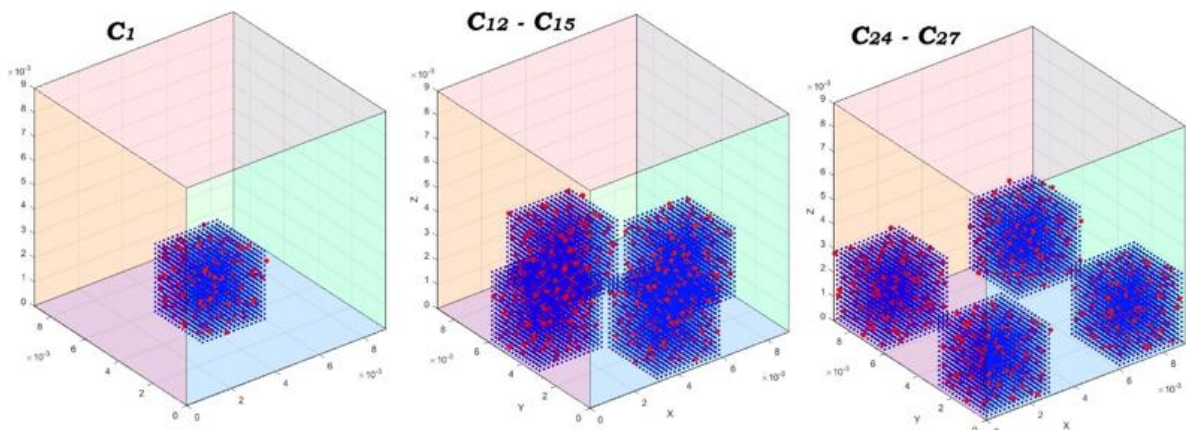


Рис. 14 – Подмножества Ω_D и Ω_T в нижнем слое.
Области $C_{12} - C_{15}$ и $C_{24} - C_{27}$ симметричны относительно центральной оси

Для построения аппроксимирующей функции энерговыделения в каждой из 27 подобластей был сконструирован и обучен многослойный персептрон с топологией 3-7-5-1. Топология была подобрана экспериментальным путем для одной подобласти. Так как все части объекта схожи по своим геометрическим характеристикам и качественный характер аппроксимируемой функции одинаков, такую топологию персептрона можно использовать для всех 27 частей.

Для точек целевого множества в каждой части объекта вычислялся отклик соответствующей нейронной сети (многослойного персептрона). Затем для тех областей, в которых априори значения энерговыделения должны быть одинаковы, отклик сети усреднялся по этим областям. Например, для частей объекта $C_{12} - C_{15}$ результирующий отклик F_{1k} вычисляется как среднее значение

$$F_{1k} = \sum_{m=2}^5 F_{1m}, k = 2, 3, 4, 5.$$

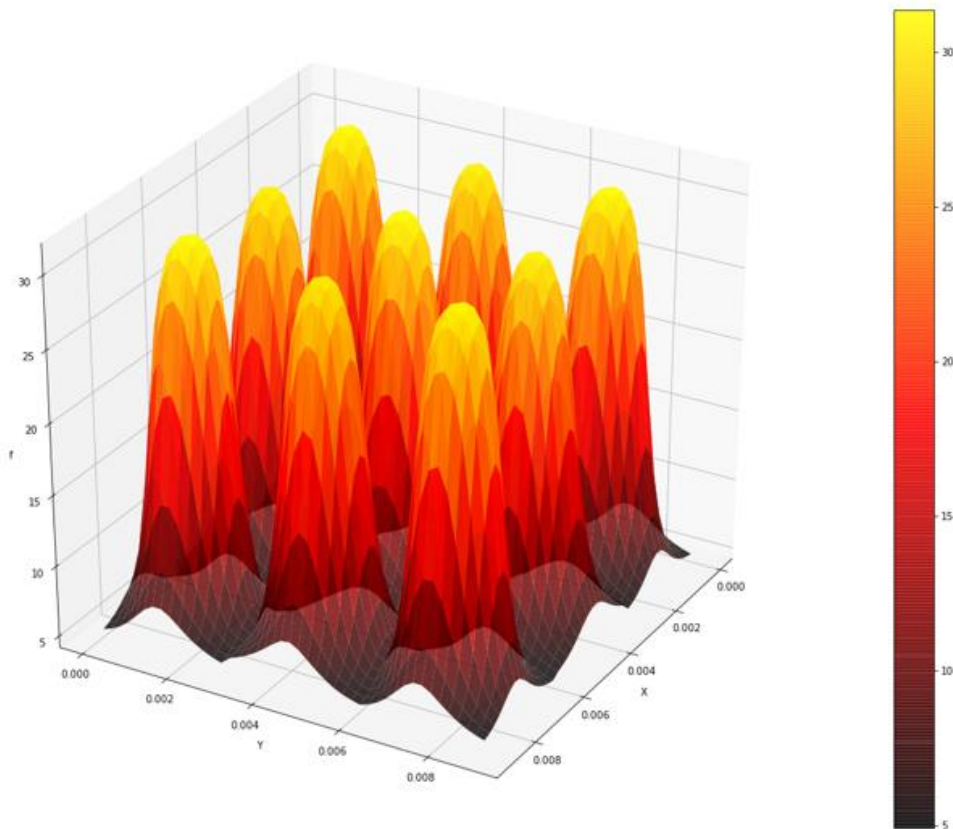


Рис. 15 – Значения энерговыделения (отн. ед.)
в точках целевого множества на глубине $z=45$ мкм

Результаты вычисления энерговыделения в точках целевого множества Ω_T представлены на рис. 15 – 17.

На рис. 15 – 17 плотность энерговыделения изображена в цветовой модели «hot», цветовая шкала в относительных единицах приведена на рис. 15.

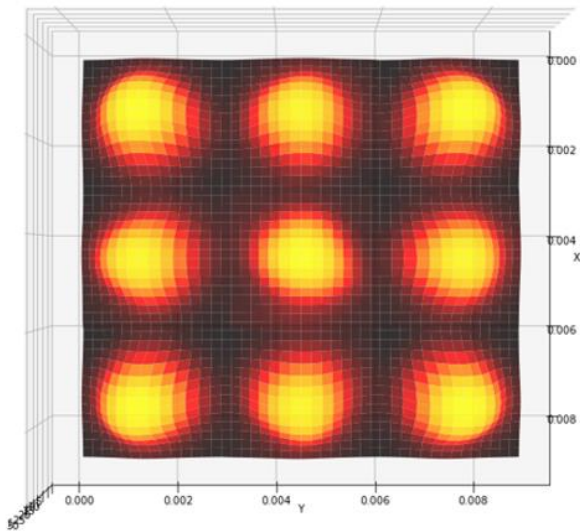


Рис. 16 – Значения энерговыведения в точках целевого множества на глубине $z=45$ мкм. Вид сверху

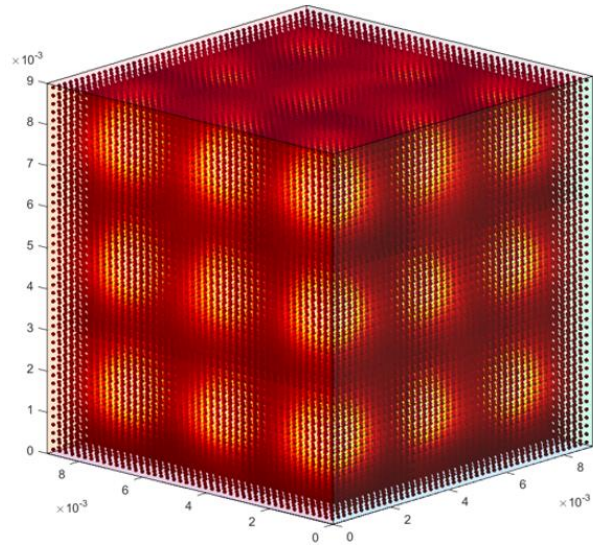


Рис. 17 – 3D распределение энерговыведения в объекте

Результаты предложенного способа аппроксимации энерговыведения, рассчитанного в точках регистрирующей системы методом Монте-Карло, на множество точек термодинамической сетки показало удовлетворительное качество. При этом сохранены априорные свойства функции распределения энерговыведения.

Заключение

Разработан подход для моделирования плотности источников радиационно-индуцированных вторичных эффектов в объектах, находящихся в полях ионизирующих излучений. Основу подхода составляет многомерная аппроксимация результатов статистического моделирования взаимодействия излучения с веществом объекта на разностную сетку, предназначенную для численного решения уравнений термодинамики. Сформулированы различные типы аппроксимации с учетом специфики задач исследования комплексного физического воздействия ионизирующего излучения на объекты и априорной информации о функциях, описывающих физические величины, которые необходимо аппроксимировать в таких задачах:

- глобальная аппроксимация;
- локальная аппроксимация;
- локальная аппроксимация по целевому множеству.

Примеры расчета плотности энерговыведения в однородных средах и материалах с регулярной замкнуто-ячеистой структурой показали применимость и эффективность предложенного подхода. В этих примерах для решения задачи многомерной аппроксимации в рассматриваемых задачах применяется глобальный и локальный типы аппроксимации. Реализация этих типов проведена с применением технологии нейронных сетей (многослойного персептрона).

В дальнейших исследованиях предполагается рассмотреть гетерогенные материалы пористого типа. Для таких материалов будет применяться локальная по целевому множеству аппроксимация, которая будет реализована с применением модели нелинейной регрессии.

Библиографический список

1 Zhukovskiy M.E., Podoliako S.V., Markov M.B., Uskov R.V., Bellon C., Jaenisch G.-R. Supercomputing the cascade processes of radiation transport. 19th WCNDT - World conference on nondestructive testing (Proceedings) (2016), <http://www.ndt.net/article/wcndt2016/papers/p49.pdf>.

2 Жуковский М.Е., Усков Р.В., Гибридное распараллеливание алгоритмов моделирования каскадных процессов переноса излучения // Матем. моделирование, 27:5 (2015), 39–51 <http://mi.mathnet.ru/mm3598>.

3 Ефремов В.П., Потапенко А.И. Термомеханические процессы в гетерогенных материалах под действием интенсивных потоков энергии // Теплофизика высоких температур. 2010. том 48. № 6. с. 1–7.

4 Березин А.В., Жуков Д.А., Жуковский М.Е., Конюков В.В., Крайнюков В.И., Марков М.Б., Помазан Ю.В., Потапенко А.И. Моделирование электромагнитных эффектов в сложных конструкциях при воздействии импульсных излучений // Мат. моделир. и числ. методы, 2015, № 6, 58–72 <http://mi.mathnet.ru/mmcm43>.

5 Zhukovskiy M., Podoliako S., Jaenisch G.-R., Bellon C., Samadurau U. Monte Carlo Simulation Tool with CAD Interface. // Review of Progress in Quantitative Non-destructive Evaluation, Vol. 25, P. 574-579 (2006).

6 Березин А.В., Воронцов А.С., Жуковский М.Е., Марков М.Б., Паротькин С.В. Метод частиц для электронов в рассеивающей среде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 55:9 (2015), 1566–1578 <http://mi.mathnet.ru/zvmmf10269>.

7 Жуковский М.Е., Усков Р.В., Математическое моделирование радиационной эмиссии электронов на гибридных суперкомпьютерах // Выч. мет. программирование, 13:1 (2012), 271–279 <http://mi.mathnet.ru/vmp29>.

8 Markov M., Podolyako S. and Uskov R., Zhukovskiy M. Hybrid parallelization of computing the electron fluxes produced by photon radiation // Mathematica Montisnigri. Vol XXXI (2014), 43-53. <http://www.montis.pmf.ac.me/vol31/5.pdf>.

9 Гасилов В.А., Болдарев А.С., Дьяченко С.В., Ольховская О.Г., Карташева Е.Л., Болдырев С.Н., Багдасаров Г.А., Гасилова И.В., Бояров М.С., Шмыров В.А. Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы // Математическое моделирование, 2012, Т. 24, № 1, с. 55-87.

10 Повещенко Ю.А., Гасилова И.В., Тишкин В.Ф., Гасилов В.А., Ключкова Л.В. Разностные схемы на основе метода опорных операторов для задач динамики флюидов в коллекторе, содержащем газогидраты // Журн. вычисл. матем. и матем. физ., 2015, том 55, № 8, с. 57–71.

11 Egorova V., Zhukovskiy M. Handling of the radiative electron emission modeling results by use of the neural networks // MATHEMATICA MONTISNIGRI Vol XXXVIII (2017) p. 89-99.

12 Mitchell T. Machine Learning. – McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997. ISBN:0070428077 9780070428072.

13 Воронцов К. Курс лекций «Математические методы обучения по прецедентам», МФТИ, 2004-2008.

14 Васильев Ф.П. Методы оптимизации - Издательство «Факториал Пресс», 2002.

15 Хайкин С., Нейронные сети: полный курс, 2-е издание: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. –1104 с.

16 Осовский С. Нейронные сети для обработки информации: Пер. с польского. – М.: Финансы и статистика, 2002.

17 Горбань А.Н. Обобщенная аппроксимационная теорема и вычислительные возможности нейронных сетей // Сибирский журнал вычислительной математики, 1998, т. 1, № 1. — С. 12—24.

18 Seber G. A. F., Wild C. J. Nonlinear Regression. New York: John Wiley and Sons, 1989.

19 Калиткин Н.Н. Численные методы. - 2-е изд., исправленное. – Спб.: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.