



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 32 за 2019 г.



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

**Алексеев М.В., Егорова В.А.,  
Воронин Ф.Н., Жуковский М.Е.,  
Потапенко А.И., Усков Р.В.**

О моделировании  
радиационно-  
индуцированных  
термомеханических  
эффектов в гетерогенных  
материалах сложной  
дисперсной структуры

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** О моделировании радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных материалах сложной дисперсной структуры / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 32. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2019-32](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-32)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-32>

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

**М.В. Алексеев, В.А. Егорова, Ф.Н. Воронин,  
М.Е. Жуковский, А.И. Потапенко, Р.В. Усков**

**О моделировании радиационно-  
индуцированных термомеханических  
эффектов в гетерогенных материалах  
сложной дисперсной структуры**

**Москва — 2019**

Алексеев М.В., Егорова В.А., Воронин Ф.Н., Жуковский М.Е., А.И. Потапенко, Усков Р.В.

**О моделировании радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных материалах сложной дисперсной структуры.**

Разработана комплексная модель для суперкомпьютерного исследования параметров радиационно-индуцированных термомеханических полей в гетерогенных средах со сложной дисперсной структурой. Построен способ расчета параметров фотон-электронного каскада, генерируемого в объекте при взаимодействии излучения с веществом. Создана геометрическая модель среды с прямым разрешением ее микроструктуры. Составной частью геометрического описания среды является модель детектирующей системы для статистической оценки энерговыделения излучения. Основой для расчета термомеханических процессов выбрана идеальная гидродинамическая модель Эйлера динамики сжимаемой среды в консервативной форме. Приведены результаты демонстрационных расчетов параметров термомеханических полей.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, ионизирующее излучение, термомеханические эффекты, дисперсные структуры

Mikhail Vladislavovich Alekseev, Varvara Alekseevna Egorova, Fedor Nikolaevich Voronin, Mikhail Evgenievich Zhukovskiy, Andrey Ivanovich Potapenko, Roman Vladimirovich Uskov

On modeling of the radiation-induced thermo-mechanical effects in heterogeneous materials of complex dispersion structure.

A complex model for supercomputing the parameters of radiation-induced thermomechanical fields in heterogeneous media of complex dispersed structure is developed. A technique for calculating the parameters of the photon-electron cascade generated in the object by the interaction of radiation with matter is constructed. A geometric model of the medium with a direct resolution of its microstructure is worked out. A part of the geometric description of the medium is a model of the detecting system for the statistical evaluation of the energy deposit density of radiation. The ideal hydrodynamic Euler model of the compressible medium dynamics in a conservative form is chosen as the basis for the modeling of thermomechanical processes. The results of demonstration calculations of thermomechanical fields parameters are presented.

**Key words:** mathematical modeling, ionizing radiation, thermo-mechanical effects, the dispersed structure

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

## Оглавление

Введение .....	3
1 Геометрическая модель дисперсной среды .....	5
2 Статистическое моделирование переноса излучения в сложных дисперсных структурах .....	9
2.1 Построение траекторий частиц .....	10
2.2 Построение траекторий фотонов .....	11
2.3 Построение траекторий электронов .....	12
2.4 Весовая модификация алгоритма регистрации маловероятных событий. 14	
2.5 Об аппроксимации результатов статистического моделирования «источников» индуцированных эффектов .....	16
3 Моделирование термомеханических эффектов .....	18
3.1 Модель развития термомеханических эффектов .....	18
3.2 Пример расчета термомеханических полей .....	20
Заключение.....	22
Библиографический список.....	23

## Введение

Исследование функционирования сложных технических объектов в условиях комплексного воздействия ионизирующего излучения является актуальной научно-практической задачей. Излучение радиационных поясов, галактические и солнечные лучи взаимодействуют с веществом материалов космических аппаратов, электризуют конструкции, порождают тепловые и механические нагрузки. Эти радиационно-индуцированные эффекты разрушают защитные покрытия, нарушают работу приборных комплексов. Устойчивая работа спутника на орбите требует разработки и применения материалов, стойких к таким эффектам.

Детальное суперкомпьютерное моделирование на современной и перспективной сверхвысокопроизводительной вычислительной технике процессов взаимодействия ионизирующего излучения с веществом [1] в комплексе с сопутствующими тепловыми, механическими, электродинамическими механизмами, приводящими к деградации функциональных свойств материалов, является эффективным средством указанного исследования. Предсказательное компьютерное моделирование на этапе проектирования существенно снижает затраты на изучение свойств разрабатываемых материалов.

В современной инженерной практике материалы защитных покрытий чаще всего являются композиционными с замкнуто-ячеистой структурой. Сложная гетерогенная структура материала обеспечивает сохранение его свойств в условиях многофакторного воздействия ионизирующего излучения. Структура современных гетерогенных веществ настолько сложна, что необходим прямой учет микроячеистости материала в совокупности с целым набором физических факторов воздействия. Единственным перспективным путем решения пробле-

мы в настоящее время является математическое моделирование комплексных механизмов воздействия излучения на основе применения фундаментальных математических моделей с прямым учетом микроструктуры материала. Такое моделирование требует полномасштабного применения сверхвысокопроизводительной вычислительной техники и современных технологий распараллеливания (MPI, OpenMP, CUDA).

Одной из важных проблем моделирования комплексного воздействия ионизирующего излучения является совместное применение программных средств для оценки влияния различных взаимозависимых факторов на функциональные свойства объектов. Моделирование различных физических процессов проводят в различных физико-математических постановках с применением разных численных методов. Применение математических моделей и численных методов для компьютерного исследования процессов различной физической природы (взаимодействие излучения с веществом [2, 3], вторичные термодинамические эффекты [4]) обуславливает применение различных дискретных геометрических приближений для описания объекта, регистрирующей системы и расчетной области, в рамках которых моделируются рассматриваемые процессы.

В работах [5, 6] рассмотрена задача адекватного переноса результатов статистического моделирования энерговыделения излучения с детекторной системы, применяемой для оценки распределения источников тепла при моделировании взаимодействия излучения с веществом, на прямоугольную декартову термодинамическую разностную сетку. Эта задача решается с помощью различных методов аппроксимации, основанных на технологии машинного обучения [7].

Вычислительный эксперимент по исследованию радиационно-индуцированных термомеханических эффектов проводится в следующей последовательности:

- статистическое моделирование возникновения и развития фотон-электронного каскада [1 - 3], приводящее к энерговыделению излучения в веществе объекта, при этом облучаемые объекты описываются с помощью поверхностей (оболочек), ограничивающих гомогенные составляющие объекта [9 - 11], а в качестве детекторной (регистрирующей) системы используется совокупность равномерно распределенных детекторов сферической формы (рис. 1), в которых рассчитывается энерговыделение излучения;
- аппроксимация результатов моделирования фотон-электронного каскада с детекторной системы, применяемой для расчета энерговыделения излучения, на прямоугольную пространственную разностную сетку [8, 12] (рис. 2), число узлов которой превышает, как правило, количество «энергетических» детекторов в 10 и более раз; значения энерговыделения из энергетической детекторной системы необходимо «перенести» в центры ячеек разностной сетки для расчета вторичных термомеханических эффектов;

- численное решение системы уравнений термодинамики, описывающих процессы генерации и развития термодинамических и термомеханических эффектов [4, 8].

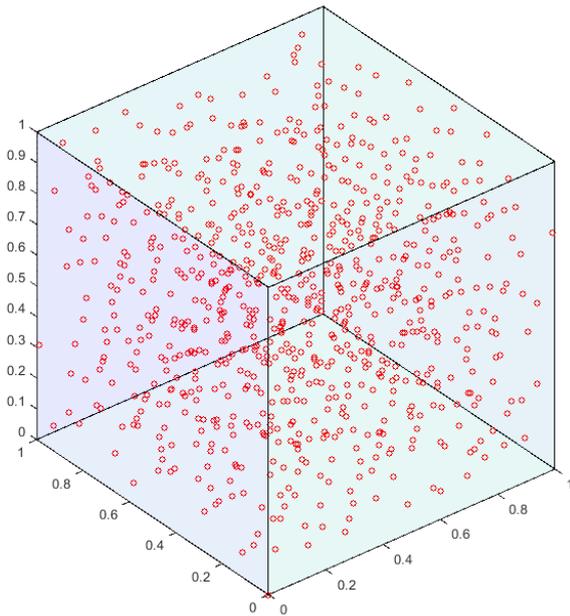


Рис. 1 – Пример детекторной системы для оценки энерговыделения (800 детекторов)

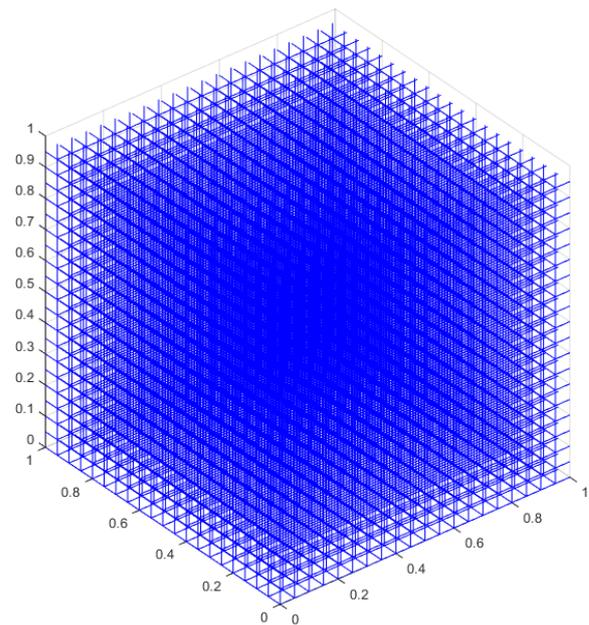


Рис. 2 – Пример разностной термодинамической сетки (20x20x20)

В настоящей работе представлены геометрическая модель дисперсной структуры; алгоритм статистического моделирования фотон-электронного каскада в гетерогенных средах с регулярной замкнуто-ячеистой структурой, математическая модель термомеханических эффектов, сопровождающих рассеяние ионизирующего излучения в материалах указанного типа. Модель основана на уравнениях газовой динамики для сильно неоднородной среды. Для численного решения уравнений использовалась консервативная разностная схема Годунова-Колгана [8]. Приведены результаты моделирования термомеханического воздействия потока фотонов на преграду, которая состоит из связующего и мелкодисперсных включений.

## 1 Геометрическая модель дисперсной среды

Рассмотрим фрагмент дисперсной структуры в виде объекта кубической формы со стороной 90 мкм, в котором в качестве связующего применяется эпоксидная смола, а включениями являются алюминиевые шарики диаметром 20 мкм, расположенные так, как показано на рис. 3.

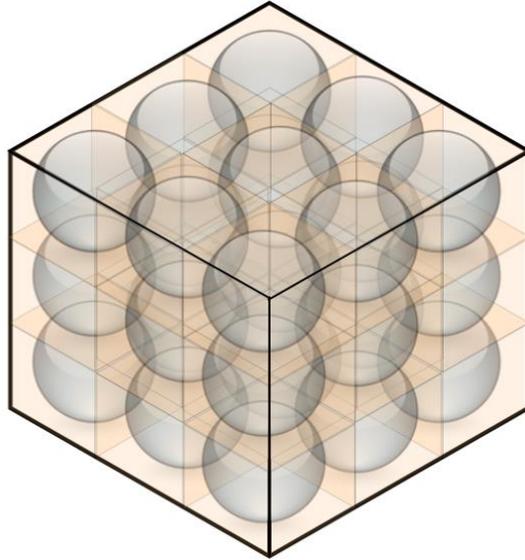


Рис. 3 – Куб, содержащий 27 сферических включений

При моделировании развития фотон-электронного каскада необходимо построить модель детекторной (регистрирующей) системы, которая является неотъемлемой частью геометрической модели среды.

Детекторы регистрирующей системы должны удовлетворять следующим требованиям.

- Каждый детектор должен целиком находиться внутри одного материала;
- Детекторы не должны пересекаться между собой.

Кроме того, число детекторов должно быть достаточным для передачи характерных особенностей распределения искомой величины (функционала), и в то же время размеры детекторов должны быть статистически значимыми, то есть содержать информацию, достаточную для оценки математического ожидания рассчитываемой величины (то есть не должны быть слишком малого размера).

С учетом сформулированных требований был выбран следующий алгоритм построения детектирующей системы для исследуемого фрагмента дисперсного материала.

Задается множество  $D_M = \{x_m, y_m, z_m; m = 1, \dots, M\}$  равномерно распределенных в кубе точек (с помощью, например, ЛПТау последовательностей И.М.Соболя).  $M$  выбирается исходя из имеющейся априорной информации о распределении искомого функционала.

Эти точки считаются центрами сферических детекторов, размер которых вначале полагается одинаковым для всех детекторов.

Далее в процессе размещения детекторов их центры остаются неподвижными, а размер может изменяться (уменьшаться). Алгоритм размещения следующий.

1. На точках-центрах детекторов строится триангуляция Делоне. Вся область внутри исследуемого объекта разбивается при этом на тетраэдры. В вер-

шинах тетраэдров лежат центры детекторов. Для наглядности на Рис. 3, Рис. 4 показаны начальное распределение детекторов и триангуляция Делоне для области с девятью точками. Длины ребер тетраэдров соответствуют расстояниям между центрами детекторов.

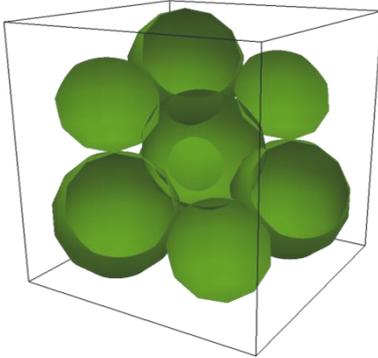


Рис. 4 – Начальное распределение детекторов в разрезе

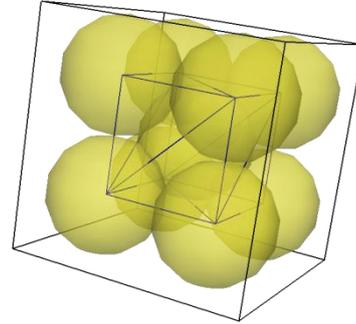


Рис. 5 – Триангуляция Делоне

- После триангуляции последовательно рассматриваем каждый из тетраэдров. Пусть  $R_{ij}, i = \overline{1,4}, j = \overline{i+1,4}$  – длины ребер между вершинами  $i$  и  $j$  в рассматриваемом тетраэдре,  $r_i, i = \overline{1,4}$  – радиусы детекторов с центрами в вершинах тетраэдра (Рис. 6). Рассмотрим расстояния вида:  $f_{ij} = R_{ij} - (r_i + r_j), i = \overline{1,4}, j = \overline{i+1,4}$ . Очевидно,  $f_{ij} \geq 0$ , если детекторы на данном ребре не пересекаются между собой, и  $f_{ij} < 0$  – в противном случае.

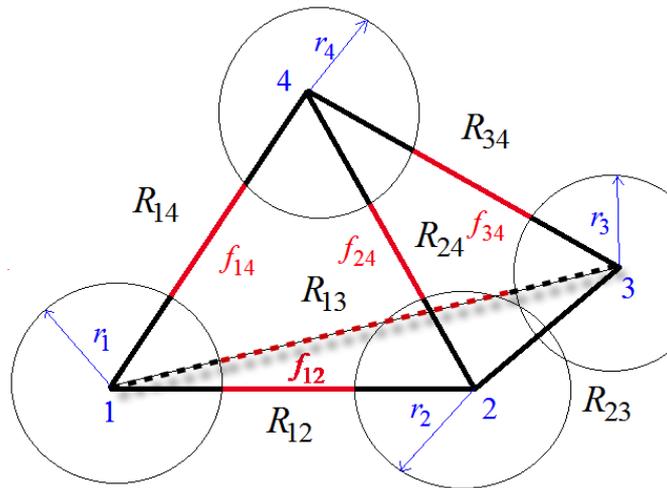


Рис. 6 – Схематичное изображение детекторов в вершинах тетраэдра

- Если на некотором ребре оказалось, что  $f_{ij} < 0$ , то уменьшим радиус одного из детекторов до следующего значения:  $r_i = R_{ij} - r_j$ . Таким образом, на данном ребре детекторы больше не пересекаются. Повторим этот шаг для всех ребер данного тетраэдра.
- Переходим к следующему тетраэдру и повторяем шаги 2-3. После того, как все тетраэдры рассмотрены, возвращаемся к первому тетраэдру и под-

считываем аналогично шагу 2 величины  $R_{ij}, i = \overline{1,4}, j = \overline{i+1,4}$  и  $f_{ij} = R_{ij} - (r_i + r_j), i = \overline{1,4}, j = \overline{i+1,4}$ . Если  $f_{ij} < 0$ , то удаляем один из детекторов  $i$  или  $j$ .

По окончании рассмотрения всех тетраэдров получаем набор заведомо непересекающихся детекторов. В конце алгоритма удаляем все детекторы, которые «захватывают» два и более гомогенных материала. Кроме того, удаляются все детекторы, размеры которых оказались «слишком» малыми (меньше наперед заданного минимума).

Блок-схема алгоритма изображена на Рис. 7.

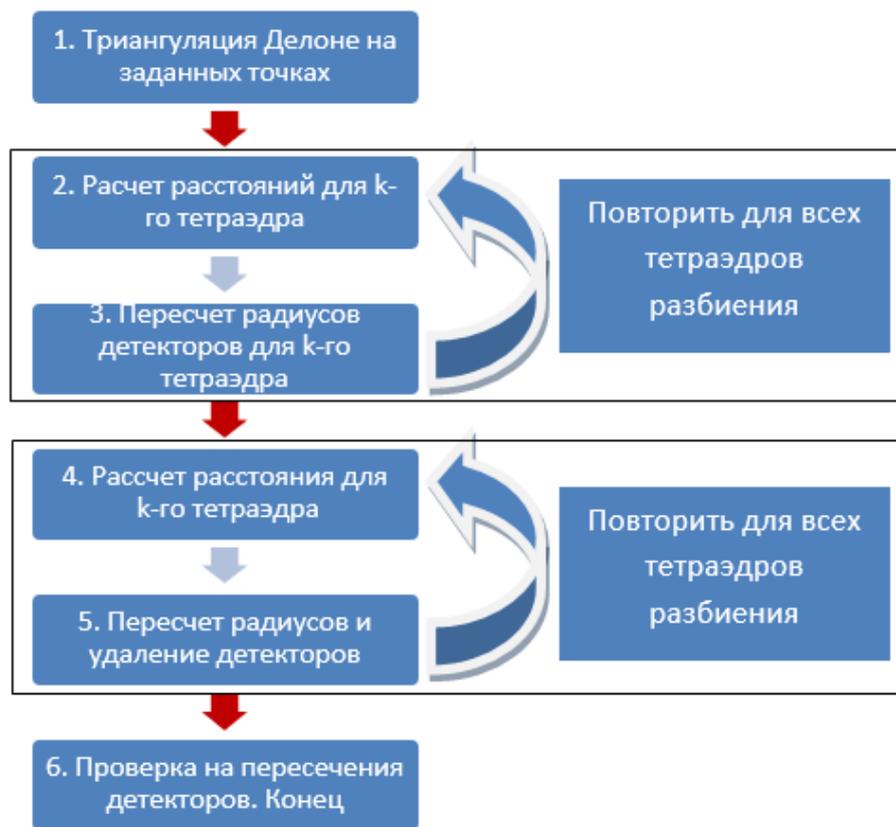


Рис. 7 – Блок-схема алгоритма

Пример работы алгоритма для модельного объекта с 9 сферическими детекторами представлен на Рис. 8.

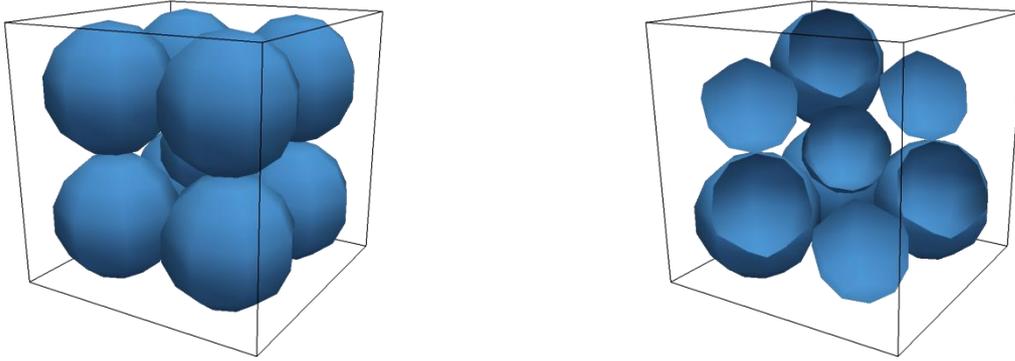


Рис. 8 – Результат применения алгоритма для модельного объекта (слева), в диагональном разрезе (справа)

Результат работы алгоритма для одного из 27 кубиков исследуемого фрагмента мелкодисперсного материала (Рис. 3) изображен на Рис. 9.

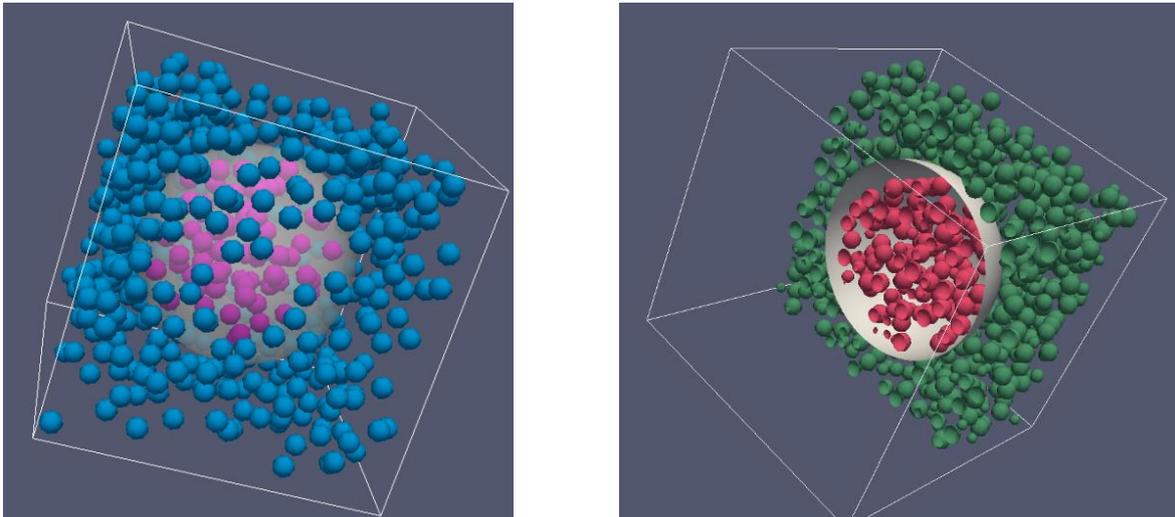


Рис. 9 – Построение детекторной системы для фрагмента (слева), в диагональном разрезе (справа), красным помечены детекторы внутри включения

Отметим, что построение детекторной системы проводится для одного из 27 кубиков облучаемого объекта – для остальных 26 регистрирующая система идентична. Всего для исследуемого фрагмента получилось около 24 тысяч детекторов. Отметим для сравнения, что актуальная термодинамическая сетка содержит более 700 тысяч ячеек.

## 2 Статистическое моделирование переноса излучения в сложных дисперсных структурах

Развитие гибридных вычислительных кластеров (НСС) позволило применить фундаментальную модель переноса электронов каскада [13]. Использование гибридной архитектуры гетерогенного кластера потребовало усовершенствования подхода к организации вычислений для достижения максимальной

производительности графического процессора и повышения эффективности одновременной загрузки CPU/GPU [3]. Главным образом это касается алгоритмов построения фотонных и электронных траекторий при статистическом моделировании взаимодействия излучения с композитными материалами сложной дисперсной структуры. Основное внимание уделено вопросу эффективного распределения вычислений между центральным и графическим процессорами [14]. Оптимизирован алгоритм регистрации маловероятных событий для повышения эффективности расчета энерговыделения при их прохождении частиц через материал облучаемого объекта.

## 2.1 Построение траекторий частиц

Геометрической основой для построения траектории частицы является результат трассировки объекта – интервалы пересечения луча из очередной точки поворота траектории в направлении нового направления движения частицы с однородными частями объекта. Точка взаимодействия и тип взаимодействия разыгрываются на совокупности построенных интервалов пересечения с использованием распределений вероятностей процессов взаимодействия. Геометрическая модель объекта строится с применением наиболее вычислительно простого и унифицированного подхода – поверхностного описания гомогенных составляющих объекта. Эти составляющие описываются замкнутыми поверхностями – оболочками.

Поверхности геометрической модели (замкнутых оболочек и плоских элементов) состоят из элементов различного типа (примитивов). Поддерживаются следующие примитивы: треугольник, круг, сфера и боковая поверхность усеченного конуса (Рис. 10, справа). Каждой замкнутой поверхности соответствует так называемый «слой». Слои пронумерованы и определяют молекулярный состав и плотность вещества. В случае пересечения слои с большими номерами вытесняют слои с меньшими (Рис. 10, слева).

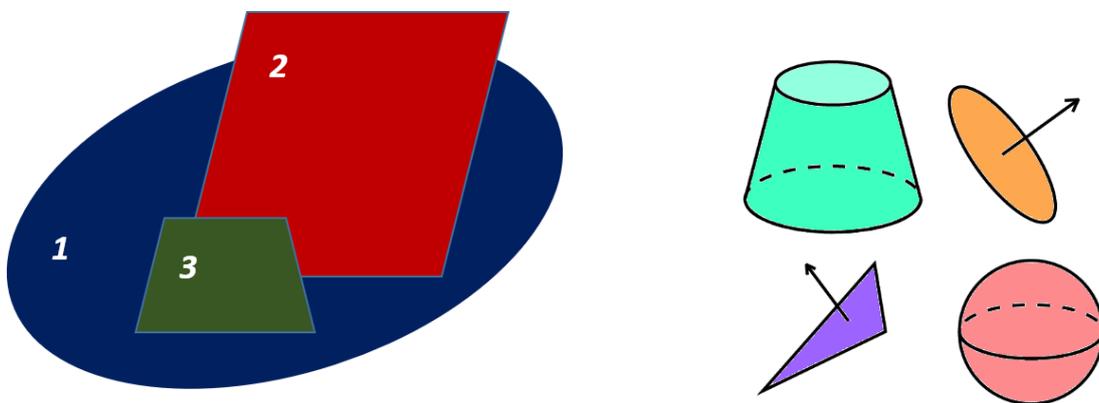


Рис. 10 – Вытеснение слоев – слева, типы примитивов – справа

Операции, которые осуществляются с примитивами в процессе построения траектории частицы:

- определение координат пересечения заданного луча и примитива;
- измерение расстояния от заданной точки до примитива;
- проверка пересечения между заданным отрезком и примитивом.

Эти операции выполняются на графическом ускорителе.

Построение траектории включает в себя трассировку объекта и моделирование взаимодействия фотона с веществом. Случайными событиями, которые определяют структуру траектории, являются столкновение частицы с атомом (взаимодействие излучения с веществом) и пересечение граничных поверхностей элементов геометрической модели (границы слоев и детекторов). Точки столкновения (точки поворота траектории) разыгрываются в соответствии с вероятностным распределением длины пути частицы до взаимодействия [13], точки пересечения с граничными поверхностями определяются путем трассировки объекта.

## 2.2 Построение траекторий фотонов

Прохождение фотонов через вещество характеризуется относительно небольшим числом столкновений на траектории и высокой проникающей способностью. Схема построения случайной фотонной траектории показана на Рис. 11 и состоит из следующих шагов:

1. находятся точки пересечения с поверхностями, ограничивающими однородные компоненты объекта (оболочками), и формируются соответствующие интервалы пересечения. Точки пересечения с границами слоя с меньшим номером, лежащие в слое с большим номером, выбрасываются (Рис. 11). Вычисления проводятся на GPU;
2. точка взаимодействия частицы с веществом разыгрывается на отрезке прямой составленном из множества интервалов пересечения. Загружаются распределения вероятностей процессов того материала (слоя), в котором находится найденная точка взаимодействия фотона с веществом;
3. тип взаимодействия и характеристики фотонов разыгрывается с применением загруженных распределений вероятности процессов. Вторичные частицы, появляющиеся в результате взаимодействия, сохраняются для последующего моделирования.

Шаги 2 и 3 алгоритма выполняются на центральном процессоре.

Процесс повторяется для текущей частицы до тех пор, пока ее траектория не закончится. Эта схема относительно проста и эффективна для фотонов.

Прохождение фотона вблизи детектора и через детектор моделируется с применением разработанной весовой модификации метода Монте-Карло. Описание модификации приведено ниже.

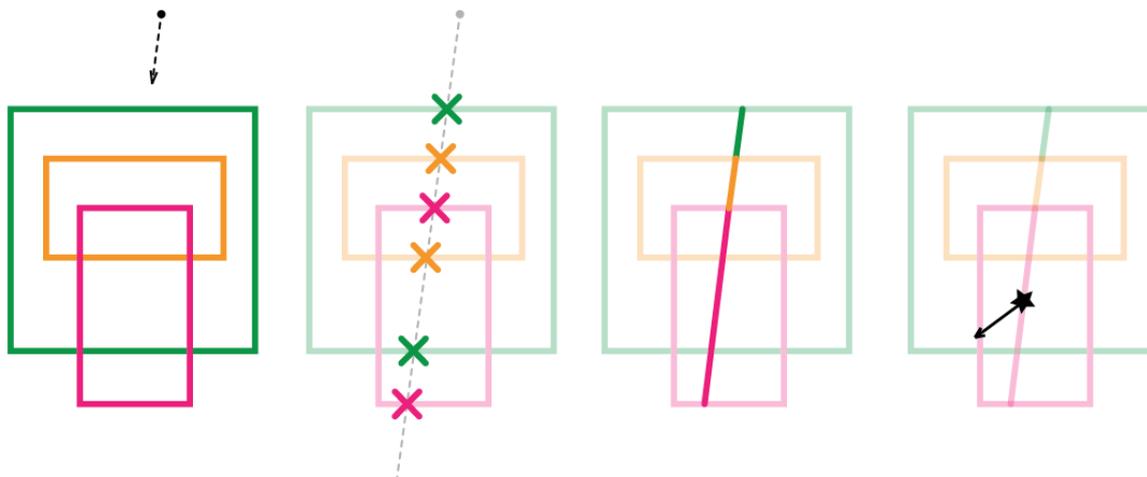


Рис. 11 – Построение звена траектории фотона

### 2.3 Построение траекторий электронов

Число столкновений электронов на траектории огромно, а проникающая способность относительно мала. Вся траектория лежит, как правило, в небольшой области внутри одного слоя. Использование «фотонного» подхода для электронов неэффективно, так как на каждом звене траектории, большая часть которой лежит внутри однородной составляющей объекта, не требуется полная трассировка объекта. Поэтому применяется «квазиоднородный» подход, суть которого заключается в следующем.

Траектория электрона представляется в виде частей (сегментов), лежащих внутри однородной составляющей объекта (слоя). Сегмент начинается в момент попадания в него электрона и заканчивается в следующих ситуациях:

1. пересечение границы слоя;
2. пересечение внешней границы объекта, в этом случае заканчивается вся траектория электрона;
3. термализация электрона (уменьшение энергии до минимальной, наперед заданной величины, например, 100 эВ), в этом случае заканчивается вся траектория электрона;
4. вылет электрона за пределы области, ограниченной длиной тормозного пути.

Процесс построения очередной части траектории («сегмента» траектории) выполняется в следующей последовательности:

- определяется слой, которому принадлежит начало сегмента (текущее положение электрона), и длины соответствующего этому слою тормозного пути («CSDA range» в терминологии Национального Института Стандартов США, NIST);
- строится сферическая область  $\Omega_{CSDA}$  с радиусом, равным тормозному пути. Весь сегмент траектории электрона с большой вероятностью бу-

дет лежать внутри этой области. Поэтому, для данного электрона, можно игнорировать элементы геометрической модели среды (модель объекта и детектирующая система) вне  $\Omega_{CSDA}$ ;

- элементы, лежащие внутри области  $\Omega_{CSDA}$ , сортируются по увеличению расстояния до её центра (начала сегмента). На Рис. 12 элементы 1-13, 15 – детекторы, 14 – граница текущего слоя.

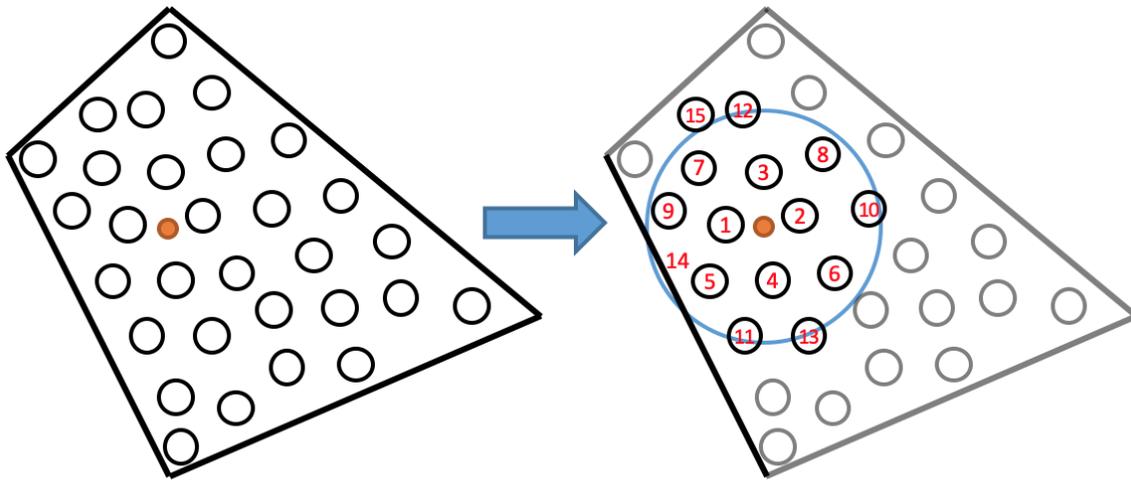


Рис. 12 – Фильтрация элементов геометрической модели по критерию принадлежности  $\Omega_{CSDA}$  (желтая точка – начало сегмента)

- разыгрывается следующая точка  $T_e$  поворота траектории (взаимодействие электрона со средой) и определяется расстояние  $R_e(T_0, T_e)$  между центром области  $\Omega_{CSDA}$  (начало рассматриваемого сегмента траектории  $T_0$ ) и текущим положением электрона  $T_e$ ;
- вычисляются расстояния  $R_i(S_i, T_0)$ ,  $i = 1, \dots, 15$ ;
- проверяется пересечение электронной траектории с элементами геометрической модели, для которых выполнено условие:  $R_i(S_i, T_0) < R_e(T_0, T_e)$ .

На Рис. 13 – элементы 1-7.

По завершении построения сегмента траектории все накопленные данные отправляются на CPU. Данные включают измененные свойства частиц (положение, направление, энергия, вес и т. д.), историю пересечений детекторов и рожденные частицы (электроны, появившиеся в результате ударной ионизации, тормозные фотоны и фотоны, появившиеся в результате электрон-позитронной аннигиляции). Частицы сохраняются для последующего моделирования. Пересечения детекторов должным образом регистрируются для оценки искомых функционалов, и весь процесс повторяется.

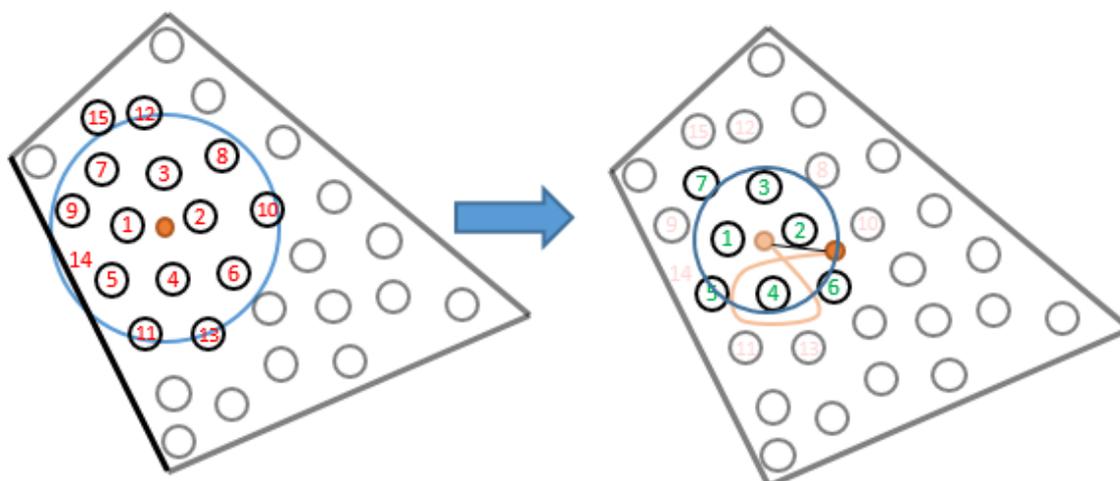


Рис. 13 – Элементы, проверяемые на пересечение

## 2.4 Весовая модификация алгоритма регистрации маловероятных событий

Вопрос увеличения статистического вклада траекторий частиц (статистической ценности траекторий) важен, когда измеряемая величина (значения функционала на пространстве решений уравнения переноса) определяется маловероятными событиями. Примерами, демонстрирующими проблему, являются оценка потока электронов, эмитирующих с внешних и внутренних граничных поверхностей объекта, находящегося под воздействием рентгеновского излучения, а также оценка энерговыделения в детекторе тормозного излучения, находящемся за мишенью, облучаемой электронами ускорителя.

В первом примере часть фотонов будет пролетать через пластину без взаимодействия, не оставляя вклада в искомую величину. Количество таких фотонов зависит от энергии, материала и толщины пластины. Модифицируя алгоритм так, чтобы фотон всегда взаимодействовал с объектом, соответственно уменьшая его статистический вес, можно решить данную проблему. Однако только фотоны, которые взаимодействуют в непосредственной близости от поверхности, могут генерировать электрон, способный эмитировать. Это происходит из-за того, что генерируемые электроны имеют малый (в сравнении с толщиной пластины) тормозной путь, и подавляющее большинство из них не сможет достичь границы пластины. Таким образом, большая часть смоделированных фотонных взаимодействий будет иметь нулевую статистическую ценность.

Во втором примере фотон должен взаимодействовать с легким детектором, чтобы внести статистический вклад в энерговыделение в данном детекторе. Однако большая часть генерируемого тормозного излучения будет взаимодей-

ствовать с тяжелой мишенью, а не с легким детектором, что делает моделирование таких траекторий статистически неэффективным.

Разработан общий подход к решению указанных проблем. Идея заключается во введении специальных «областей интереса» – объемов вокруг детекторов, регистрирующих электроны (энерговыведение, поток электронов, ток, заряд). Эти объемы описываются ограничивающими поверхностями и естественно расширяют геометрическую модель. Размер области выбирается таким образом, чтобы ее границы отстояли от границ детектора на расстояние, равное тормозному пути электрона.

Фотонная траектория, пересекающая такую область, разбивается на две части, имеющие соответствующие статистические веса. Фотон одной части моделируется «обычным» образом. Фотон другой части «принудительно» взаимодействует внутри «области интереса». Это позволяет явным образом генерировать электроны в непосредственной близости от детектора, значительно увеличивая статистическую ценность траектории фотона.

На Рис. 14 показан пример траектории фотона, пересекающей область интереса внутри объекта. Пересечение состоит из трех интервалов. Первый и третий являются интервалами пересечения с объектом за пределами интересующей области. Второй – это интервал пересечения с «областью интереса».

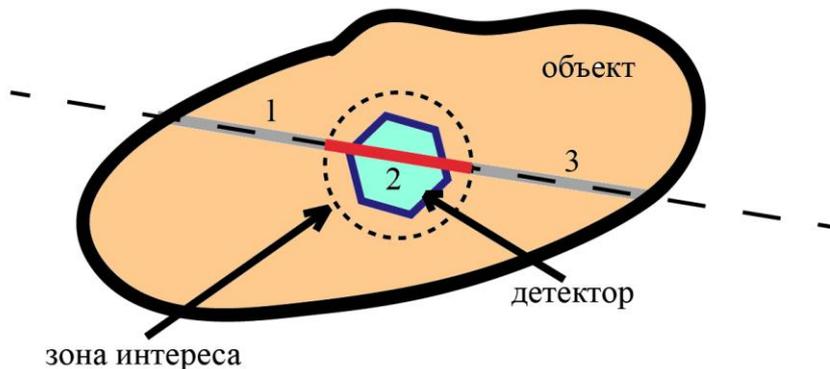


Рис. 14 – Расщепление траектории фотона

Вероятности взаимодействия фотонов на этих интервалах вычисляются по формулам:

$$P_1 = 1 - e^{-\mu d_1}; \quad P_2 = e^{-\mu d_1} \cdot (1 - e^{-\mu d_2}); \quad P_3 = e^{-\mu(d_1+d_2)} \cdot (1 - e^{-\mu d_3}),$$

где  $d_1$ ,  $d_2$  и  $d_3$  – длины интервалов,  $\mu$  – полное макроскопическое сечение взаимодействия фотона с веществом. В приведенном примере траектория разбивается на 3 части. Статистические веса фотонов:

$$w_1 = w_0 \cdot P_1; \quad w_2 = w_0 \cdot P_2; \quad w_3 = w_0 \cdot P_3,$$

где  $w_0$  – начальный вес. Подобное расщепление траектории позволяет электрону явным образом появляться в интересующей области. Этот электрон имеет высокую вероятность пересечь детектор и оставить в нем соответствующий вклад в измеряемую величину. Расщепление траектории проводится аналогичным образом в случае пересечения множества областей интереса.

Разработанные алгоритмы суперкомпьютерного моделирования каскадных процессов переноса излучения реализованы в виде программных модулей для проведения математического моделирования каскадных процессов взаимодействия проникающего излучения со средами пористого типа на гетерогенной вычислительной технике с применением современных технологий гибридного распараллеливания (NVIDIA<sup>®</sup> CUDA, MPI, OpenMP).

Алгоритмы учитывают существенную разницу в физических свойствах различных частиц и реализуют эффективные подходы к моделированию траекторий частиц. Построены весовые модификации метода Монте-Карло, значительно увеличивающие статистическую ценность фотонных траекторий при регистрации маловероятных событий.

## **2.5 Об аппроксимации результатов статистического моделирования «источников» индуцированных эффектов**

Математическое моделирование комплексного физического воздействия на сложные дисперсные среды требует совместного применения программных средств для оценки влияния различных взаимозависимых факторов на функциональные свойства исследуемых материалов, что подразумевает использование результатов моделирования первичного физического процесса (взаимодействия излучения с веществом) в качестве источников радиационно-индуцированных эффектов для численного исследования вторичных процессов (термомеханических, электромагнитных и др.). Моделирование различных физических процессов проводят в различных физико-математических постановках с применением разных численных методов. Особенности построения математических моделей и численных методов обуславливают применение разных дискретных геометрических приближений для описания объекта и расчетной области, в рамках которых моделируются рассматриваемые процессы. В связи с этим ставится задача многомерной аппроксимации данных с одной трехмерной геометрической структуры на другую («интеграция по данным»). Кроме этого, аппроксимация результатов моделирования переноса излучения необходима для адекватной визуализации результатов расчетов.

Разработка методов аппроксимации проводится в рамках технологии машинного обучения, в том числе методов искусственных нейронных сетей.

Рассмотрим нелинейное отображение  $D = f(x)$  типа «вход-выход», 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:

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

$\Omega$  – 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 в рамках рассматриваемой проблематики 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 этой физической величины для моделирования другого физического процесса, определяются как *целевое множество*. Нейронная сеть с использованием определенных стохастических алгоритмов оптимизации [15 - 17] «учится» аппроксимировать функцию, описывающую поведение искомой физической величины в данной точке, опираясь на обучающее множество.

В процессе обучения происходит настройка всех внутренних параметров сети и её архитектуры (топологии). После обучения сети значения искомым физических величин в точках целевого множества являются результатом отклика нейронной сети, топология и числовые характеристики которой получены в процессе её обучения (настройки).

Подробно вопросы применения нейронных сетей в рассматриваемых задачах многомерной аппроксимации рассмотрены в работах [5, 6]. 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.

Разработанная технология многомерной аппроксимации использована для «переноса» энерговыведения  $\{W(\Omega_D), \Omega_D\}$  излучения, рассчитанного в точках множества дискретной детекторной системы  $\Omega_D$ , на множество точек  $\Omega_T$  – центров ячеек прямоугольной декартовой сетки (Рис. 1, Рис. 2).

Для рассматриваемого объекта (Рис. 3) аппроксимация функции энерговыведения в каждой из 27 подобластей построена с помощью четырехслойного персептрона с топологией 3-7-5-1. Топология была подобрана экспериментальным путем для одной подобласти. Эта топология персептрона использована для

всех 27 частей объекта, так как все части схожи по своим геометрическим характеристикам и свойствам аппроксимируемой функции.

На Рис. 15 приведены результаты аппроксимации энерговыделения в точки целевого множества  $\Omega_{tg}$  (центры ячеек прямоугольной термодинамической сетки) для энергии фотонов 20 кэВ. Изображения получены в цветовой модели «hot» (при увеличении энерговыделения цвет изменяется в последовательности черный-красный-желтый-белый).

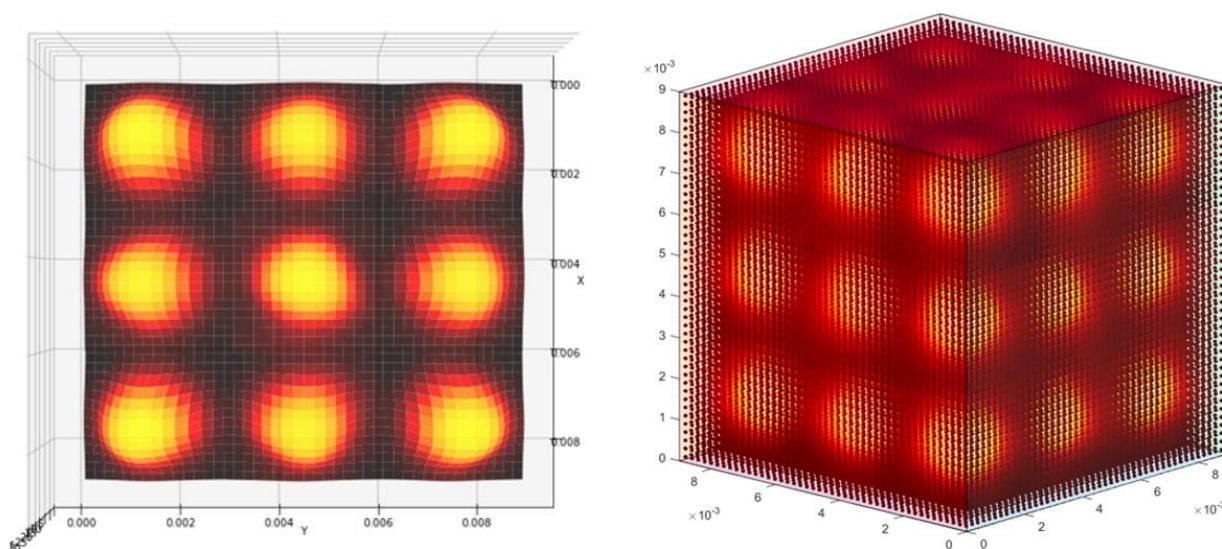


Рис. 15 – Значения энерговыделения в точках целевого множества (сечение  $z=45$  мкм, слева) и 3D изображение (справа)

На Рис. 15 слева хорошо различимы естественные отличия формы сечения функции энерговыделения от сферически симметричной в периферийных областях.

### 3 Моделирование термомеханических эффектов

Ниже в этом разделе описаны предварительные результаты математического трехмерного моделирования радиационно-индуцированных термодинамических эффектов во фрагменте объекта дисперсной структуры (Рис. 3).

В качестве источника энергии, инициирующего термодинамические процессы, используются значения энерговыделения в ячейках термодинамической разностной сетки, полученные с применением аппроксимации результатов статистического моделирования процесса энерговыделения в объекте, облучаемом рентгеновским излучением (Рис. 15).

#### 3.1 Модель развития термомеханических эффектов

Основой для расчета термомеханических процессов выбрана идеальная гидродинамическая модель Эйлера динамики сжимаемой однокомпонентной среды в консервативной форме, дополненная уравнением состояния в форме Ми-Грюнайзена. Соответствующая ей система уравнений движения сжимаемой

однокомпонентной среды имеет форму законов сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{w}) = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho w_i + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \Pi_{ik} = 0; \quad (2)$$

$$\Pi_{ik} = \rho w_i w_k + P \delta_{ik}; \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho \mathbf{w}^2 \right) + \operatorname{div} \mathbf{q} = Q_\varepsilon; \quad (4)$$

$$\mathbf{q} = \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho \mathbf{w}^2 + P \right) \mathbf{w}. \quad (5)$$

В этой системе: (1) – уравнение неразрывности, (2) – уравнение сохранения импульса (3) – выражение для тензора потока импульса  $\Pi_{ik}$ , (4) – уравнение для полной энергии, (5) – выражение для вектора плотности потока энергии  $\mathbf{q}$ .

Здесь использованы традиционные обозначения:  $\rho$  – плотность среды,  $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z)^T$  – вектор скорости среды,  $\varepsilon$  – удельная внутренняя энергия,  $P$  – давление,  $\mathbf{q}$  – вектор плотности потока энергии,  $\delta_{ik}$  – символ Кронекера,  $Q_\varepsilon$  – объемный источник тепла (энерговыведение излучения).

Система уравнений газодинамики замыкается уравнениями состояния – аналитическими или табличными. Внешние границы объекта (Рис. 3) жестко закреплены.

Для численного решения системы уравнений идеальной гидродинамики (1)-(5) была подобрана консервативная разностная схема повышенного порядка точности [18, 19], по сути являющаяся модифицированной и обобщенной на случай использования трехмерных неструктурированных сеток схемой Колгана [20]. Интегрирование по времени осуществляется в рамках схемы предиктор-корректор, обеспечивающей второй порядок аппроксимации по времени. На каждом этапе применяется явная схема с ограничением на шаг по времени согласно условию Куранта. Этап корректора в данной схеме служит не только для повышения порядка аппроксимации по времени, но и является дополнительной стабилизирующей процедурой, обеспечивая отсутствие численной антидиффузии, возникающей при обычной явной по времени аппроксимации и приводящей к укрупнению профилей решений в схемах повышенного порядка точности по пространству.

Следует отметить, что в данной методике применяется отдельная аппроксимация дифференциальных операторов. В рамках этого подхода конвекция и действие сил давления рассматриваются отдельно. Дифференциальные операторы, которые содержат давление, аппроксимируются центральными разностями. Все сеточные функции в уравнениях газодинамики отнесены к центрам ячеек, их аппроксимации на центры граней представлены в [18, 19].

В реализованной разностной схеме используется отдельная аппроксимация дифференциальных операторов. Данный подход не всегда обеспечивает монотонность решения, особенно когда скорость потока мала по сравнению со скоростью звука. В таком случае схемной вязкости, внесенной направленно-разностной аппроксимацией конвективных членов, недостаточно для сглаживания осцилляций, вызванных центральной аппроксимацией производных давления. В связи с этим в схему была введена искусственная вязкость  $\alpha$ , вычитаемая из давления (6). Было решено использовать комбинацию линейной вязкости, вычисляемой по схеме Лонгли (7) [21] и квадратичной вязкости, вычисляемой по схеме фон Неймана–Рихтмайера (8) [22].

$$P^* = P - \alpha = P - \alpha^1 - \alpha^2; \quad (6)$$

$$\alpha^1 = \theta \cdot \rho \cdot b_1 \cdot h \cdot c \cdot \operatorname{div} \mathbf{w}; \quad (7)$$

$$\alpha^2 = \theta \cdot \rho \cdot (b_2 \cdot h)^2 \cdot \operatorname{div} \mathbf{w} \cdot |\operatorname{div} \mathbf{w}|, \quad (8)$$

где  $\alpha^1$  и  $\alpha^2$  – соответственно линейная и квадратичная вязкость,  $b_1$  и  $b_2$  – соответствующие коэффициенты, задаваемые вручную в зависимости от типа решаемой задачи,  $\theta$  – коэффициент включения, определяемый как  $0.5 \cdot (\operatorname{div} \mathbf{w} - |\operatorname{div} \mathbf{w}|)$ ,  $h$  – шаг сетки (для регулярных сеток),  $c$  – скорость звука при данных параметрах среды,  $\rho$  – плотность,  $\mathbf{w}$  – скорость.

### 3.2 Пример расчета термомеханических полей

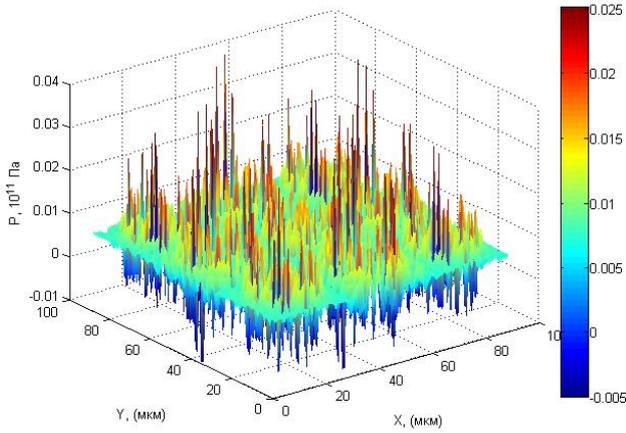
Проведено трехмерное моделирование термомеханического воздействия фотонов на гетерогенную структуру, состоящую из матрицы – наполнителя из эпоксидной смолы и сферических алюминиевых включений (Рис. 3).

В расчетах использован модельный источник фотонов с энергией 20 кэВ, флюенс энергии –  $100 \text{ кал/см}^2$ , длительность импульса излучения 20 нс. Направление потока фотонов совпадает с осью Oz. Внешние границы куба считаются жестко закрепленными.

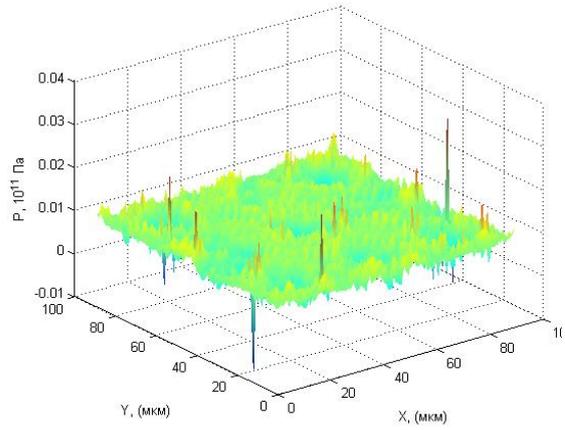
Анализ результатов расчетов показал следующее.

В результате нагрева алюминиевые включения интенсивно плавятся и расширяются. На Рис. 16 видно, что на границе включений и наполнителя еще до окончания импульса воздействия сформировался мощный скачок давления,

приводящий к сжатию наполнителя. К моменту времени 10 нс давление в эпоксидной смоле существенно больше, чем в алюминии. Далее происходит процесс механической релаксации. В итоге, к моменту времени 50 нс давление в системе практически выравнивается.

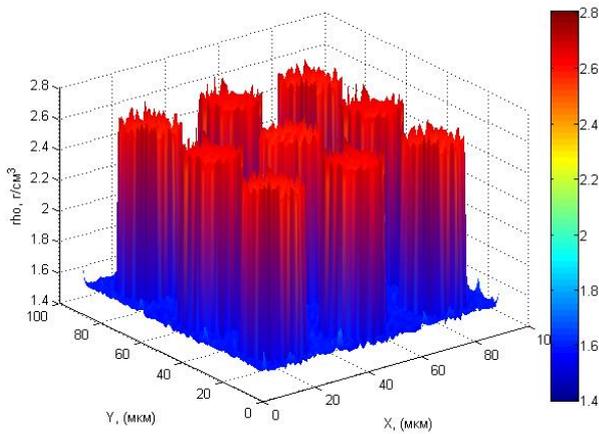


момент времени 10 нс

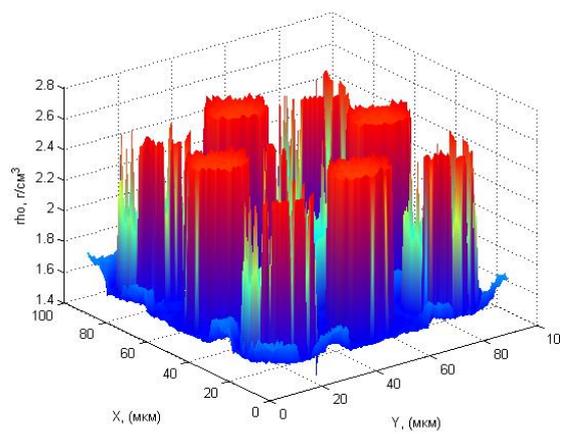


момент времени 50 нс

Рис. 16 – Распределение давления в различные моменты времени,  $10^{11}$  Па



момент времени 10 нс



момент времени 50 нс

Рис. 17 – Распределение плотности в различные моменты времени,  $\text{г/см}^3$

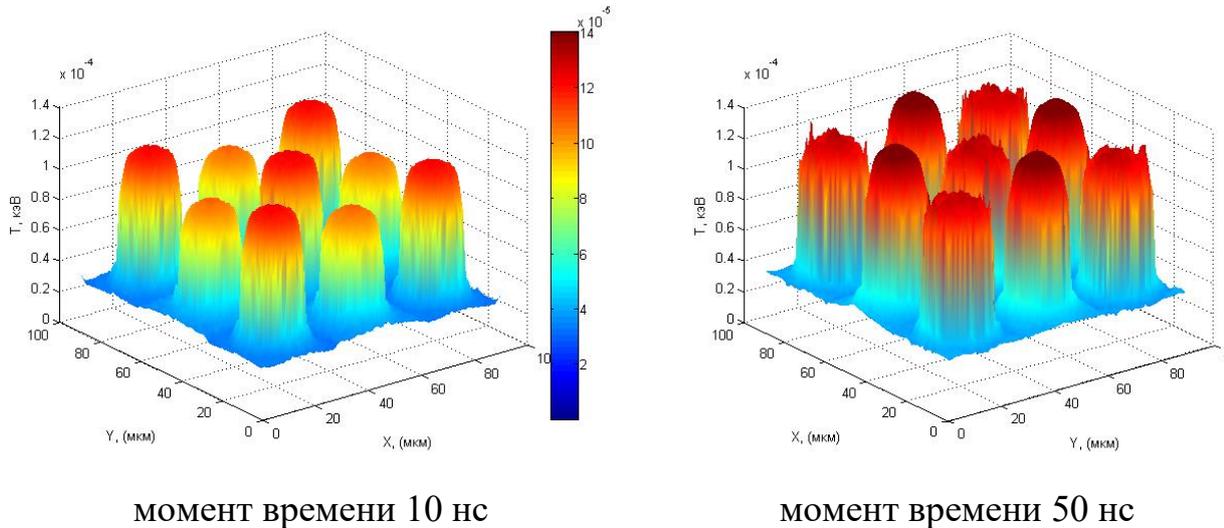


Рис. 18 – Распределение температуры в различные моменты времени, кэВ

## Заключение

Разработана комплексная модель для суперкомпьютерного исследования радиационно-индуцированных эффектов в гетерогенных материалах сложной дисперсной структуры.

Усовершенствован подход к организации вычислений при моделировании возникновения и развития фотон-электронного каскада для достижения максимальной производительности графического процессора и повышения эффективности одновременной загрузки CPU/GPU. Главным образом это касается алгоритмов построения фотонных и электронных траекторий при статистическом моделировании взаимодействия излучения с композитными материалами сложной дисперсной структуры. Оптимизирован алгоритм регистрации маловероятных событий для повышения эффективности расчета энерговыделения при их прохождении частиц через материал облучаемого объекта.

Построена геометрическая модель мелкодисперсной среды, которая включает в себя дискретную модель детектирующей системы для статистической оценки функционалов на пространстве решений уравнений переноса фотон-электронного каскада.

Разработаны алгоритмы многомерной аппроксимации результатов статистического моделирования каскада в элементах детекторной системы, предназначенной для расчета энерговыделения излучения, на прямоугольную пространственную разностную сетку для численного моделирования вторичных термомеханических эффектов. Алгоритмы основаны на технологии нейронных сетей.

Основой для расчета термомеханических процессов выбрана идеальная гидродинамическая модель Эйлера динамики сжимаемой однокомпонентной среды в консервативной форме, дополненная уравнением состояния в форме Ми-Грюнайзена. Соответствующая ей система уравнений движения сжимаемой однокомпонентной среды имеет форму законов сохранения массы, импульса и

энергии. Для численного решения системы уравнений была подобрана консервативная разностная схема повышенного порядка точности, являющаяся модифицированной и обобщенной на случай использования трехмерных неструктурированных сеток схемой Колгана.

Проведено математическое трехмерное моделирование радиационно-индуцированных термодинамических эффектов во фрагменте объекта дисперсной структуры, результаты которого показали применимость разработанной комплексной модели для описания исследуемых явлений в гетерогенных материалах с прямым разрешением их микроструктуры.

## Библиографический список

1. 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>.
2. Жуковский М.Е., Усков Р.В. Моделирование взаимодействия гамма-излучения с веществом на гибридных вычислительных системах // Математическое моделирование, 2011, т.23, №7, с. 20-32.
3. Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. Моделирование переноса электронов в веществе на гибридных вычислительных системах // Вычислительные методы и программирование, 2011, т.12, №1, с.152–159.
4. 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.
5. 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 URL: [http://keldysh.ru/papers/2018/prep2018\\_110.pdf](http://keldysh.ru/papers/2018/prep2018_110.pdf).
6. 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.
7. Mitchell T. Machine Learning. – McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997. ISBN:0070428077 9780070428072.
8. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики. «Ученые записки ЦАГИ», т. 3, №6, 1972, стр. 68-77.
9. Zhukovskiy M., Podoliako S., Jaenisch G.-R., Bellon C., Samadurau U. Monte Carlo Simulation Tool with CAD Interface. // Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation, Vol. 25, P. 574-579 (2006).
10. Жуковский М.Е., Загонов В.П., Подоляко С.В., Скачков М.В., Тиллак Г.-Р., Беллон К. Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации рентгеновского излу-

- чения в задачах вычислительной диагностики. Математическое моделирование. 2004, т.16, №5, с.103-116.
11. Zhukovskiy M., Podoliako S., Jaenisch G.-R., Bellon C. Monte-Carlo-Simulation der Strahlenausbreitung an realen Bauteilgeometrien. DGZfP-Jahrestagung "ZfP in Forschung, Entwicklung und Anwendung", Salzburg, 17.-19. Mai, 2004, DGZfP-Berichtsbau.
  12. 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.
  13. Zhukovskiy M.E., Podolyako S.V., and Uskov R. V., «Model of individual collisions for description of electron transport in matter» Math. Models Comput. Simul. 4, 101-109 (2012).
  14. Egorova V., Uskov R.V., Zhukovskiy M. The simulation of the photon-electron cascade on heterogeneous supercomputers. The International Symposium on Structural Health Monitoring and Nondestructive Testing (SHM-NDT-2018), Saarbrücken, Germany, 4-5 Oct. 2018. Proceedings. [https://www.ndt.net/article/shmndt2018/papers/SHM-NDT-2018\\_paper\\_32.pdf](https://www.ndt.net/article/shmndt2018/papers/SHM-NDT-2018_paper_32.pdf)
  15. Васильев Ф.П. Методы оптимизации - Издательство «Факториал Пресс», 2002.
  16. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 1104 с.
  17. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации: Пер. с польского. – М.: Финансы и статистика, 2002.
  18. Gasilov V. et al. Towards an Application of High-Performance Computer Systems to 3D Simulations of High Energy Density Plasmas in Z-Pinches // Applications, Tools and Techniques on the Road to Exascale Computing. IOS Press: Advances in Parallel Computing, 2012. Vol. 22, pp. 235-242.
  19. Болдарев А.С. О конечноразностном решении гиперболических систем дифференциальных уравнений с повышенным порядком аппроксимации на двумерных неструктурированных сетках. — М.: ИММ РАН, 1993, препринт №35.
  20. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики, Ученые записки ЦАГИ, 1972, том 3, №6, с. 68-77.
  21. Longley H.J. Methods of differencing in Eulerian hydrodynamics. – LASL Rept. No. LAMS-2379, Los Alamos, New Mexico, 1960.
  22. von Neumann J., Richtmyer R. D. A method for the numerical calculations of hydrodynamical shocks // J. Appl. Phys. 1950. V. 21. P. 232-238.