[ИПМ им.М.В.Келдыша РАН](https://keldysh.ru/) • [Электронная библиотека](https://library.keldysh.ru/)

[Препринты ИПМ](https://library.keldysh.ru/preprints/) • [Препринт № 92 за 2020 г.](https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-92)

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

В.А. Егорова, **М.Е. Жуковский**,
О.С. Косарев, **И.А. Тараканов**

О моделировании радиационного электромагнитного поля в полидисперсных средах замкнуто-ячеистой структуры

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: О моделировании радиационного электромагнитного поля в полидисперсных средах замкнуто-ячеистой структуры / В.А. Егорова [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 92. 20 с. **https://doi.org/10.20948/prepr-2020-92**
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-92

О р д е н а   Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

В.А. Егорова, М.Е. Жуковский, О.С. Косарев,
И.А. Тараканов

О моделировании радиационного электромагнитного поля в полидисперсных средах замкнуто-ячеистой структуры

Москва — 2020

В.А. Егорова, М.Е. Жуковский, О.С. Косарев, И.А. Тараканов

О моделировании радиационного электромагнитного поля в полидисперсных средах замкнуто-ячеистой структуры

Построены алгоритмы суперкомпьютерного моделирования радиационного электромагнитного поля в гетерогенных материалах сложной мелкодисперсной структуры. Создана геометрическая модель гетерогенной среды с применением алгоритмов Штилингера-Любачевского для многомодальных структур. Модель включает в себя систему детекторов для статистической оценки функционалов на пространстве решений уравнений переноса фотон-электронного каскада. Приведены результаты демонстрационных расчетов электромагнитного поля. Результаты расчетов показали, что пространственное распределение радиационного электромагнитного поля имеет резко неоднородную структуру, обусловленную наличием границ материалов с различными радиационными свойствами.

Ключевые слова: математическое моделирование, ионизирующее излучение, радиационное электромагнитное поле, мелкодисперсные структуры

Varvara Alekseevna Egorova, Mikhail Evgenievich Zhukovskiy, Oleg Sergeevich Kosarev, Ilya Alekseevich Tarakanov

On modeling of the radiative electromagnetic field in polydisperse media of a closed-cell structure.

Algorithms for supercomputer modeling of the radiation electromagnetic field in heterogeneous materials of a complex fine disperse structure are constructed. A geometrical model of heterogeneous medium with application of algorithms of Stillinger-Lubachevsky for multimodal structures is created. The model includes a system of detectors for statistical evaluation of functionals on the space of solutions of the photon-electron cascade transport equations. The results of demonstration calculations of the electromagnetic field are presented. The results of calculations showed that the spatial distribution of the radiation electromagnetic field has a sharply inhomogeneous structure caused by the presence of boundaries of materials with different radiation properties.

Key words: mathematical modeling, ionizing radiation, radiative electromagnetic field, fine dispersed structure

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

Оглавление

Введение

В настоящей работе представлены результаты детального суперкомпьютерного моделирования процессов радиацинно-индуцированных электродинамических эффектов с применением сверхвысокопроизводительной вычислительной техники и современных технологий распараллеливания (MPI, OpenMP, CUDA).

В [1, 2] рассмотрены вопросы математического моделирования радиационно-индуцированных зарядовых и токовых эффектов в средах сложной геометрической структуры. Описаны алгоритмы суперкомпьютерного моделирования формирования зарядовых и токовых полей в гетерогенных полидисперсных материалах с прямым разрешением их микроструктуры. Приведены результаты демонстрационных расчетов параметров зарядовых и токовых полей, которые показали, что пространственное распределение радиационно-индуцированных зарядов имеет резко неоднородную структуру, обусловленную наличием границ материалов с сильно различными радиационными свойствами. Вблизи граничных поверхностей возникает разделение зарядов, которое может привести к генерации сильного электрического поля, способного нарушить функциональные свойства гетерогенного материала, имеющего мелкодисперсную структуру.

Математическое моделрование радиационного электромагнитного поля включает в себя следующие задачи:

- построение геометрической модели гетерогенной мелкодисперсной среды, которая включает детекторную систему для расчета требуемых величин (энерговыделение, плотность электрического тока) в процессе моделирования взаимодействия излучния с веществом;
- статистическое моделирование переноса излучения в мелкодисперсной среде с прямым разрешением ее микроструктуры;
- трехмерная аппроксимация результатов расчетов энерговыделения и токов с детекторной системы, используемой при решении задачи переноса излучения, на пространственную разностную электродинамиче-

скую сетку, предназначенную для численного решения задачи электродинамики;
– численное решение начально-краевой задачи для полной системы уравнений Максвелла.

В работе изложены результаты моделирования радиационно-индуцированных электромагнитных полей (ЭМП) во фрагменте замкнуто-ячеистой структуры, которая состоит из связующего и мелкодисперсных диэлектрических включений.

1 Геометрическая модель фрагмента полисперсной среды

Рассмотрим фрагмент мелкодисперсной среды замкнуто-ячеистой структуры, состоящий из связующего и восьми включений (рис. 1). Материал связующего – полибутадиен (C_4H_6 плотность $\rho = 0.95 g / cm^3$), материал включений – перхлорат аммония (NH_4ClO_4, $\rho = 1.95 g / cm^3$). Размеры фрагмента приведены на рис. 1.

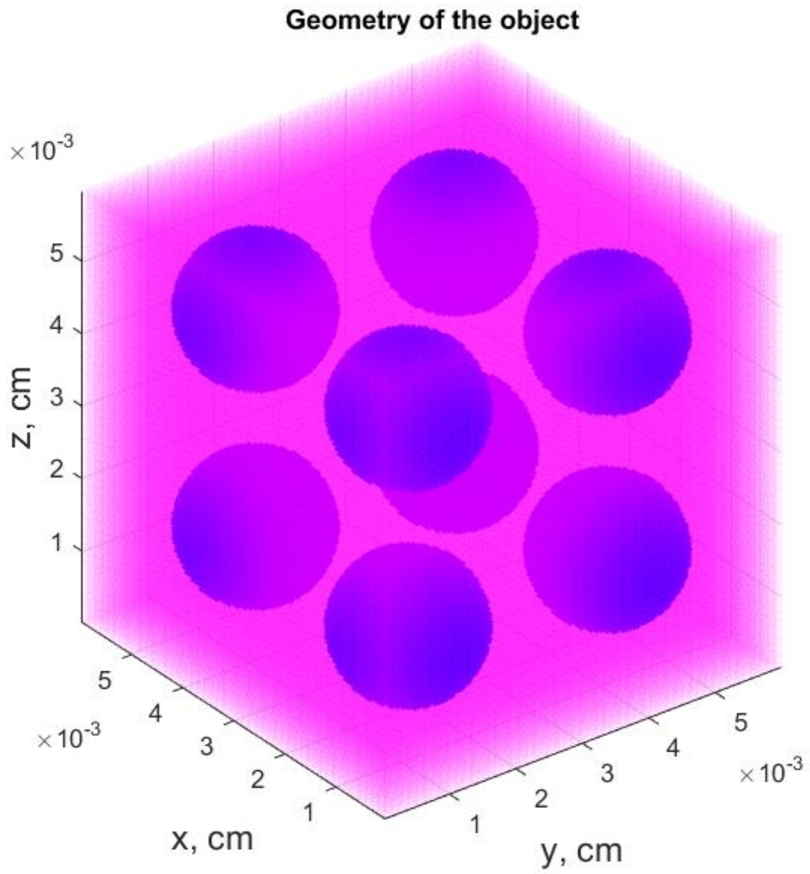

Рис. 1 – Фрагмент гетерогенного дисперсного материала

Геометрическая модель среды включает детекторную систему для статистической оценки требуемых физических величин. Детекторная (регистрирующая) система состоит из заданного числа сферических детекторов одинакового радиуса. Детекторы должны быть изолированы друг от друга (не должны пересекаться) и не должны пересекать границы включений.

Для построения геометрической модели полидисперсной среды в работе применен алгоритм Стиллинжера-Любачевского [3, 4].

Пример работы алгоритма для рассматриваемого фрагмента представлен на рис. 2.

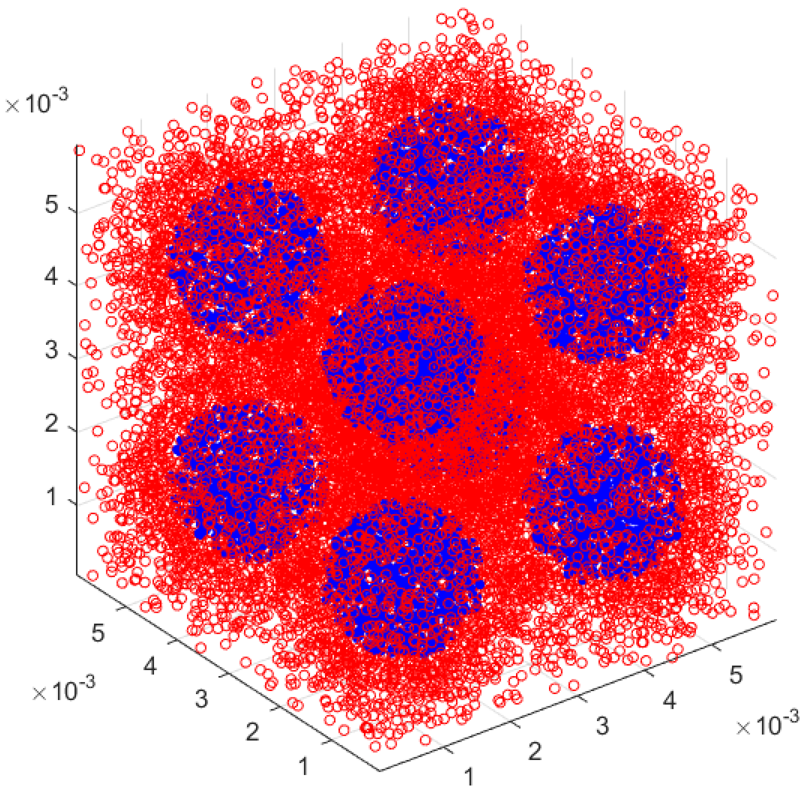

Рис. 2 – Детекторная система. Красным цветом отмечены детекторы в связующем, синим – во включениях

2 Моделирование переноса излучения в мелкодисперсной среде

Процессы взаимодействия излучения с веществом имеют каскадный характер. Алгоритмы статистического моделирования таких процессов подробно рассмотрены в работах [5, 6].

В этих работах описаны эффективные статистические алгоритмы математического моделирования каскадных процессов переноса излучения с использованием гибридной вычислительной техники. Эти алгоритмы построены с учетом особенностей проведения вычислений на гетерогенных суперкомпьютерах с использованием графических ускорителей в качестве арифметических вычислителей. Предложена и реализована модификация схемы обработки «дерева», описывающего каскад частиц, по поколениям. Эта модификация разработана на основе использования стеков для временного хранения информации о рождающихся частицах, причем алгоритм заполнения этих стеков учитывает априорную информацию об относительной длине пути частиц различного сорта. Созданный метод оптимизирован с точки зрения минимизации объема информации, необходимой для обработки каскадного дерева. 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. Оптимизирован алгоритм регистрации маловероятных событий с целью повышения информационной ценности фотонных траекторий.

На рис. 3 изображены результаты расчета энерговыделения в рассматриваемом дисперсном фрагменте в случае, когда объект облучается потоком фотонов с энергией 20 кэВ. Направление распространения плоского потока – вдоль оси *Z*.

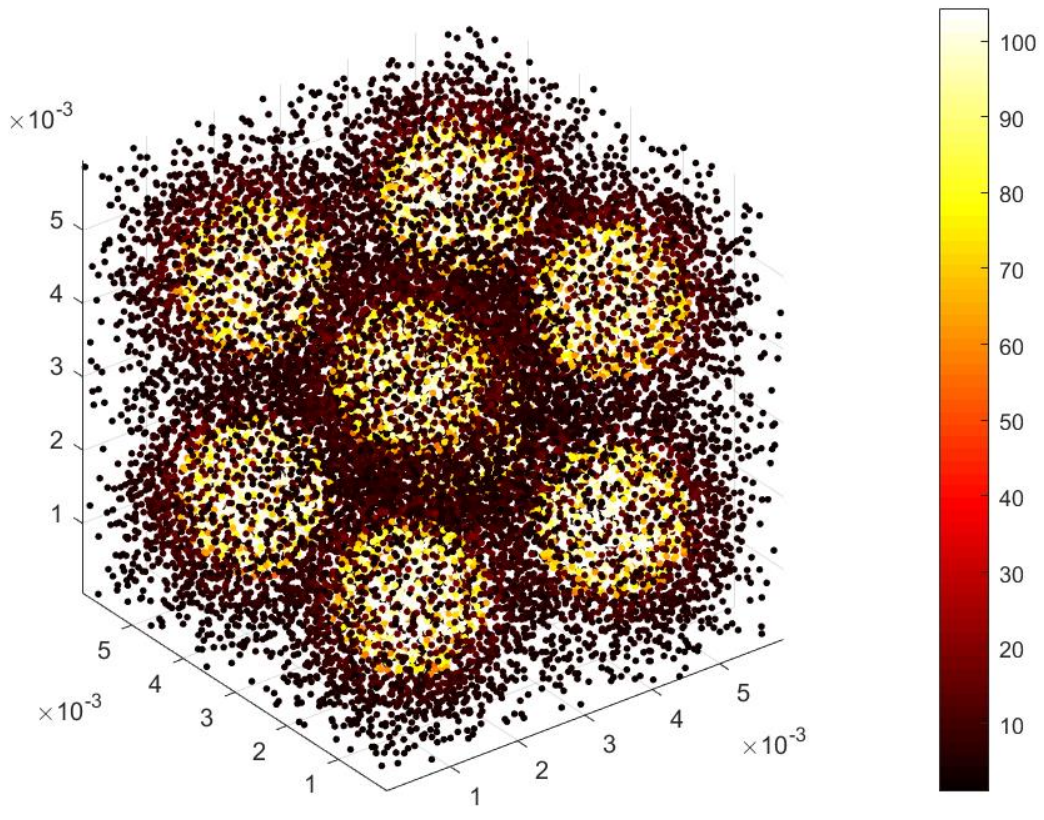

Рис. 3 – Результаты расчета плотности энерговыделения (кэВ/см^3)

3 Аппроксимация результатов на электродинамическую сетку

Моделирование радиационного электромагнитного поля требует совместного применения разных программных средств для оценки влияния различных взаимозависимых факторов на функциональные свойства исследуемых материалов. Применение математических моделей и численных методов для компьютерного исследования процессов различной физической природы (взаимодействие излучения с веществом, вторичные электродинамические эффекты) обусловливает необходимость использования различных геометрических приближений для описания объекта. В этой связи возникает задача интеграции «по данным» результатов численного исследования различных физических процессов в различных математических моделях.

Задача адекватного переноса результатов статистического моделирования энерговыделения излучения и электрических токов с детекторной системы, применяемой при моделировании взаимодействия излучения с веществом, на прямоугольную декартову электродинамическую разностную сетку решается с помощью различных методов аппроксимации, основанных на технологии машинного обучения [7], в частности на технологии нейронных сетей.

В настоящей работе для решения задач аппроксимации использовался многослойный персептрон [8].

Для аппроксимации плотности энерговыделения применялась топология сети (3-100-30-1) и логистическая функция активации нейронов [8] $f(x)=1/(1+e^{-x})$.

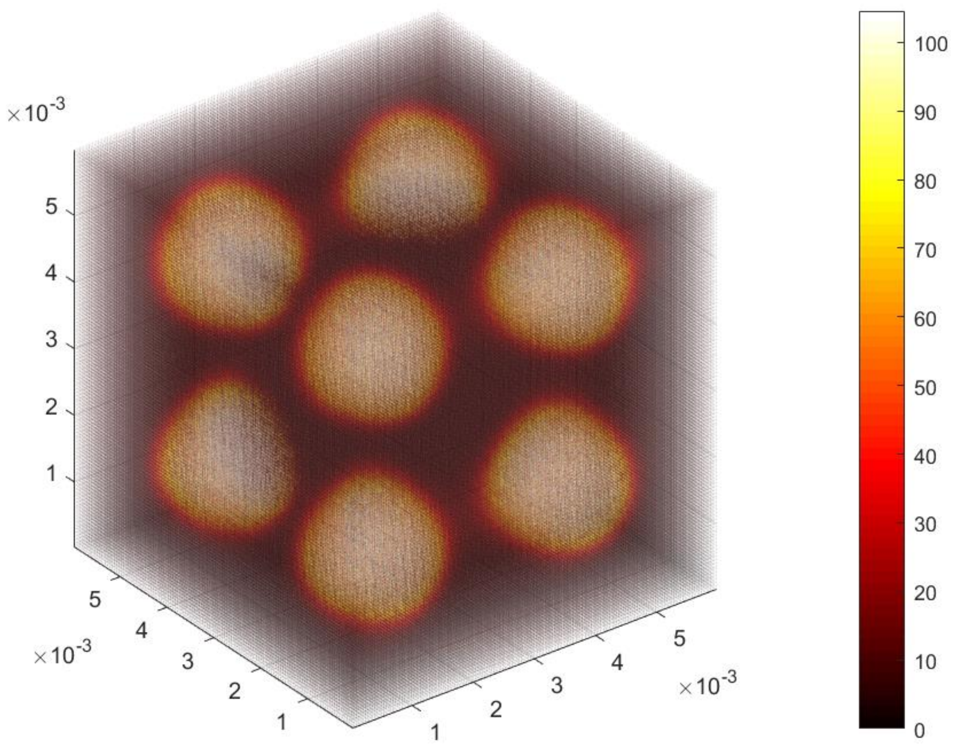

Рис. 4 – Результаты аппроксимации плотности энерговыделения

На рис. 4 представлен результат аппроксимации плотности энерговыделения на электродинамическую сетку.

На рис. 5 плотность энерговыделения изображена в виде поверхности в плоскости z=0.0015 см.

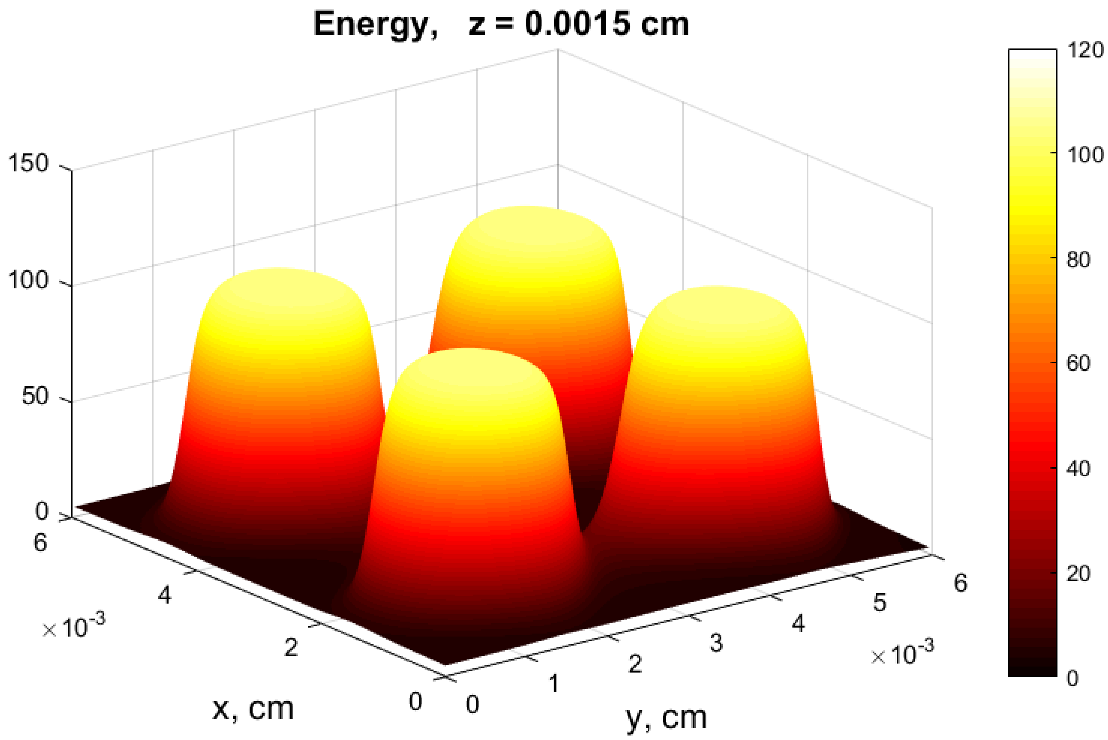

Рис. 5 – Плотность энерговыделения в плоскости z=0.0015 см

При аппроксимации компонент тока использовалась топология сети (3, 60, 25, 8, 1). Функция, описывающая плотность токов, “сложнее” и обладает большим количеством промежутков монотонности – поэтому в топологии персептрона присутствует большее количество скрытых слоев, чем их количество при аппроксимации плотности энерговыделения.

При аппроксимации компонент тока использовались разные функции активации – тангенциальная ($f(x) = \tanh(x)$) [8] для поперечных компонент тока J_x и J_y и логистическая для продольной компоненты J_z.

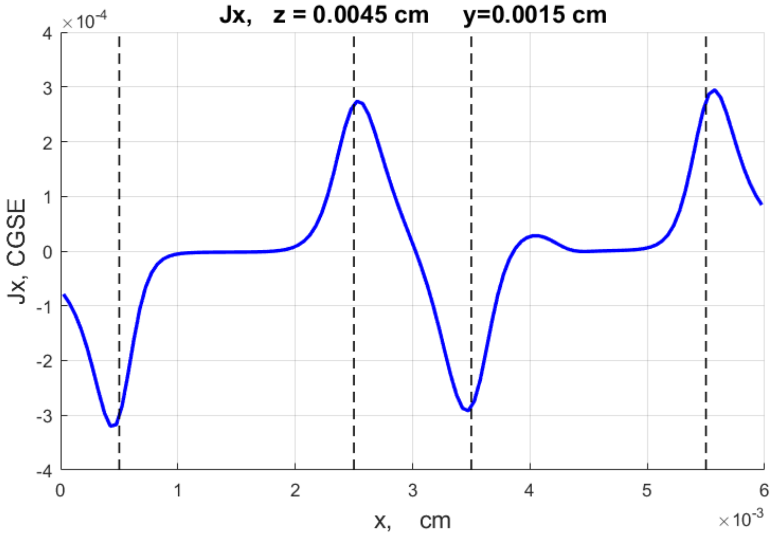

Рис. 6 – Функция $J_x(x)$ при z, y = const

Поперечные компоненты обладают свойством нечетности относительно центра фрагмента – плоскости x=0.003 см для компоненты J_x (рис. 6) и плоскости y=0.003 см, для компоненты J_y (рис. 7). Это свойство лучше воспроизводится с применением тангенциальной функции активации, поскольку эта функция – нечетная.

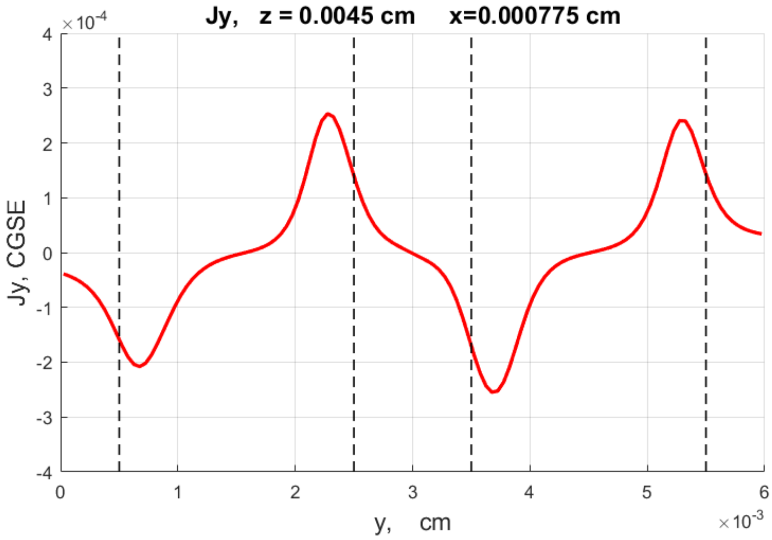

Рис. 7 – Функция $J_y(y)$ при z, x = const

Для решения задачи аппроксимации выбран постоянный шаг градиентного спуска с методом оптимизации BFGS – квазиньютоновский метод оптимизации со схемой Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно [9].

В качестве примера на рис. 8, 9 приведены результаты аппроксимации поперечных компонент плотности потока электронов на электроднамическую сетку. Результаты изображены в виде поверхностей на срезе z=0.0015 см.

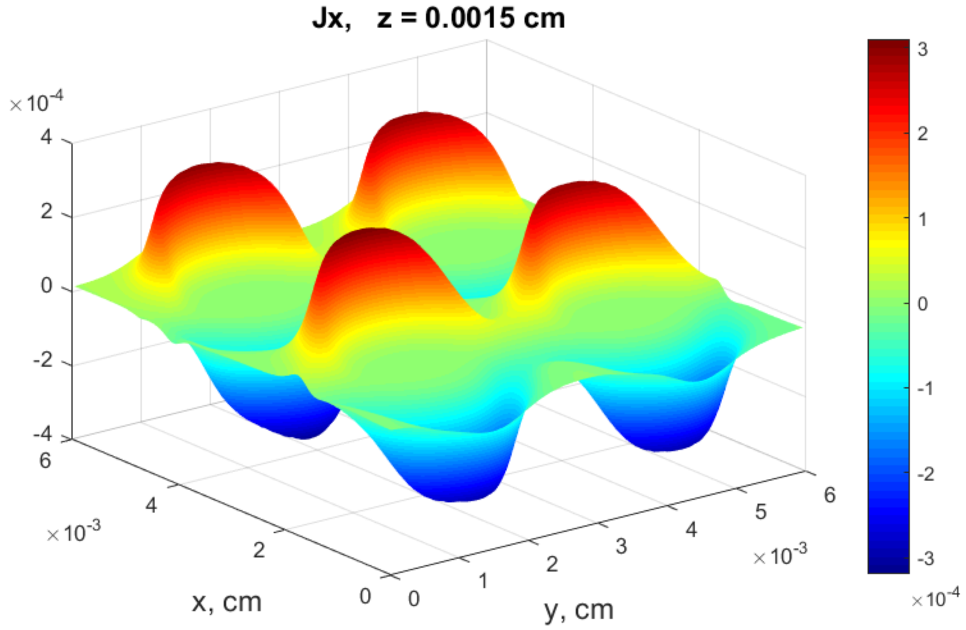

Рис. 8 – Функция $J_x(x,y)$ при z= 0.0015 см

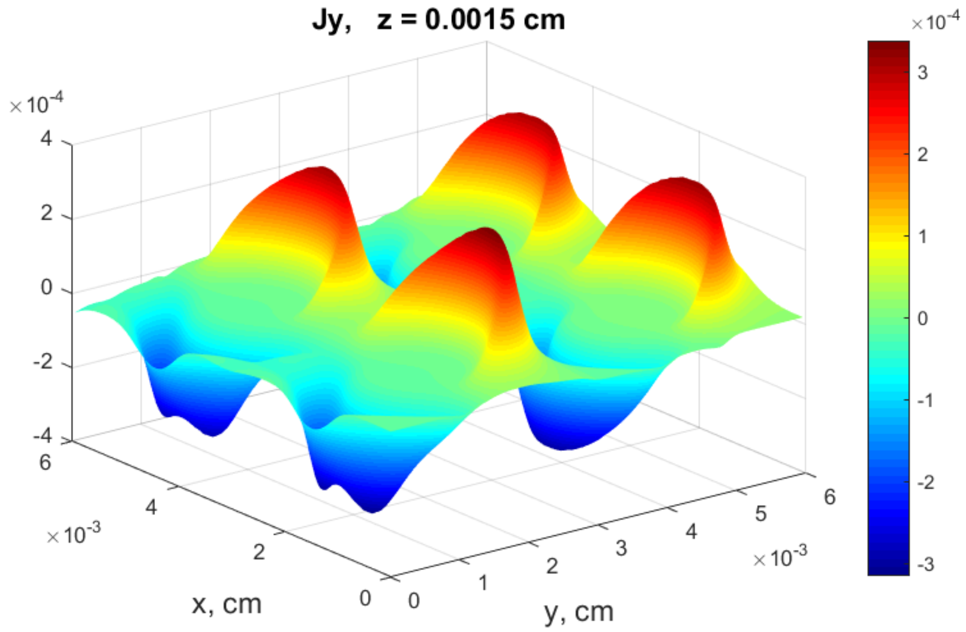

Рис. 9 – Функция $J_y(x,y)$ при z= 0.0015 см

4 Электродинамическая модель

Процесс генерации ЭМП описывается с помощью полной системы нестационарных уравнений Максвелла

$$\begin{aligned}
&\operatorname{rot}\mathbf{H} = \varepsilon \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\left(\sigma\mathbf{E} + \mathbf{j}\right),\\
&\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\mu \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t},\\
&\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\sigma\mathbf{E} + \mathbf{j}\right) = 0,\\
&\mathbf{j} = \varphi(t)\left(\delta(z),0,0\right),\ \mathbf{E}\big|_{t=0} = \mathbf{H}\big|_{t=0} = \rho\big|_{t=0} = 0.
\end{aligned} \tag{1}$$

В системе (1)

$\rho = \rho(t,\mathbf{r})$ – плотность электрического заряда,

$\mathbf{j} = \mathbf{j}(t,\mathbf{r})$ – плотность электрического тока,

$\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ – диэлектрическая проницаемость материалов,

$\mu = \mu(\mathbf{r})$ – магнитная проницаемость материалов,

$\sigma = \sigma(\mathbf{r})$ – проводимость материалов,

t – лабораторное время,

$\mathbf{r} = (x,y,z) \in \mathbb{R}^3$.

Рассмотрим уравнения (1) в ограниченной области $\Omega = \left\{x,y,z : x \in [x_{\min}, x_{\max}], y \in [y_{\min}, y_{\max}], z \in [z_{\min}, z_{\max}]\right\}$ с границей $\partial\Omega$. На границе области Ω считается выполненным условие

$$\oiint\limits_{\partial\Omega} \left\langle [\mathbf{E},\mathbf{H}] \cdot \mathbf{n} \right\rangle ds \geqslant 0, \tag{2}$$

$\mathbf{n}$ – единичный вектор в направлении внешней нормали к поверхности $\partial\Omega$.

В качестве приближенных граничных условий используется равенство на границе тангенциальных компонент электрического и магнитного полей.

$$\begin{aligned}
&E^y = H^z \quad E^z = -H^y \text{ при } x = x_{\max}, \quad E^y = -H^z \quad E^z = H^y \quad \text{при}\\
&x = x_{\min},\\
&E^z = H^x \quad E^x = -H^z \quad \text{при} \quad y = y_{\max}, \quad E^z = -H^x \quad E^x = H^z \quad \text{при}\\
&y = y_{\min},\\
&E^x = H^y \quad E^y = -H^x \quad \text{при} \quad z = z_{\max}, \quad E^x = -H^y \quad E^y = H^x \quad \text{при}\\
&z = z_{\min},\\
&t \geq 0, \mathbf{r} \in \Omega.
\end{aligned} \tag{3}$$

Оно обеспечивает совпадение направлений вектора Пойнтинга и внешней нормали к границе, разрешая отток электромагнитной энергии из области Ω и запрещая приток. Будем считать, что погрешность, вносимая этим приближением, допустима при решении задачи (1) Граничные условия задачи (3) называют «условиями излучения».

На основе этого приближения формулируются граничные условия для полной начально-краевой задачи:

$$
\begin{aligned}
&\operatorname{rot}\mathbf{H} = \varepsilon\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\left(\sigma\mathbf{E}+\mathbf{j}\right), \operatorname{rot}\mathbf{E} = -\mu\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t},\\
&\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\sigma\mathbf{E}+\mathbf{j}\right) = 0,\ \ \mathbf{j} = \varphi(t)\left(\delta(z),0,0\right),\ \ \mathbf{E}\big|_{t=0} = \mathbf{H}\big|_{t=0} = \rho\big|_{t=0} = 0,\\
&E^y = H^z \quad E^z = -H^y \text{ при } x = x_{\max},\quad E^y = -H^z \quad E^z = H^y \quad \text{при}\\
&x = x_{\min},\\
&E^z = H^x \quad E^x = -H^z \text{ при } y = y_{\max},\ E^z = -H^x \quad E^x = H^z \quad \text{при}\\
&y = y_{\min},\\
&E^x = H^y \quad E^y = -H^x \text{ при } z = z_{\max},\ E^x = -H^y \quad E^y = H^x \quad \text{при}\\
&z = z_{\min},\\
&t \ge 0,\ \ \mathbf{r}\in\Omega.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

5 Численный алгоритм решения уравнений Максвелла

Алгоритм численного решения начально-краевой задачи (4) основан на разностной схеме, представленной в работах [10-11]. Она хорошо зарекомендовала себя при решении большого количества различных электродинамических задач [11].

Рассмотрим уравнения Максвелла в декартовой системе координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$:

$$\partial_y H^z - \partial_z H^y = \varepsilon\dot{E}^x + I^x, \tag{5}$$

$$\partial_z H^x - \partial_x H^z = \varepsilon\dot{E}^y + I^y, \tag{6}$$

$$\partial_x H^y - \partial_y H^x = \varepsilon\dot{E}^z + I^z, \tag{7}$$

$$\partial_z E^y - \partial_y E^z = \mu\dot{H}^x, \tag{8}$$

$$\partial_x E^z - \partial_z E^x = \mu \dot{H}^y, \qquad (9)$$

$$\partial_y E^x - \partial_x E^y = \mu \dot{H}^z, \qquad (10)$$

символы ∂_x, ∂_y, ∂_z означают частные производные по соответствующим координатам, точка над функцией обозначает ее частную производную по переменной $\xi \equiv ct$, $\{\xi : \xi \in [0, \xi_{\max}]\}$, $\mathbf{I} \equiv (4\pi / c)(\sigma \mathbf{E} + \mathbf{j})$.

Разностная пространственная сетка следующая.

$x_{i+1} = x_i + \Delta_i; \quad i = 0,\ldots,N_x - 1, \quad x_0 = x_{\min}, \quad x_{N_x} = x_{\max}$

$x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2; \quad i = 0,\ldots,N_x - 1, \quad x_{-1/2} = x_0, \quad x_{N_x+1/2} = x_{N_x}$

$\delta_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}; \quad i = 0,\ldots,N_x, \quad \delta_0 = \Delta_0 / 2, \quad \delta_{N_x} = \Delta_{N_x-1} / 2$

По переменным (y, z) разностная сетка вводится аналогично. Выберем сетку так, чтобы разрывы коэффициентов уравнений разместились на поверхностях $x = x_i$, $y = y_j$ и $z = z_k$. Значения коэффициентов заданы в точках сетки с дробными индексами. Эти точки совпадают с центрами прямоугольных параллелепипедов, образованных пересечением плоскостей $x = x_i, x_{i+1}$, $y = y_j, y_{j+1}$ и $z = z_k, z_{k+1}$. Внутри этих параллелепипедов все коэффициенты системы, плотности стороннего тока и компоненты электромагнитного поля непрерывны.

Компонента напряженности электрического поля, нормальная к поверхности разрыва ε, терпит разрыв при переходе через эту поверхность. Касательные к этой поверхности компоненты напряженности электрического поля при этом непрерывны. Поэтому сеточные компоненты электрического поля E^x, E^y и E^z определим в середине соответствующих ребер указанных прямоугольных параллелепипедов.

Компоненты напряженности магнитного поля H^x, H^y, H^z размещаются в центрах граней параллелепипедов. Нормальный к поверхности разрыва μ компонент напряженности магнитного поля терпит разрыв, а соответствующий ему компонент индукции магнитного поля непрерывен.

Конечно-разностные аналоги уравнений (5-10) имеют вид.

Уравнение (5):

$$\partial_y H^z \Big|_{i+1/2,\, j,k} - \partial_z H^y \Big|_{i+1/2,\, j,k} = \overset{\circ}{\varepsilon}_{i+1/2,\, j,k}\, \dot{E}^x_{i+1/2,\, j,k} + \overset{\circ}{I}{}^x_{i+1/2,\, j,k},$$

где

$$\overset{\circ}{I}{}^x_{i+1/2,\, j,k} = (4\pi/c)(\overset{\circ}{\sigma}_{i+1/2,\, j,k}\, E^x_{i+1/2,\, j,k} + \overset{\circ}{J}{}^{\mathrm{x}}_{i+1/2,\, j,k}),$$

$$\partial_y H^z = \left(H^z_{i+1/2,\, j+1/2,k} - H^z_{i+1/2,\, j-1/2,k} \right) \Big/ \delta y_j \ ,$$
$$\partial_z H^y = \left(H^y_{i+1/2,\, j,k+1/2} - H^y_{i+1/2,\, j,k-1/2} \right) \Big/ \delta z_k \ .$$

Уравнение (6):

$$\partial_z H^x \Big|_{i,\, j+1/2,k} - \partial_x H^z \Big|_{i,\, j+1/2,k} = \overset{\circ}{\varepsilon}_{i,\, j+1/2,k}\, \dot{E}^y_{i,\, j+1/2,k} + \overset{\circ}{I}{}^{y}_{i,\, j+1/2,k} \,,$$

где

$$\overset{\circ}{I}{}^{y}_{i,\, j+1/2,k} = \left(4\pi/c \right) \left(\overset{\circ}{\sigma}_{i,\, j+1/2,k}\, E^y_{i,\, j+1/2,k} + \overset{\circ}{J}{}^{y}_{i,\, j+1/2,k} \right)$$

$$\partial_z H^x = \left(H^x_{i,\, j+1/2,k+1/2} - H^x_{i,\, j+1/2,k-1/2} \right) \Big/ \delta_k \,, \quad \partial_x H^z = \left(H^z_{i+1/2,\, j+1/2,k} - H^z_{i-1/2,\, j+1/2,k} \right) \Big/ \delta_i \ .$$

Уравнение (7):

$$\partial_x H^y \Big|_{i,\, j,k+1/2} - \partial_y H^x \Big|_{i,\, j,k+1/2} = \overset{\circ}{\varepsilon}_{i,\, j,k+1/2}\, \dot{E}^z_{i,\, j,k+1/2} + \overset{\circ}{I}{}^{z}_{i,\, j,k+1/2} \,,$$

где

$$\overset{\circ}{I}{}^{z}_{i,\, j,k+1/2} = \left(4\pi/c \right) \left(\overset{\circ}{\sigma}_{i,\, j,k+1/2}\, E^z_{i,\, j,k+1/2} + \overset{\circ}{J}{}^{z}_{i,\, j,k+1/2} \right)$$

$$\partial_x H^y = \left(H^y_{i+1/2,\, j,k+1/2} - H^y_{i-1/2,\, j,k+1/2} \right) \Big/ \delta x_i \,, \quad \partial_y H^x = \left(H^x_{i,\, j+1/2,k+1/2} - H^x_{i,\, j-1/2,k+1/2} \right) \Big/ \delta y_j \ .$$

Уравнение (8):

$$\partial_z E^y \Big|_{i,\, j+1/2,k+1/2} - \partial_y E^z \Big|_{i,\, j+1/2,k+1/2} = \hat{\mu}_{i,\, j+1/2,k+1/2} \dot{H}^x_{i,\, j+1/2,k+1/2} \,,$$

где

$$\partial_z E^y = \left(E^y_{i,\, j+1/2,k+1} - E^y_{i,\, j+1/2,k} \right) \Big/ \Delta z_k \,, \quad \partial_y E^z = \left(E^z_{i,\, j+1,k+1/2} - E^z_{i,\, j,k+1/2} \right) \Big/ \Delta y_j \ ,$$
$$\hat{\mu}_{i,\, j+1/2,k+1/2} = \left(\Delta x_{i-1} \Big/ \left(2\delta_i \mu_{i-1/2,\, j+1/2,k+1/2} \right) + \Delta x_i \Big/ \left(2\delta_i \mu_{i+1/2,\, j+1/2,k+1/2} \right) \right)^{-1} .$$

Уравнение (9):

$$\partial_x E^z \Big|_{i+1/2,\, j,k+1/2} - \partial_z E^x \Big|_{i+1/2,\, j,k+1/2} = \hat{\mu}_{i+1/2,\, j,k+1/2} \dot{H}^y_{i+1/2,\, j,k+1/2} \,,$$

где

$$\partial_x E^z = \left(E^z_{i+1,\, j,k+1/2} - E^z_{i,\, j,k+1/2} \right) \Big/ \Delta x_i \,, \quad \partial_z E^x = \left(E^x_{i+1/2,\, j,k+1} - E^x_{i+1/2,\, j,k} \right) \Big/ \Delta z_k \ ,$$
$$\hat{\mu}_{i+1/2,\, j,k+1/2} = \left(\Delta y_{j-1} \Big/ \left(2\delta_j \mu_{i+1/2,\, j-1/2,k+1/2} \right) + \Delta y_j \Big/ \left(2\delta_j \mu_{i+1/2,\, j+1/2,k+1/2} \right) \right)^{-1} .$$

Уравнение (10):

$$\partial_y E^x\Big|_{i+1/2,\,j+1/2,k} - \partial_x E^y\Big|_{i+1/2,\,j+1/2,k} = \hat{\mu}_{i+1/2,\,j+1/2,k}\dot{H}^z_{i+1/2,\,j+1/2,k},$$

где

$$\partial_y E^x = \left(E^x_{i+1/2,\,j+1,k} - E^x_{i+1/2,\,j,k}\right)\Big/\Delta y_j, \quad \partial_x E^y = \left(E^y_{i+1,\,j+1/2,k} - E^y_{i,\,j+1/2,k}\right)\Big/\Delta x_i,$$

$$\hat{\mu}_{i+1/2,j+1/2,k} = \left(\Delta z_{k-1}\Big/\left(2\delta_k \mu_{i+1/2,j+1/2,k-1/2}\right) + \Delta z_k\Big/\left(2\delta_k \mu_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}\right)\right)^{-1}.$$

Приведенные конечно-разностные уравнения дивергентны (консервативны) по построению [10].

Для построения разностной аппроксимации уравнений Максвелла по времени на интервале $t \in [t_{\min}; t_{\max}]$ введем неравномерную сетку:

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t_n; \quad n = 0,\dots,N_t - 1, \quad t_0 = t_{\min}, \quad t_{N_t} = t_{\max},$$
$$t_{n+1/2} = \left(t_n + t_{n+1}\right)/2; \quad n = 0,\dots,N_t - 1;$$
$$\delta t_n = t_{n+1/2} - t_{n-1/2}; \quad n = 2,\dots,N_t - 1.$$

Компоненты электрического поля (E^x, E^y, E^z) задаются в целые моменты времени t_n. Компоненты магнитного поля (H^x, H^y, H^z) и плотность электрического тока (j^x, j^y, j^z) - в полуцелых моментах времени $t_{n+1/2}$.

Производные по времени аппроксимируются явными разностными соотношениями:

$$\partial_t E^x = \frac{E^x_{i+1/2,\,j,k,n+1} - E^x_{i+1/2,\,j,k,n}}{\Delta t_n};$$

$$\partial_t H^x = \frac{H^x_{i,\,j+1/2,k+1/2,n+3/2} - H^x_{i,\,j+1/2,k+1/2,n+1/2}}{\delta t_{n+1}};$$

$$\partial_t E^y = \frac{E^y_{i,\,j+1/2,k,n+1} - E^y_{i,\,j+1/2,k,n}}{\Delta t};$$

$$\partial_t H^y = \frac{H^y_{i+1/2,\,j,k+1/2,n+3/2} - H^y_{i+1/2,\,j,k+1/2,n+1/2}}{\delta t_{n+1}};$$

$$\partial_t E^z = \frac{E^z_{i,\,j,k+1/2,n+1} - E^z_{i,\,j,k+1/2,n}}{\Delta t_n};$$

$$\partial_t H^z = \frac{H^z_{i+1/2,\,j+1/2,k,n+3/2} - H^z_{i+1/2,\,j+1/2,k,n+1/2}}{\delta t_{n+1}}.$$

Построенный численный алгоритм реализован в виде программного модуля, ориентированного на многопроцессорную вычислительную технику [11] с использованием технологии распараллеливания MPI.

6 Результаты моделирования ЭМП

В этом разделе приведены некоторые результаты моделирования радиационного электромагнитного поля в гетерогенной мелкодисперсной среде.

Объект облучения – фрагмент из связующего (полибутадиен) и диэлектрическе включения (перхлорат аммония), изображенный на рис. 1.

Мощность источника гамма-излучения описывается функцией

$$J = N_0 f(t),\ f(t) = \frac{2}{t_0}\left(1 - \frac{t}{t_0}\right),\ t_0 = 2 \cdot 10^{-8} c;\quad \int_0^{t_0} f(\tau)d\tau = 1.$$

N_0 подобрана таким образом, чтобы амплитуда электрического поля была порядка 1 CGSE.

Радиационная проводимость материалов определялась по формулам [12]:

$\sigma = 1.8 \cdot 10^{-7} D$ для связующего и $\sigma = 1.8 \cdot 10^{-6} D$ для включений, D – мощность дозы излучения в рад/с.

На рис. 10-13 изображены двумерные распределения амплитуды электрического поля в плоскостях, перпендикулярных координатныи осям.

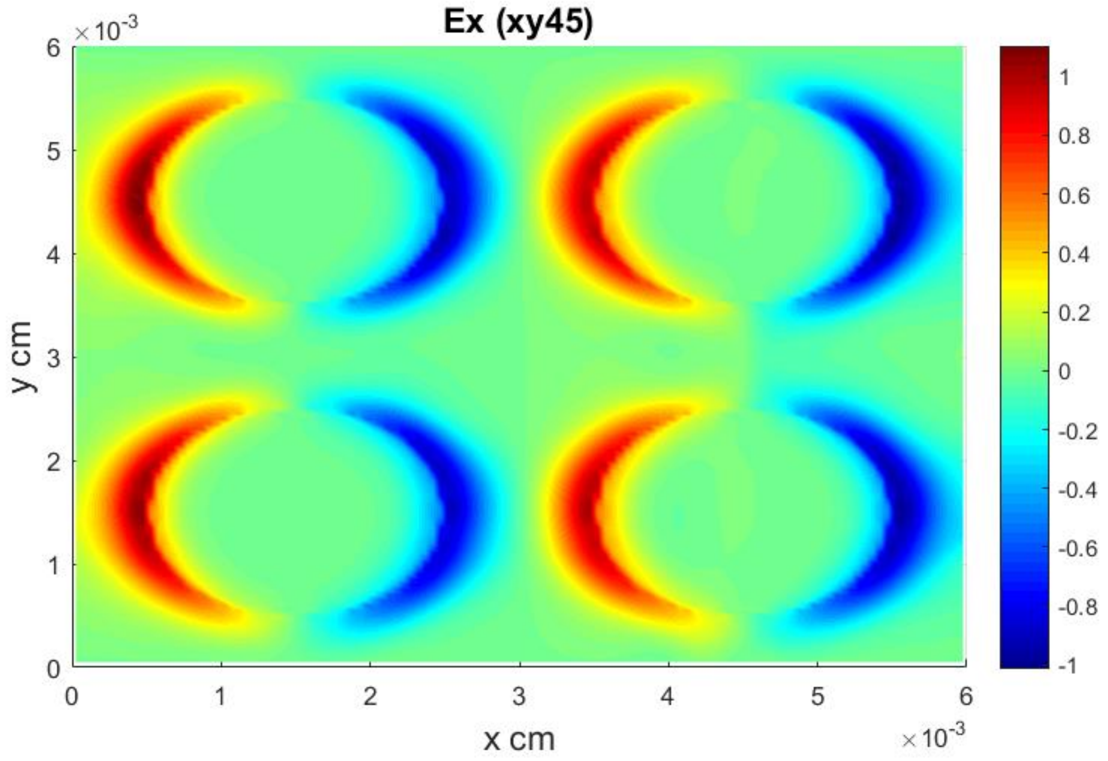

Рис. 10 – E_x при z= 0.0045 см

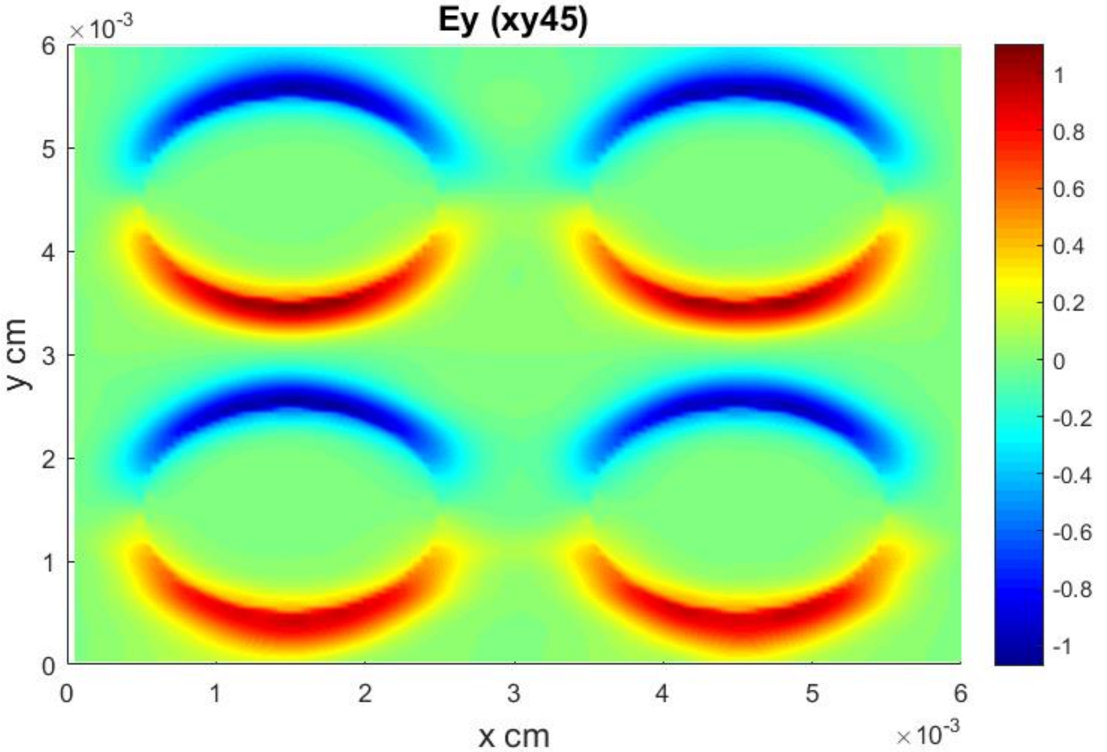

Рис. 11 – E_y при z= 0.0045 см

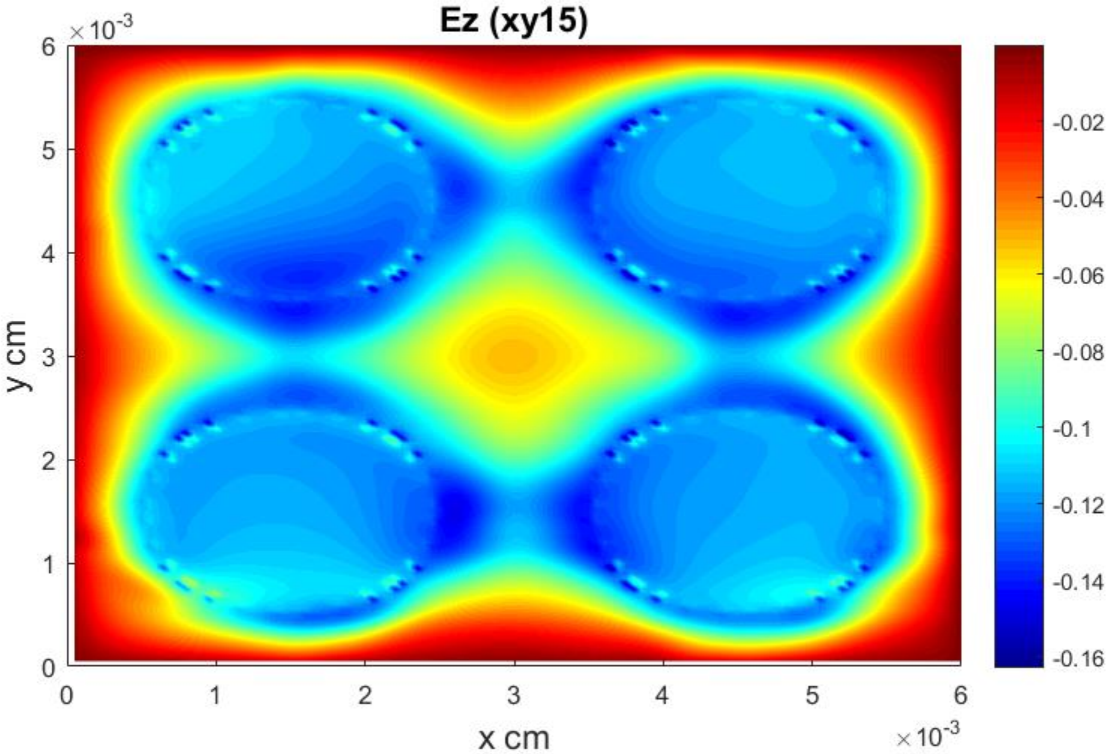

Рис. 12 – E_z при z= 0.0015 см

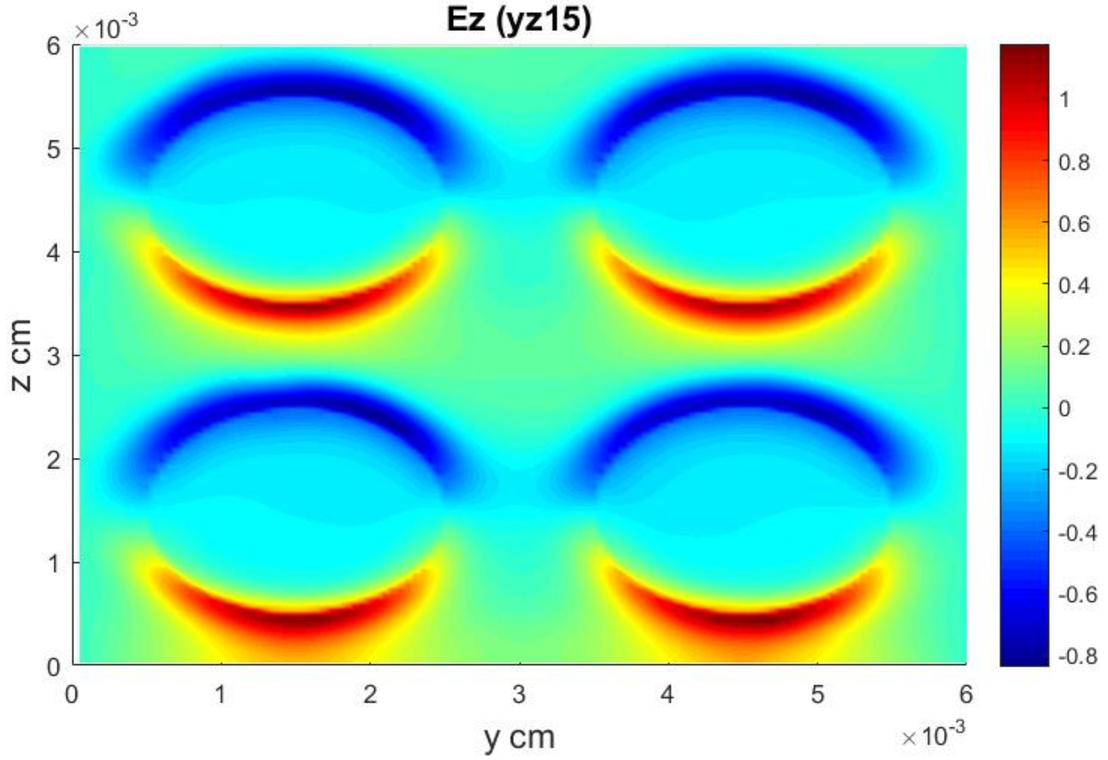

Рис. 13 – E_z при x= 0.0015 см

На рис. 14, 15 изображены двумерные пространственные распределения амплитуд поперечных (по отношению к направлению потока фотонов) компонент магнитного поля в плоскости z=0.0045 см.

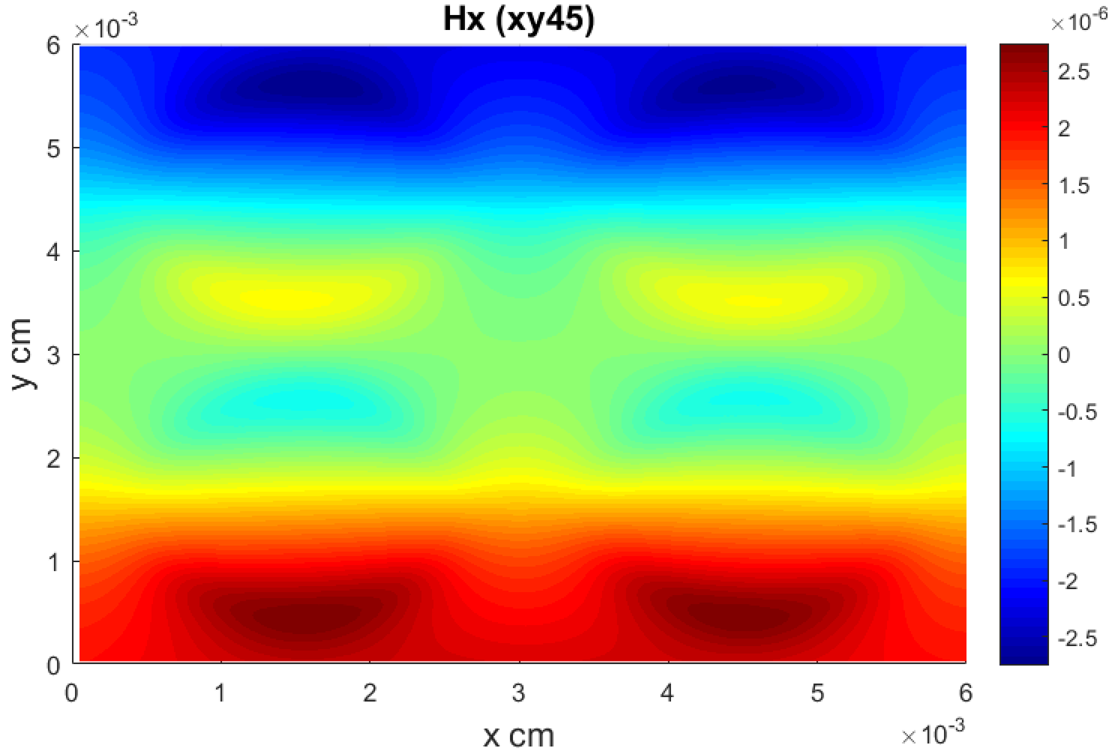

Рис. 14 – H_x при z= 0.0045 см

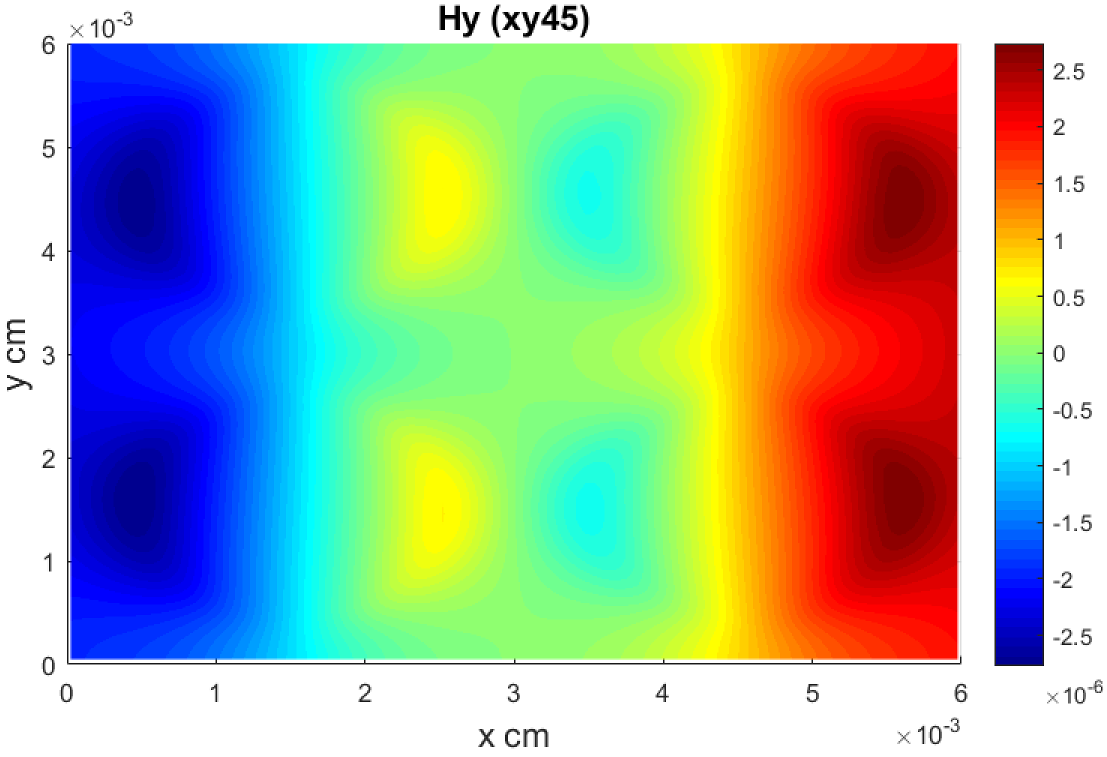

Рис. 15 – H_y при z= 0.0045 см

Приведенные иллюстрации показывают, что при облучении исследуемого фрагмента генерируются электрические поля с резко неоднородной пространственной структурой, причем неоднородности возникают вблизи граничных поверхностей связующего и включений.

Генерируемое магнитное поле пренебрежимо мало по сравнению с электрическим (рис. 14, 15).

Заключение

Разработаны алгоритмы суперкомпьютерного моделирования радиационного электромагнитного поля в гетерогенных мелкодисперсных материалах с прямым учетом их микроструктуры. Моделирование включает в себя статистическую оценку энерговыделения и электрических токов, аппроксимацию результатов с детекторной системы на разностную электродинамическую сетку и численное решение полной системы уравнений Максвелла.

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

Проведено математическое трехмерное моделирование радиационного ЭМП во фрагменте объекта дисперсной структуры, результаты которого показали, что при облучении исследуемого фрагмента формируются электромагнитные поля с резко неоднородной пространственной структурой, причем неоднородности возникают вблизи граничных поверхностей связующего и включений.

Генерация ЭМП на границе раздела двух сред обусловлена преобладанием электронной эмиссии из включения (материал с бо́льшим макроскопическим сечением фотонов) в связующее (материал с бо́льшей проникающей способностью электронов) над эмиссией в обратном направлении.

Библиографический список

1. M. E. Zhukovskiy, M. B. Markov, R. V. Uskov, “Modeling of radiation-induced electric current in the materials of finely dispersed structure”, *Mathematica Montisnigri*, **47**, 65-74 (2020).
2. О моделировании радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в мелкодисперсных материалах замкнуто-ячеистой структуры / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 80. 15 с. doi:10.20948/prepr-2019-80 URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-80 .
3. M. Skoge, A. Donev, F. H. Stillinger, and S. Torquato. “Packing hard spheres in high dimensional Euclidean spaces”, Phys. Rev. E, **74**: 041127 (2006).
4. О моделировании радиационноиндуцированных 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.
5. М.Е. Жуковский, Р.В. Усков Гибридное распараллеливание алгоритмов моделирования каскадных процессов переноса излучения // Матем. моделирование, 27:5 (2015), 39–51 http://mi.mathnet.ru/mm3598.
6. В. А. Егорова, Ф. Н. Воронин, М. Е. Жуковский, М. Б. Марков, А. И. Потапенко, Р. В. Усков, Д. С. Бойков, “Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах”, *Матем. моделирование*, **32**:1 (2020), 85–99.
7. T. Mitchell. Machine Learning. - McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997. 432 p.
8. Хайкин, Саймон Нейронные сети. Полный курс / Саймон Хайкин. - М.: Вильямс, 2016. - 605 c.
9. Nocedal, Jeorge; Wright, Stephen J. Numerical Optimization. — 2nd edition. — USA: Springer, 2006. — ISBN 978-0-387-30303-1.
10. А.В. Березин, Н.С. Келлин, М.Б. Марков, С.В. Паротькин, А.В. Сысенко, «Радиационное электромагнитное поле в объекте с идеально проводящей границей», Матем. Моделирование, **16**, 3, 3-12 (2004).
11. А.Н. Андрианов, А.В. Березин, А.С. Воронцов, К.Н. Ефимкин, М.Б. Марков, «Моделирование электромагнитных полей радиационно-

го происхождения на многопроцессорных вычислительных системах», Матем. моделирование, **20**, 3, 98-114 (2008).

12. И.П. Безродных, А.П. Тютнев, В.Т. Семёнов, *Радиационные эффекты в космосе.* Часть 2. Воздействие космической радиации на электротехнические материалы, М.: АО «Корпорация «ВНИИЭМ» (2016).