

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**Тихонов Александр Владимирович**

**Выпускная квалификационная работа магистра**

**Математическое и компьютерное моделирование  
сложных динамических систем**

Направление 02.04.02

Фундаментальная информатика и информационные технологии

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., профессор Андрианов С.Н.

Рецензент:

к. т. н., стар. научн. сотр. ОИЯИ

Юдин И.П.

Санкт-Петербург

2020

# Оглавление

|  |    |
|--|----|
| <b>Введение</b> .....  | 3  |
| <b>Глава 1. Постановка и формализация задачи</b> .....                                     | 5  |
| 1.1 Динамические системы и их модели.....  | 5  |
| 1.2 Основные понятия зондоформирующих систем .....   | 6  |
| 1.3 Управляющие параметры .....  | 8  |
| 1.4 Физическая модель зондоформирующей системы.....  | 9  |
| 1.5 Заключение к Главе 1.....  | 12 |
| <b>Глава 2. Математическая модель микрозонда</b> .....                                     | 13 |
| 2.1 Линейная модель зондоформирующей системы .....   | 13 |
| 2.2 Основные понятия искусственных нейронных сетей .....                                   | 15 |
| 2.3 Классификация нейронных сетей.....   | 17 |
| 2.4 Глубокие нейронные сети .....  | 19 |
| 2.5 Полиномиальная нейронная сеть.....   | 20 |
| 2.6 Заключение к Главе 2.....  | 23 |
| <b>Глава 3. Программная реализация</b> .....   | 24 |
| 3.1 Обзор существующих решений для создания искусственных нейронных сетей.....             | 24 |
| 3.2 Применение искусственной нейронной сети для моделирования зондоформирующих систем..... | 25 |
| 3.3 Пользовательский интерфейс приложения .....  | 26 |
| 3.4 Вычислительный эксперимент .....   | 28 |
| 3.5 Заключение к Главе 3.....  | 31 |
| <b>Заключение</b> .....  | 32 |
| <b>Список литературы</b> .....   | 33 |

# Введение

Динамические системы являются неотъемлемой частью современной науки [3]. Многие существующие объекты представляют из себя динамические системы, поэтому изучение внутренних связей и процессов функционирования подобных систем представляет особый интерес.

В качестве примера реальной динамической системы будем рассматривать ускорители заряженных частиц, а именно системы фокусировки пучка частиц под названием зондоформирующие системы (ЗФС). Данные системы фокусируют пучок заряженных частиц на мишень, обеспечивая сохранение необходимых свойств и характеристик пучка. Для достижения требуемых размеров пучка на мишени, которые обычно варьируются от микро- до нанометров, реальная установка должна быть точно настроена. Подобные устройства очень чувствительны к любым отклонениям управляющих элементов, число которых значительно выросло в процессе развития данных систем [4]. Так как в качестве мишени может выступать практически любой объект, подобные устройства применяются во многих областях науки: имплантация ионов (см., например, [36]), изменение состава материалов (см., например, [19]), лечение и диагностика болезней (см., например, [28]).

Традиционно для численного решения дифференциальных уравнений, описывающих ЗФС, применяются различные модификации методов Рунге-Кутты, зависящие от конкретной задачи. В качестве недостатков данного подхода можно отметить низкую устойчивость решений к возможным отклонениям, а также заметное нарастание объема вычислений при увеличении размеров задачи [1]. Использование данных методов подразумевает проведение всех вычислений заново при каких-либо изменениях в конструкции ЗФС, что достаточно неудобно на практике.

Возникает задача поиска метода, лишенного данных недостатков и дающего возможность провести сравнение результатов с классическим подходом, что важно перед проведением дорогостоящих экспериментов на реальных устройствах.

Технологии искусственного интеллекта могут помочь в решении данной задачи [23]. В данной работе рассматривается подход с использованием нейронных сетей. Нейронные сети находят применение во многих предметных областях: решение обыкновенных дифференциальных уравнений [31, 41]; идентификация динамических систем [43], детектирование частиц [40], алгоритмы компьютерного зрения [34, 44] и других. Нейронные сети также открывают возможность использования современных методов обработки данных, таких как параллельные и распределенные вычисления.

С учетом вышеизложенного **целью** данной работы является исследование применимости искусственных нейронных сетей для математического и компьютерного моделирования зондоформирующих систем.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

- 1) исследование и поиск решений проблем, возникающих при моделировании и эксплуатации зондоформирующих установок;
- 2) обзор существующих методов построения нейронных сетей и применение их для моделирования зондоформирующих систем;
- 3) проведение численных экспериментов;
- 4) анализ полученных результатов.

# Глава 1. Постановка и формализация задачи

В главе формализуются понятия динамических и зондоформирующих систем. Рассматриваются основные понятия и устройство систем фокусировки пучка частиц. Отдельное внимание уделяется влиянию на зондовые системы проблем отклонений управляющих элементов от оптимальных положений. В данной главе задается физическая модель подобных устройств.

## 1.1 Динамические системы и их модели

*Динамическими* называются такие системы, для которых известно понятие «состояния системы», определяемое вектором параметров из пространства состояний, и закон, по которому оно может изменяться в зависимости от времени и начальных условий [5].

Исследование подобных систем возможно проводить, рассматривая их модели. На первом этапе на основе всех известных данных о системе строится ее физическая модель. В рамки предлагаемой модели необходимо включить всю теоретическую (дифференциальные и функциональные связи) и практическую (данные наблюдений и экспериментов) информацию, а также особенности рассматриваемого класса задач. После формирования информации об объектах и субъектах управляющих систем строится математическая модель, описывающая систему с учетом строгих математических соотношений. Данное построение может быть выполнено, например, методами аппроксимации с учетом известной информации о рассматриваемых объектах. Однако, следует отметить, что на практике часто модели устроены проще, чем сами системы, из-за невозможности полного учета всех свойств оригинала. В связи с этим при составлении модели задаются требования к необходимой и достаточной точности описания

реальной системы. Классическим подходом является первостепенное построение и изучение линейной модели системы. Следует заметить, что в современной теоретической и практической физике линейные модели рассматриваются на начальном этапе, так как актуальные требования приводят к необходимости учета влияния нелинейностей. Из-за своей сложности нелинейные модели всегда требуют особого рассмотрения [6].

## 1.2 Основные понятия зондоформирующих систем

Класс систем, выполняющих перевод пучка заряженных частиц из одной области пространства в другую, а также его фокусировку, называется *ионно-оптическими системами (ИОС)*.

ИОС, требующая сильной степени сжатия пучка на мишени, называется *зондоформирующей системой (ЗФС)*. Размер пучка на мишени определяет тип установки: микро- или нанозондоформирующая система.

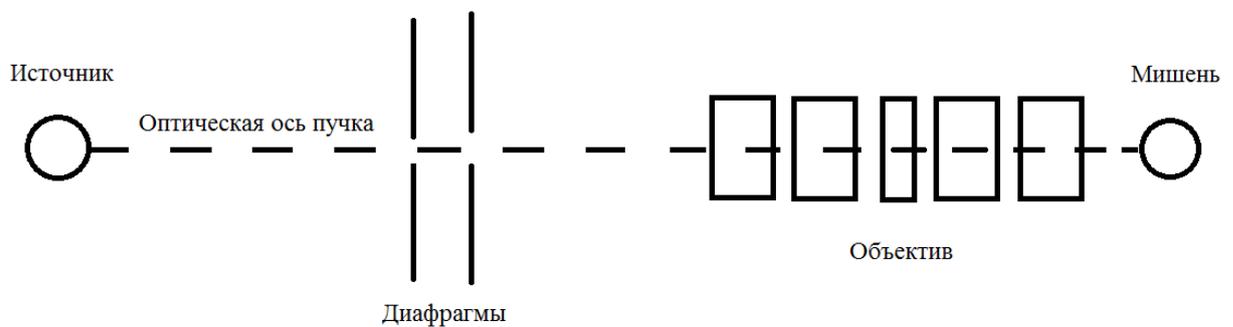


Рис. 1.1 Принципиальная схема ЗФС

В составе ЗФС принято выделять (см. рис. 1.1) четыре основных элемента: источник частиц, диафрагмы, объектив и мишень. В систему также всегда включено множество фиксирующих датчиков и детекторов [21]. Однако, значительная часть современных микро- и нанозондоформирующих

систем может содержать в себе большое количество управляющих элементов, в том числе и различного порядка нелинейности.

В зависимости от типа установки источником частиц может являться традиционный «генератор частиц» [32] или более сложные системы ускорителей, которые позволяют добиться от пучка некоторых требуемых характеристик уже на момент ввода в систему. После источника частиц возможно наличие набора дополнительных систем, например, дипольных, квадрупольных, секступольных и октупольных элементов. Наличие подобных систем и формирование соответствующей структуры вызвано тем, что в современной практической физике быстро растут требования к данным устройствам.

Диафрагмы отвечают за формирование начального множества пучка перед объективом. Они представляют из себя несколько пластин со специальными вырезами. На рисунке 1.2 показаны два наиболее используемых вида диафрагм. В варианте *a* используются две тонкие диафрагмы, а вариант *б*, в свою очередь, предусматривает одну толстую. Подбор размеров вырезов и расстояния между диафрагмами является важной частью процесса проектирования ЗФС, однако для данной работы больший интерес представляет последующая часть устройства.

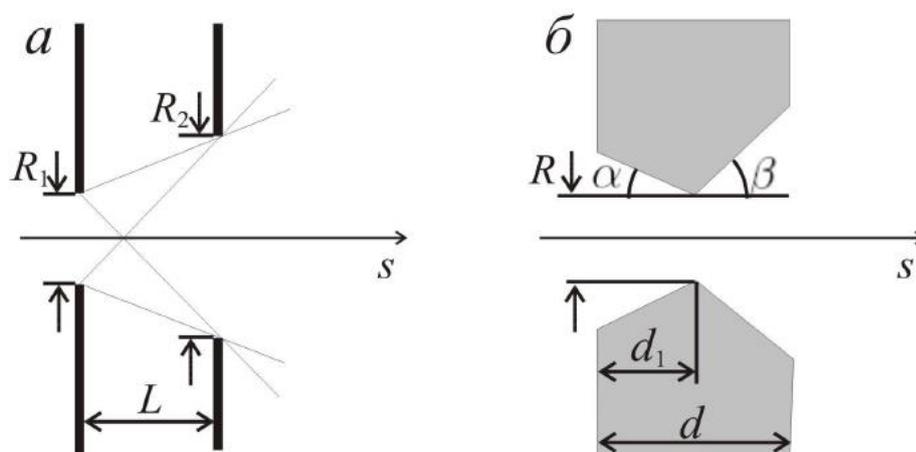


Рис. 1.2 Примеры конфигурации диафрагм

После прохождения свободного расстояния за диафрагмами, пучок частиц попадает в систему фокусировки – объектив. Главными составляющими элементами объектива являются фокусирующие квадрупольные линзы (квадрупольи). Количество линз может варьироваться в зависимости от типа установки. Наиболее распространены конфигурации в виде дуплетов (см. рис. 1.3) [42], квадруплетов [2, 20] и квинтуплетов [38].

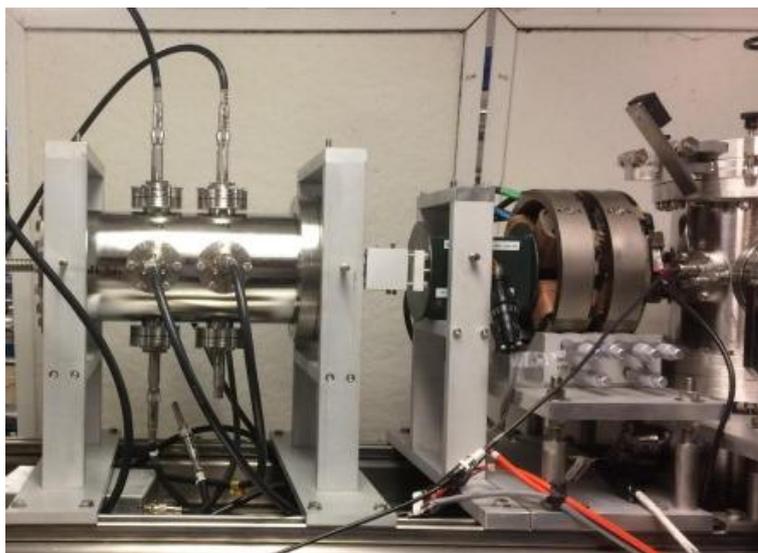


Рис. 1.3 Дуплет микронзонда Института Северного Техаса [42]

### **1.3 Управляющие параметры**

Сложность конструкции ЗФС влечет за собой большое количество управляющих параметров, каждый из которых оказывает свое влияние на результат работы устройства. Расстояния между всеми элементами, их наклоны и длины, а также магнитные поля линз выступают в роли главных управляющих параметров.

На практике часто возникают всевозможные отклонения данных параметров от требуемых значений. Малейшие неточности в изготовлении или установке элементов конструкции ЗФС оказывают колоссальное влияние на результат работы устройства. В качестве примера на рисунке 1.4 приведены некоторые из возможных отклонений положений линз от оптимальных.

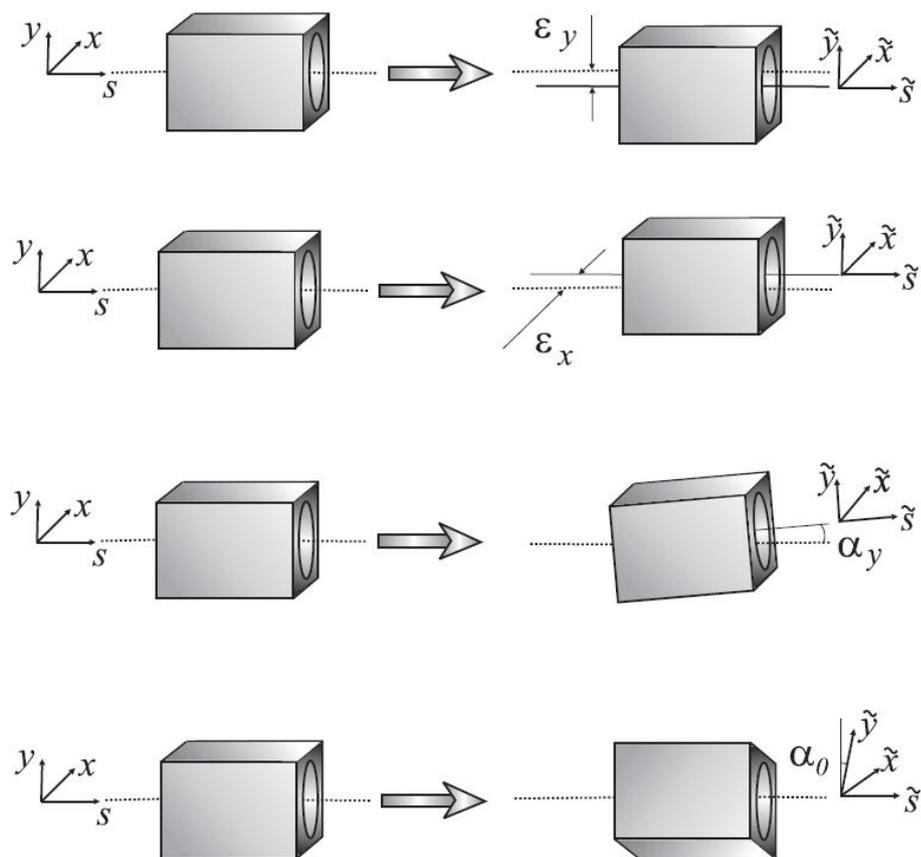


Рис. 1.4 Некоторые из видов отклонений линз

Многопараметричность существенно увеличивает объем и сложность вычислений в процессе моделирования работы ЗФС. Классические подходы пошагового интегрирования работают слишком долго и теоретически могут накапливать ошибку, не входящую в рамки требуемой точности вычислений [1]. Параллельное применение иного метода моделирования может помочь исследователю проверить точность результатов и подтвердить их правильность.

## 1.4 Физическая модель зондоформирующей системы

Главными регулируемыми управляющими параметрами в ЗФС являются электромагнитные поля квадрупольных линз (см. рис. 1.5). Каждая

линза имеет несколько полюсов с обмотками, по которым протекает ток. Изменение силы тока в обмотке позволяет менять величину поля линзы.

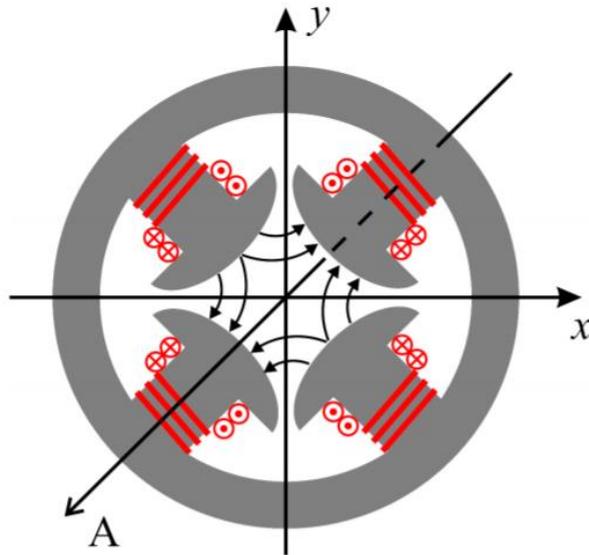


Рис. 1.5 Схема магнитной квадрупольной линзы

*Управляющее поле* – формируемое обмоткой и формой линз поле, отвечающее за управление эволюцией пучка в момент его прохождения через линзу.

При создании реальных фокусирующих установок знания только геометрической длины линз недостаточно. В связи с этим вводится понятие эффективной длины линзы.

*Эффективная длина* – параметр линзы, определяемый формулой

$$L_{eff} = \int_{s_{in}}^{s_{out}} z(s) ds,$$

где  $s_{out}$ ,  $s_{in}$  являются конечным и начальным значениями  $s$  вдоль электрической оси с нулевым управляющим полем, а  $z(s)$  – нормированная на единицу функция распределения поля [26].

Система дифференциальных уравнений Максвелла задает управляющее магнитное поле [17]:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\mathbf{D} &= 4\pi\rho, & \operatorname{div}\mathbf{B} &= 0, \\ \operatorname{rot}\mathbf{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}, & \operatorname{rot}\mathbf{H} &= \frac{1}{c}\left(\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{J}\right), \\ \mathbf{D} &= \varepsilon\mathbf{E}, & \mathbf{B} &= \mu\mathbf{H}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Специфика рассматриваемой задачи позволяет использовать представление управляющих полей в виде мультипольных элементов [26]. Данные элементы в компонентах вектора магнитной индукции (или векторного потенциала) содержат только «наинизшие» члены разложения, допускаемые симметрией. В качестве примера приводится разложение для квадрупольной линзы [1]:

$$\begin{aligned} A_x &= 0, A_y = 0, A_s = \frac{1}{2}g(y^2 - x^2), g = a_{1,1}, \\ B_x &= g(s)y, B_y = g(s)x, B_s = 0. \end{aligned}$$

Следует отметить, что влияние на динамику пучка могут оказывать так называемые краевые поля, изучаемые, например, в работах [7, 22, 30], однако в рамках данного исследования их влияние не учитывается.

Уравнение Ньютона-Лоренца описывает движение заряженных частиц в электромагнитных полях [10]:

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{R}}{dt}, \frac{d(m\mathbf{v})}{dt} = q(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]),$$

где  $\mathbf{R}$  – радиус-вектор частицы,  $q$  – заряд частицы,  $m$  – масса частицы,  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{E}$  – векторы магнитной индукции и напряженности электрического поля соответственно.

После проведения перехода к безразмерному виду и криволинейной системе координат, можно выписать новые уравнения движения с учетом прямолинейности оптической оси системы [25]:

$$x'' = \frac{1}{c\gamma\beta} (1 + x'^2 + y'^2)^{\frac{1}{2}} (x'y'B_x - (1 + x'^2)B_y + y'B_s),$$

$$y'' = \frac{1}{c\gamma\beta} (1 + x'^2 + y'^2)^{\frac{1}{2}} (-(1 + y'^2)B_x - x'y'B_y + x'B_s).$$

## 1.5 Заключение к Главе 1

В данной главе было рассмотрено устройство зондоформирующих систем, описаны проблемы, возникающие при моделировании и эксплуатации подобных установок. Была описана физическая модель ЗФС: в наиболее удобной форме выписаны уравнения движения частицы в электромагнитном поле, даны характеристики управления для электромагнитных полей линз.

## Глава 2. Математическая модель микронзонда

В данной главе вводится линейная математическая модель зондоформирующей системы. Также приводятся определения и основные понятия теории искусственных нейронных сетей, рассматриваются их разновидности и классификации. В главе показан способ построения полиномиальной нейронной сети для моделирования динамических систем.

### 2.1 Линейная модель зондоформирующей системы

Как отмечалось ранее, на первом этапе необходимо построение линейной модели динамической системы.

Отдельное место среди всех разновидностей ЗФС занимает так называемый «русский квадруплет» (см. рис. 2.1), в состав которого входят четыре квадрупольные линзы [2]. В данном устройстве на выходе формируется пучок высокой степени сжатия. В подобных установках для круглых диафрагм на выходе получается круглый портрет пучка. Реализация данного свойства возможна, учитывая условие симметричной подачи энергии:

$$r(s) = -r(s_1 - s), s \in [s_0, s_1],$$

где  $s$  – параметр длины вдоль оптической оси системы,  $s_0, s_1$  – начало и окончание системы квадрупольных линз,  $r(s)$  – функция распределения градиента.

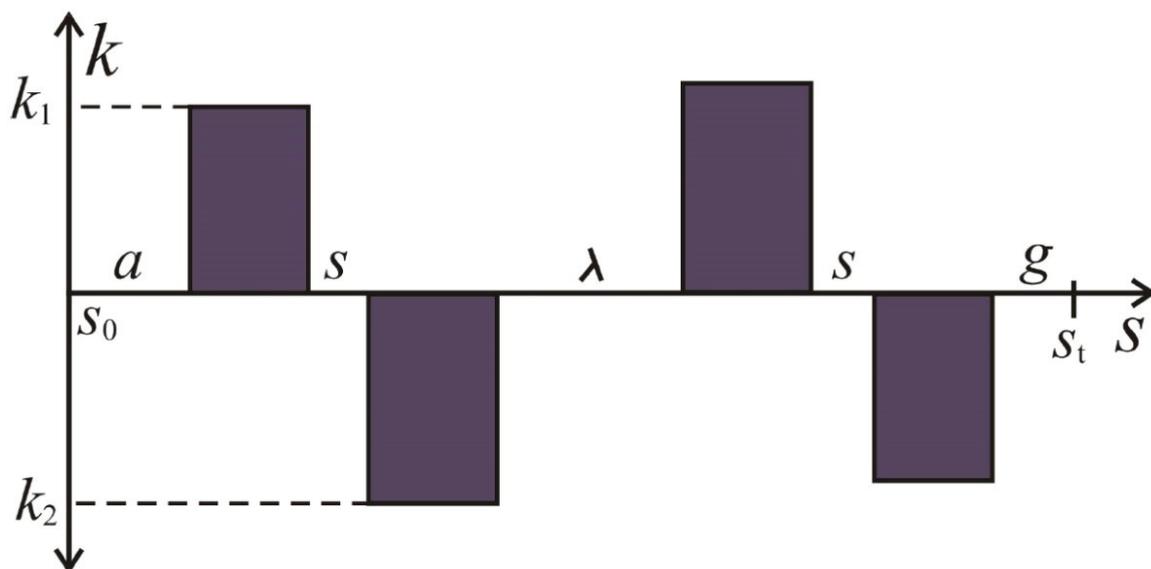


Рис. 2.1 Схема «русского квадруплета»

После проведения разложения исходных уравнений в ряд с отбрасыванием членов выше первого порядка, то есть линейной аппроксимации, уравнения движения принимают следующий вид [1]:

$$x'' + r(s)x = 0, \quad x' = \frac{dx}{ds},$$

$$y'' - r(s)y = 0, \quad y' = \frac{dy}{ds}.$$

Согласно теории линейных дифференциальных уравнений данная система имеет решение, которое может быть записано как

$$\mathbf{X}(s) = \mathbb{M}(s|s_0)\mathbf{X}_0, \quad \mathbf{X}_0 = \mathbf{X}(s_0).$$

Матрица  $\mathbb{M}(s|s_0)$  допускает представление вида

$$\mathbb{M}(s|s_0) = \mathbb{M}_g \mathbb{R}(s_1|s_0) \mathbb{M}_a,$$

где  $\mathbb{M}_g$  – матрица, соответствующая прохождению пучком расстояния от объектива до мишени,  $\mathbb{R}(s_1|s_0)$  – матрица фокусирующей системы, а также  $\mathbb{M}_a$  – матрица «предрасстояния» (путь от диафрагм до объектива).

Идентичность матриц перевода в плоскостях  $\{x, x'\}, \{y, y'\}$  достигается выполнением условия [27]:

$$r_{11} = r_{22},$$

где  $r, r_{22}$  — элементы матрицы  $\mathbb{R}(s_1|s_0)$ .

## 2.2 Основные понятия искусственных нейронных сетей

*Искусственная нейронная сеть (ИНС)* – совокупность нейроподобных элементов, определенным образом соединенных друг с другом и внешней средой с помощью связей, которые определяются весовыми коэффициентами [18].

Вычислительные устройства не способны решать многие задачи (например, распознавания) с такой скоростью, как человеческий мозг. В связи с этим в середине прошлого века начались попытки смоделировать его работу в виде математических моделей.

Искусственный нейрон состоит из аналогов частей биологического. Выделяют три основных составляющих нейрона (см. рис 2.2):

- 1) синапсы;
- 2) сумматор;
- 3) нелинейный преобразователь (функция активации).

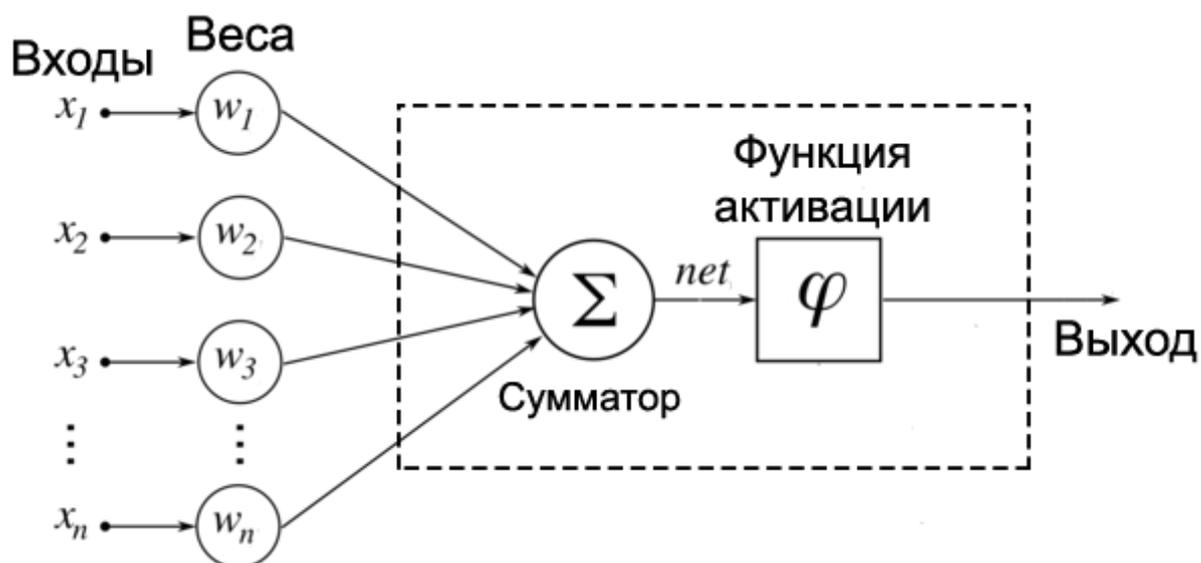


Рис 2.2 Схема искусственного нейрона

Функцией *синапсов* является обеспечение связи между нейронами. Синапсы умножают входной сигнал на определенное число (вес), определяющее силу связи. В дальнейшем сигналы с синапсов, полученные от нейронов сети или иных внешних источников, передаются в *сумматор*, где производится сложение их значений. Данная сумма поступает в *нелинейный преобразователь* в качестве аргумента функции активации. Существует множество вариантов функции активации, однако наиболее распространенной является сигмоидальная функция вида

$$f(s) = \frac{1}{1 + e^{-as}}$$

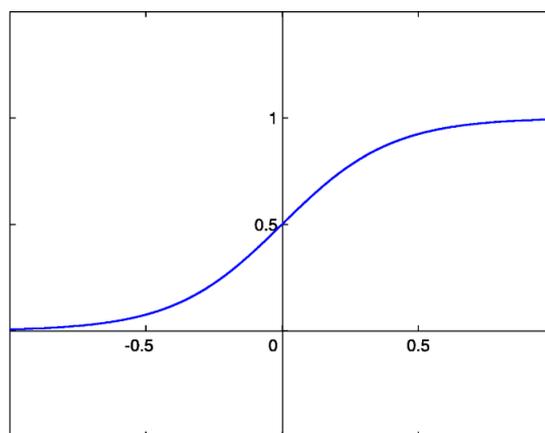


Рис 2.3 График сигмоидальной функции

Как можно заметить по графику (см. рис 2.3), данная функция всегда обеспечивает для нейрона выходное значение в интервале (0, 1), а также обладает полезным свойством усиления слабых сигналов, что позволяет избежать перенасыщения от сильных сигналов [18].

## 2.3 Классификация нейронных сетей

Классификацию нейронных сетей возможно осуществлять сразу по нескольким признакам. На рисунке 2.4 представлены виды ИНС, определяемые связями нейронов, а также сети, различные по характеру обучения.

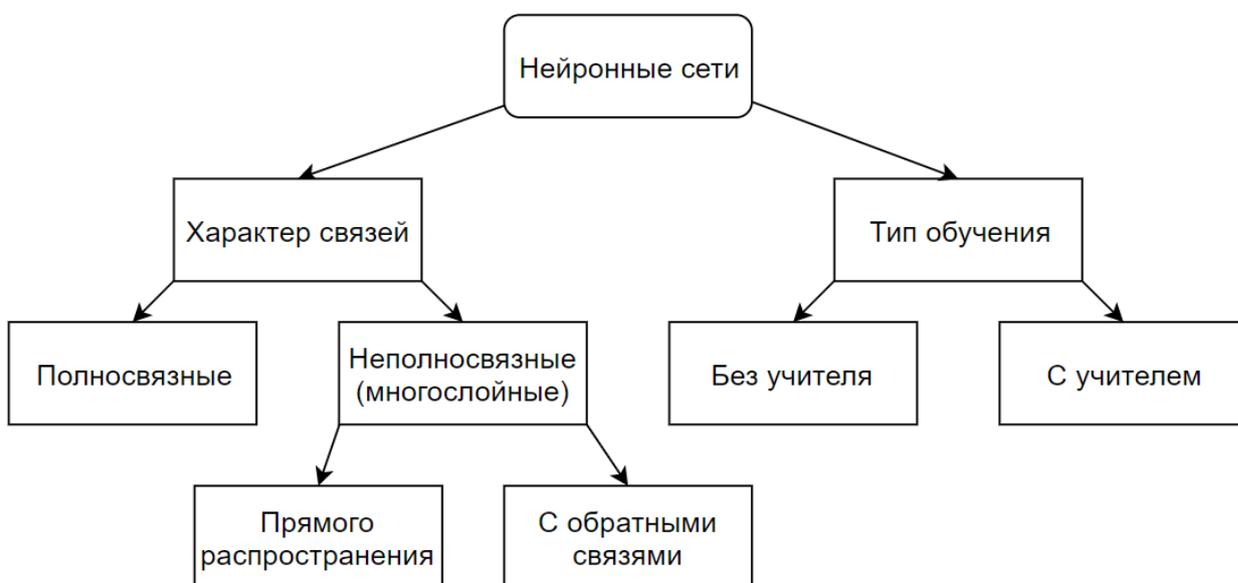


Рис 2.4 Классификация нейронных сетей

В первую очередь рассматривается классификация ИНС по характеру связи нейронов. Отличительной особенностью *полносвязных* нейронных сетей является то, что в них каждый нейрон передает выходной сигнал всем нейронам сети, включая себя. Подобные сети нашли широкое применение при решении задач распознавания образов в качестве слоев большей сети [46, 47, 48]. *Неполносвязные (многослойные)* сети чаще всего состоят из

определенного числа слоев. В слое объединяются нейроны с общими входными и выходными сигналами. В многослойной ИНС (см. рис. 2.5) может присутствовать любое количество скрытых слоев, расположенных между входом и выходом сети. В качестве подкатегорий многослойных сетей выделяются сети прямого распространения и сети с обратными связями. При *прямом распространении* входной сигнал по порядку проходит от слоя к слою, претерпевая преобразования. Наличие *обратных связей* позволяет передавать информацию на предыдущие слои. Подобные связи используются, например, в известном методе обратного распространения ошибки [9].

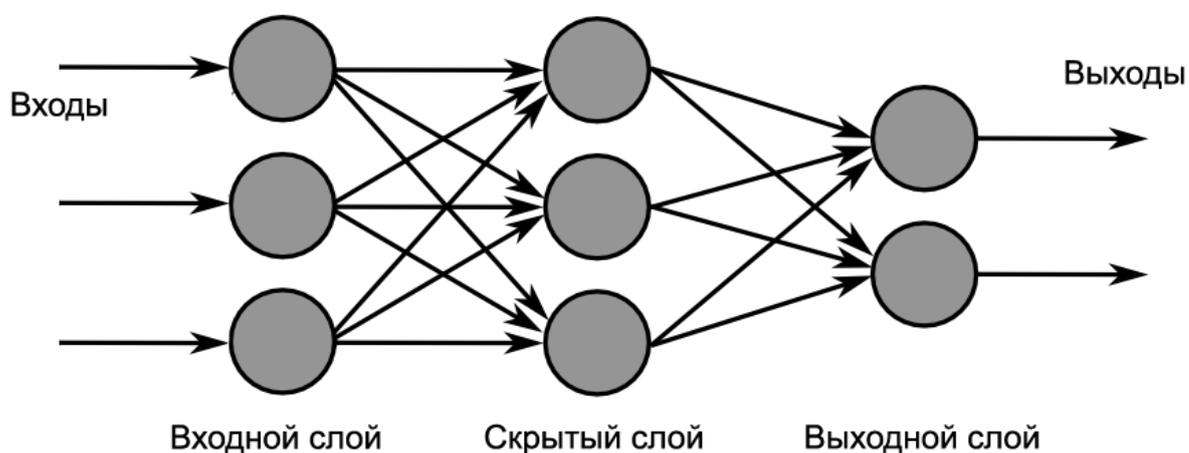


Рис. 2.5 Схема многослойной нейронной сети

Под обучением нейронной сети понимается процесс коррекции параметров сети на основе подачи сигналов из внешней среды для получения требуемых результатов на всех объектах исследуемого множества. *Обучение с учителем* предусматривает наличия известных примеров типа «стимул-реакция», после обучения на которых ИНС должна принять состояние, позволяющее с достаточной точностью прогнозировать результат для иных входных стимулов [24]. При *обучении без учителя* нейронная сеть сразу обучается выполнять задачу для данных с заранее неизвестными верными результатами. Подобный подход может быть применен только в задачах с

заданным описанием множеств объектов, для которых необходимо установить внутренние связи между элементами. В качестве известной модели нейронной сети, использующей обучение без учителя, можно отметить самоорганизующуюся карту Кохонена, решающую задачу кластеризации [39].

## 2.4 Глубокие нейронные сети

Активное развитие искусственного интеллекта и методов машинного обучения привело к появлению особой совокупности методов *глубокого обучения* (см. рис. 2.6), основанной на обучении представлениям, а не конкретным алгоритмам для частных задач [45].



Рисунок 2.6 Глубокое обучение как раздел искусственного интеллекта

Добиться подобных возможностей позволяют *глубокие нейронные сети*, включающие между входными и выходными слоями несколько скрытых. Подобные сети находят метод математического преобразования для превращения входных данных в выходные. Каждый слой глубокой нейронной

сети может быть интерпретирован как часть искомого преобразования. Главная особенность данной архитектуры ИНС заключается в том, что за счет многослойности открывается возможность учета нелинейностей отображения [29, 35]. Для динамических систем, рассматриваемых в данной работе, изучение влияния нелинейных управляющих параметров несет особую важность и ценность.

## 2.5 Полиномиальная нейронная сеть

В рассмотрение берется обширный класс динамических систем, включающий в себя и ИОС, который описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dX}{dt} = F(t, X), \quad (2.1)$$

где  $t$  – независимая переменная,  $X \in R^n$  – вектор состояния системы. Функция  $F$  разложима в ряд Тейлора относительно вектора  $X$ .

Динамика вектора состояния  $X$  может быть представлена в форме преобразования Ли [1]:

$$\mathcal{M}(t|t_0) = Texp\left(\int_{t_0}^t \mathcal{L}_F(\tau) d\tau\right),$$

где  $\mathcal{L}_F(\tau)$  – оператор Ли [33], связанный с вектор-функцией  $F$ ,  $\mathcal{M}$  – хронологически упорядочен. Предполагая, что  $F$  в (2.1) представляется в виде степенного ряда

$$F = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(t) X^{[k]},$$

искомое решение также может быть представлено в виде полиномиального преобразования в области своей сходимости:

$$X(t) = \mathcal{M}(t) \circ X_0 = \sum_{k=0}^{\infty} R_k(t) X_0^{[k]}, \quad (2.2)$$

где  $X^{[k]}$  является  $k$ -ая кронекеровской (см. в [8]) степенью вектора  $X$ . Способы вычисления матриц  $R_k(t)$  показаны в книге [1]. Основная идея заключается в замене системы (2.1) системой

$$R'_{ik}(t|t_0) = \sum_{j=1}^k P_{ij}(t) R_{jk}(t|t_0), \quad 1 \leq i < k,$$

где  $P_{ij} = P_{1(j-i+1)} P_{(i-1)(j-1)}$ ,  $P_{1k} = P_k$ ,  $R_{1k} = R_k$ .

Также коэффициенты матриц ( $W_k = R_k$ ) выражения

$$X(t) = W_0(t) + W_1(t)X_0 + W_2(t)X_0^{[2]} + \dots + W_k(t)X_0^{[k]}$$

возможно получить дифференцированием по времени относительно (2.2):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} X &= \frac{d}{dt} W_0(t) + \dots + \frac{d}{dt} W_k(t) X_0^{[k]}, \\ \frac{d}{dt} X &= P_0(t) + P_1(t)X + P_2(t)X^{[2]} + \dots + P_p(t)X^{[p]} = P_0(t) + \\ &P_1(t) \left( W_0(t) + W_1(t)X_0 + W_2(t)X_0^{[2]} + \dots + W_k(t)X_0^{[k]} \right) + \\ &P_2(t) \left( W_0(t) + W_1(t)X_0 + W_2(t)X_0^{[2]} + \dots + W_k(t)X_0^{[k]} \right)^{[2]} + \\ &\dots + \\ &P_p(t) \left( W_0(t) + W_1(t)X_0 + W_2(t)X_0^{[2]} + \dots + W_k(t)X_0^{[k]} \right)^{[p]}, \end{aligned}$$

откуда следует новая система дифференциальных уравнений относительно весовых матриц  $W_k$ :

$$\frac{d}{dt} W_k(t) = \sum_{i=1}^p P_i(t) \frac{\partial X^{[i]}}{\partial (X_0^{[i]})^T}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Так как правые части уравнений данной системы зависят только от  $W_i$ , возможно провести численное интегрирование с начальными условиями  $W_k(0) = 0, k \neq 1; W_1(0) = E$  на требуемом временном промежутке.

Возможно построить нейронную сеть, реализующую преобразование  $\mathcal{M}: X \rightarrow Y$  для необходимого порядка нелинейности  $k$  [37]:

$$Y = W_0 + W_1X + W_2X^{[2]} + \dots + W_kX^{[k]}$$

где  $X \in R, Y \in R^m, W_i$  – матрицы весовых коэффициентов соответствующих размерностей.

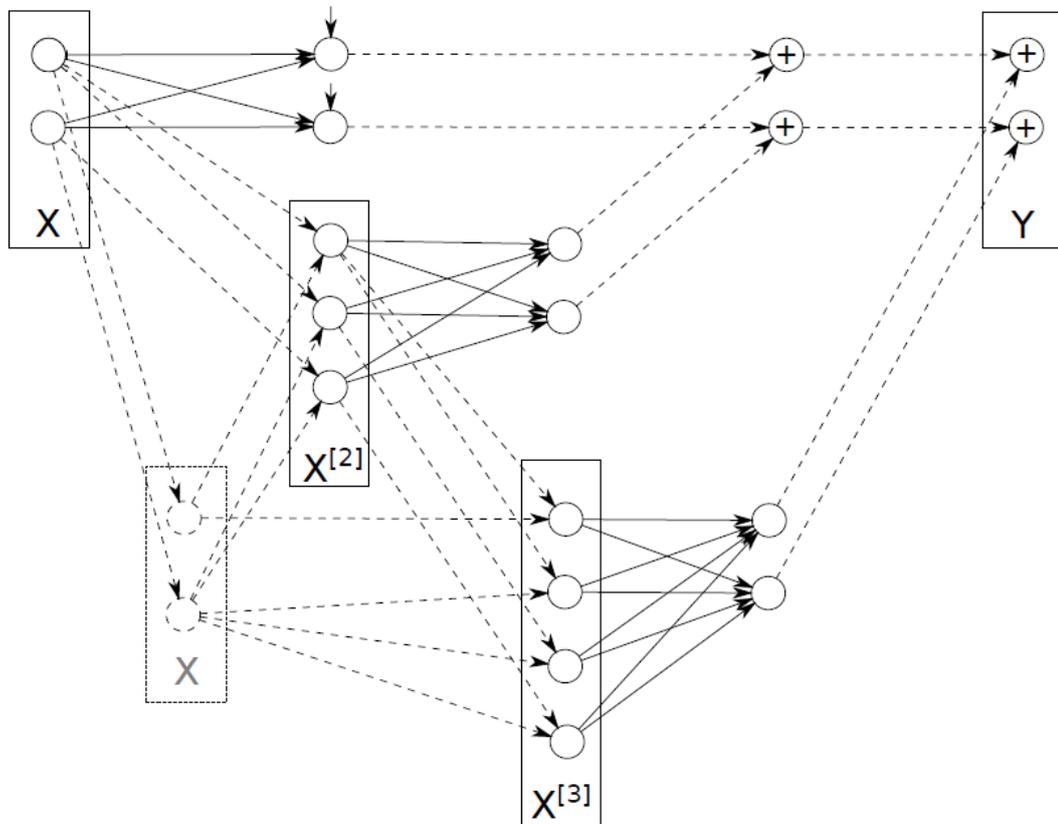


Рис. 2.7 Архитектура нейронной сети

На рисунке 2.7 представлена архитектура нейронной сети, описывающая преобразование (2.2) вектора размера два для третьего порядка нелинейности. На каждом слое исходный вектор  $X = (x_1, x_2)$  последовательно трансформируется в  $X^{[2]} = (x_1^2, x_1, x_2, x_2^2)$  и  $X^{[3]} = (x_1^3, x_1^2, x_2, x_1, x_2^2, x_2^3)$  после

чего высчитывается взвешенная сумма.  $\mathcal{M}$  является аппроксимацией оператора эволюции (2.1) для заданных  $t_0, \Delta t$ . Следовательно, с правильно подобранными весами  $W_i = W_i(t_0, \Delta t)$  изменение начального вектора  $X_0 = X(t_0)$  за промежуток  $\Delta t$  может быть приблизительно посчитано как  $Y = X(t_0, X_0, \Delta t) = \mathcal{M} \circ X_0$ . В случае если (2.1) не зависит от времени, веса  $W_i$  неизменяемы для заранее заданного интервала  $\Delta t$ . В данном варианте на каждом шаге к вектору применяется одно и тоже преобразование  $\mathcal{M}$ .

## 2.6 Заключение к Главе 2

В Главе 2 было произведено построение линейной математической модели зондоформирующей системы. Приведены основные понятия и определения, относящиеся к искусственным нейронным сетям, продемонстрированы методы их классификации с указанием области применимости каждой разновидности сети. В данной главе показана архитектура полиномиальной нейронной сети, позволяющей производить математическое моделирование динамических систем.

## Глава 3. Программная реализация

В главе осуществлен обзор существующих библиотек для программной реализации нейронных сетей. Предлагается метод моделирования зондоформирующих систем с применением ИНС, а также разрабатывается программное обеспечение для реализации выбранного метода. В данной главе описывается пользовательский интерфейс приложения. Для подтверждения применимости предлагаемого метода проводятся численные эксперименты.

### 3.1 Обзор существующих решений для создания искусственных нейронных сетей

Широкое распространение и популяризация ИНС привели к появлению множества средств для создания и работы с нейронными сетями. В работе рассмотрены некоторые наиболее используемые и зарекомендовавшие себя фреймворки глубокого обучения.

- 1) TensorFlow – библиотека, написанная на Python и C++ компанией Google. В настоящее время имеет статус открытой. К фреймворку имеется большое количество обучающих и справочных материалов. Возможность низкоуровневой настройки работы элементов является преимуществом для опытных разработчиков, однако усложняет возможности создания ИНС начинающими [15].
- 2) PyTorch – библиотека языка Python, отличающаяся наличием множества предварительно обученных моделей и готовых элементов, созданных для комбинирования разработчиком в процессе работы [13].
- 3) Keras – самая высокоуровневая из рассмотренных библиотек, написанная на Python. Фреймворк обладает широкими возможностями для обучения и создания нейронных сетей, в то же время отличаясь прозрачностью и

понятностью происходящих процессов. Является высокоуровневой надстройкой над TensorFlow [12].

- 4) DeepLearning4j – фреймворк для языка Java, в основном служащий для распределенной и параллельной обработки большого количества данных на графических процессорах [11].

### 3.2 Применение искусственной нейронной сети для моделирования зондоформирующих систем

В работе представлен метод применения искусственных нейронных сетей для моделирования зондоформирующих систем. Ввиду того, что ЗФС представляет из себя сложную систему, состоящую из определенного числа управляющих элементов, каждому элементу можно сопоставить нейронную сеть, описанную в пункте 2.5 Главы 2. На рисунке 3.1 схематично представлена общая архитектура получаемой глубокой нейронной сети. Зондоформирующая система моделируется в виде сети, состоящей из последовательной комбинации сетей, отвечающих за управляющие элементы. Таким образом, моделирование движения пучка частиц через установку осуществляется посредством последовательного применения к его вектору состояния требуемых отображений.

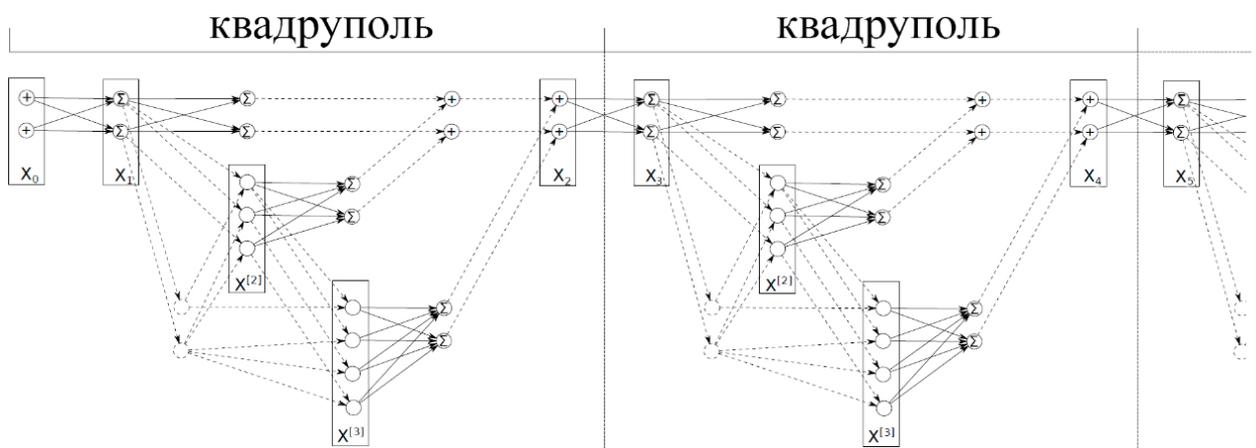


Рис. 3.1 Сопоставление линзам нейронных сетей

Данный подход к моделированию несет в себе сразу несколько преимуществ. В качестве первого отметим факт того, что использование пошаговых отображений вместо численных методов интегрирования (например, методов Рунге-Кутты) не требует повторного вычисления всех коэффициентов при изменениях в модели. Данный факт также ведет к уменьшению величины накапливаемой ошибки. Вторым преимуществом является естественная возможность учета неопределенностей за счет нейросетевой архитектуры. Слои, представляющие ошибки поля или измерений, могут добавляться в уже существующую сеть, что является очень удобным и важным свойством при моделировании реальных устройств.

В качестве библиотеки для реализации программы, проверяющей применимость предложенного метода, был выбран фреймворк Keras [12]. Использование данной библиотеки позволит совместить в себе широкие возможности TensorFlow и простоту Keras, делая данные возможности более доступными для разработчика.

### **3.3 Пользовательский интерфейс приложения**

Для повышения доступности и простоты использования программы с помощью библиотеки PyQt [14] был разработан пользовательский интерфейс. Окно приложения состоит из нескольких полей, в которые пользователь вводит необходимые для проведения вычислений данные. Перед проведением вычислений необходимо по конкретным данным управляющих параметров построить модель для выбранного типа системы. На этапе построения модели создается нейронная сеть, описывающая заданную систему. С помощью математического аппарата пункта 2.5 Главы 2 определяются веса нейронов сетей, отвечающих управляющим элементам. После построения модели исследователь может приступить к численному моделированию и проведению экспериментов с управляющими параметрами.

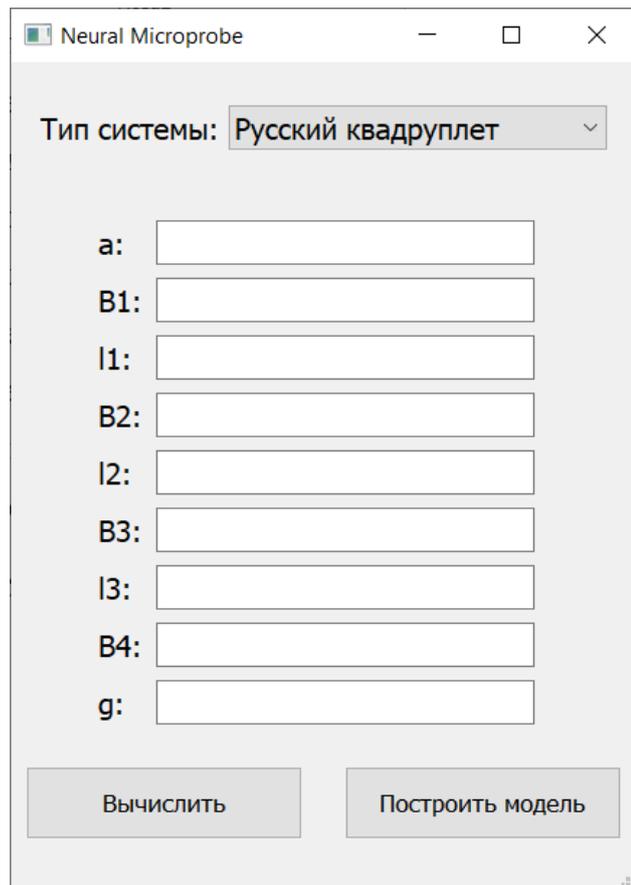


Рис. 3.2 Пользовательский интерфейс приложения Neural Microprobe

На рисунке 3.2 показан скриншот главного окна созданного приложения. В верхней части интерфейса расположено меню, в котором можно выбрать тип ионно-оптической системы. Середина окна состоит из определенного количества полей для ввода числовых значений параметров системы. Функция «Построить модель» инициирует построение глубокой нейронной сети, моделирующей заданную систему. Кнопка «Вычислить» отвечает за вычисление степени сжатия пучка на мишени. Во время проведения экспериментов при изменении каких-либо данных управляющих параметров уже построенной модели перестроение сети производится только для затронутых элементов.

### 3.4 Вычислительный эксперимент

Проведение вычислительного эксперимента позволит проверить возможности разработанного программного обеспечения. В качестве примера приводится моделирование рассмотренного ранее «русского квадруплета». Управляющими параметрами для подобных систем являются следующие показатели: расстояние от диафрагм до объектива (предрасстояние), расстояния между линзами, величина поля для каждой линзы, а также расстояние от фокусирующей системы до мишени (рабочее расстояние).

Для проведения эксперимента были взяты реальные параметры (см. табл. 3.1) зондоформирующей системы ИПФ НАНУ [16]. В качестве особенности данной ЗФС отметим то, что фокусирующая система состоит из двух дуплетов линз, вместе образующих квадруплет. Данный набор управляющих параметров позволяет добиться микронных размеров портрета пучка на мишени при коэффициенте уменьшения 108.

Таблица 3.1 Характеристики ЗФС ИПФ НАНУ

|                                       |           |
|---------------------------------------|-----------|
| Предрасстояние $a$                    | 40 см     |
| Расстояние между дуплетами $l_2$      | 50 см     |
| Расстояние внутри дуплетов $l_1, l_3$ | 3 см      |
| Поле линзы $B_1$                      | 0.294 Тл  |
| Поле линзы $B_2$                      | -0.225 Тл |
| Поле линзы $B_3$                      | 0.225 Тл  |
| Поле линзы $B_4$                      | -0.294 Тл |
| Рабочее расстояние $g$                | 10 см     |
| Коэффициент уменьшения пучка          | 108       |

После внесения исходных данных из таблицы 3.1 в программу производится построение модели системы (см. рис. 3.3).

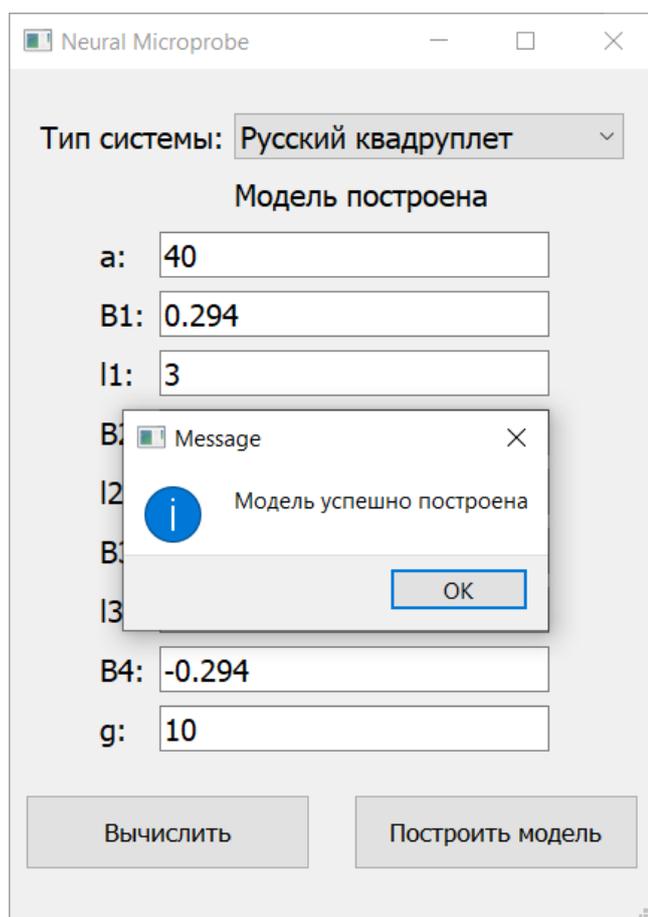


Рис. 3.3 Построение модели системы

Имея готовую модель, можно приступить к численному моделированию работы устройства. Сначала проверяются возможности программы по вычислению коэффициента сжатия пучка. Для рассматриваемых данных получился результат, представленный на рисунке 3.4.

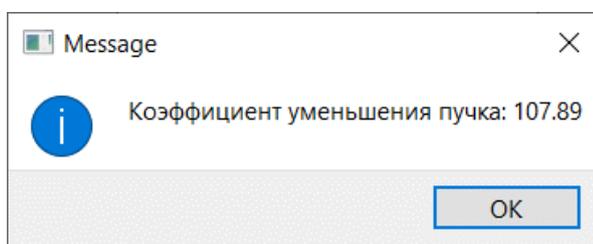


Рис. 3.4 Вычисление коэффициента уменьшения пучка

Далее проверяется одно из главных преимуществ предлагаемого подхода. При внесении каких-либо изменений в управляющие параметры пересчитываются только те коэффициенты, на которые они непосредственно влияют. Данное свойство позволяет избежать накопления ошибки и ускорить вычисления при работе с большими системами. В качестве примера изменяется величина магнитного поля линзы  $B_4$ . После подобных отклонений не возникает необходимости строить полностью новую модель, достаточно пересчитать только веса нейронов части сети, отвечающей за четвертую линзу.

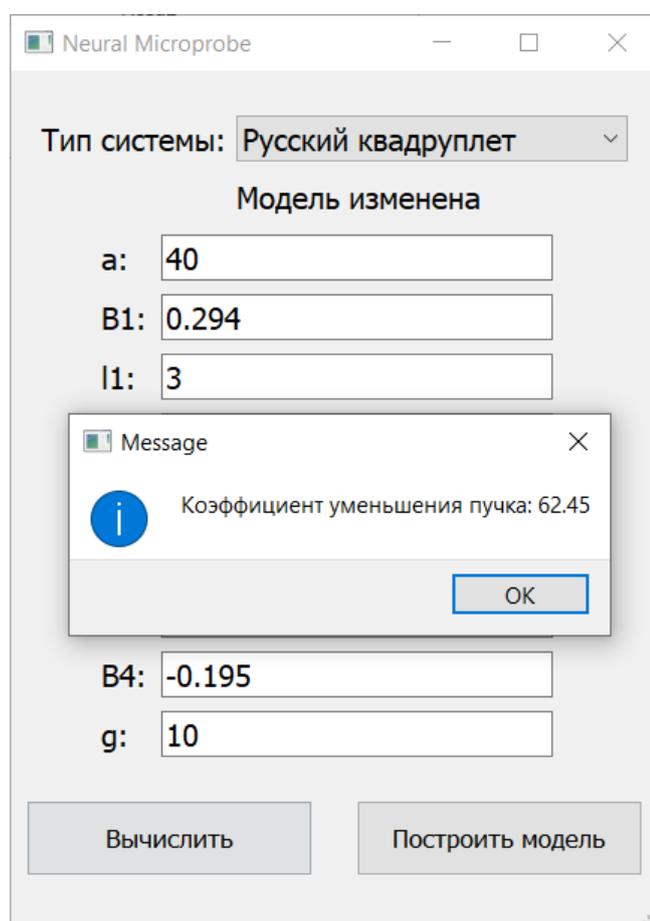


Рис. 3.5 Изменение управляющего параметра

На рисунке 3.5 представлен результат вычислений при изменении управляющего параметра. Существенное изменение коэффициента сжатия пучка говорит о необходимости точного учета влияния всех управляющих

параметров при моделировании таких прецизионных устройств как зондоформирующие системы.

### **3.5 Заключение к Главе 3**

В главе было произведено рассмотрение актуальных на сегодняшний день библиотек для создания искусственных нейронных сетей. На основе отмеченных особенностей каждой из библиотек для создания программного обеспечения был выбран фреймворк Keras. Был предложен метод моделирования сложных динамических систем, создающий модель в виде глубокой нейронной сети, состоящей из комбинации частей, отвечающих за каждый управляющий элемент системы. В данной главе был продемонстрирован пользовательский интерфейс разработанного приложения Neural Microprobe, посредством которого для подтверждения корректности выбранного подхода был произведен вычислительный эксперимент.

## Заключение

В данной работе на примере таких динамических систем, как системы фокусировки пучка частиц, были исследованы и описаны проблемы, возникающие в процессах моделирования, проектирования и использования подобных систем. Был проведен обзор литературы, касающейся искусственных нейронных сетей, отмечены их основные понятия, особенности построения и применения. В работе был предложен способ моделирования зондоформирующих систем с помощью нейронных сетей. Для проверки корректности предложенного метода было разработано специальное программное обеспечение. При помощи созданной программы на реальных данных были проведены вычислительные эксперименты, которые доказали применимость искусственных нейронных сетей для математического и компьютерного моделирования зондоформирующих систем.

В качестве перспектив для развития представленной работы можно отметить возможность исследования особенностей применения рассматриваемого подхода для моделирования иных динамических систем. Изучение точности и устойчивости предлагаемого метода могут позволить усовершенствовать используемую математическую модель. Рассмотренные нейронные сети могут также быть использованы для решения задач, возникающих при идентификации динамических систем. Расширение средств визуализации и ввода данных является перспективой развития программной части. Приложение может быть дополнено соответствующими модулями для решения других задач физики ускорителей заряженных частиц.

## Список литературы

- [1] Андрианов С.Н. Динамическое моделирование систем управления пучками частиц. СПбГУ. 2002. 376 с.
- [2] Андрианов С.Н., Дымников А.Д., Осетинский Г.М. Система формирования протонных пучков микронных размеров. // Приборы и техника эксперимента. 1982. Том. 1. с. 39-42.
- [3] Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. Теория колебаний. — 2-е изд., перераб. и испр.. — М.: Наука, 1981. — 918 с.
- [4] Дымников А.Д., Явор С.Я. // ЖТФ. 1963. Т. 33. В. 7. С. 851.
- [5] Ефимов И. Н., Морозов Е. А., Селиванов К. М. Компьютерное моделирование динамических систем //Ижевск: Институт компьютерных исследований. – 2014. – С. 134.
- [6] Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б., Подлазов А. В. Нелинейная динамика: подходы, результаты, надежды. — М.: УРСС, 2006.
- [7] Мартиросян Ю. Л. Исследование эффектов краевых магнитных полей в накопительных кольцах // ЖТФ. 2003. Т. 73. В.10.
- [8] Беллман Р. Введение в теорию матриц. Москва. 1976. 351с.
- [9] Галушкин А. И. Синтез многослойных систем распознавания образов. — М.: «Энергия», 1974.
- [10] Джексон Дж. Классическая электродинамика. Перевод с английского Г. В. Воскресенского и Л. С. Соловьева. Под редакцией Э. Л. Бурштейна. Изд «Мир» Москва 1965. - 703 с.
- [11] Домашняя страница проекта DeepLearning4j // Deep Learning for Java. — Режим доступа: <https://deeplearning4j.org/> (дата обращения: 22.04.2020).
- [12] Домашняя страница проекта Keras // Keras: the Python deep learning API. — Режим доступа: <https://keras.io/> (дата обращения: 22.04.2020).
- [13] Домашняя страница проекта PyTorch // From Research to Production. — Режим доступа: <https://pytorch.org/> (дата обращения: 22.04.2020).

- [14] Домашняя страница проекта PyQt // Riverbank Computing. — Режим доступа: <https://riverbankcomputing.com/software/pyqt/intro> (дата обращения: 22.04.2020).
- [15] Домашняя страница проекта TensorFlow // An end-to-end open source machine learning platform. — Режим доступа: <https://www.tensorflow.org/> (дата обращения: 22.04.2020).
- [16] Игнатъев И. Г. и др. Оптимизация электростатической системы ионного микрозонда // Ядерна фізика та енергетика. 2012. Т. 13. № 1. С. 97-100.
- [17] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. — Издание 7-е, исправленное. — М.: Наука, 1988.
- [18] Круглов В. В., Борисов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. — М.: Горячая линия - Телеком, 2001. — 382 с.
- [19] Романенко А.В. Формирование ионного микропучка для исследования радиационно-стимулированной миграции примеси в твердом теле. Сумы. 2016.
- [20] Романенко А.В., Пономарев А.Г. Влияние гистерезиса магнитных квадрупольных линз на процесс фокусировки пучка при изменении его энергии в ядерном сканирующем микрозонде // Письма в журнал технической физики, 2013, том 39, выпуск 7, С. 1-8.
- [21] Смалюк В.В. Диагностика пучков заряженных частиц в ускорителях / Под ред. чл.-корр. РАН Н. С. Диканского. Новосибирск: Параллель, 2009. 294 с.
- [22] Терешонков Ю.В. Математическое моделирование зондоформирующих систем. СПбГУ. 2010. 152 с.
- [23] Тихонов А.В. Мультиагентные технологии анализа и оптимизации микро- и нанозондовых систем. СПбГУ. 2018. 42 с.
- [24] Уоссермен, Ф. Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика = Neural Computing. Theory and Practice. — М.: Мир, 1992. — 240 с.
- [25] Чернышев А.А. Моделирование и оптимизация систем транспортировки и фокусировки пучков частиц. СПбГУ. 2010. 149 с.

- [26] Штеффен К. Оптика пучков высокой энергии. — М.:Мир, 1969 — 223 с.
- [27] Andrianov S. Edamenko N., Chernyshev A. and Tereshonkov Yu. Synthesis of Optimal Nanoprobe (Linear Approximation), Proceedings of EPAC08, Genoa, Italy. 2008. P. 2125-2127.
- [28] Barapatre Nirav Application of Ion Beam Methods in Biomedical Research - Quantitative Microscopy with Trace Element Sensitivity. 2013.
- [29] Bengio Y. Learning deep architectures for AI // Foundations and trends® in Machine Learning, Vol. 2. 2009. P. 1-127.
- [30] Berz M., Erdelyi B., Makino K. Fringe field effects in small rings of large acceptance // Phys. Rew. St-Accelerators and Beams 2000. Vol. 3. N 124001. P. 1–11.
- [31] Chen T. Q. et al. Neural ordinary differential equations, Advances in neural information processing systems. 2018. P. 6571-6583.
- [32] Darryl J. Leiter. Van de Graaff, Robert Jemison A to Z of Physicists. 2003. P. 312.
- [33] Dragt, A. Lie Methods for Nonlinear Dynamics with Applications to Accelerator Physics. 2011.
- [34] Fang W. et al. A deep learning-based approach for mitigating falls from height with computer vision: Convolutional neural network, Advanced Engineering Informatics. Vol. 39. 2019. P. 170-177.
- [35] Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep learning. MIT press. 2016.
- [36] Ishaq Ahmad Introductory Chapter: Introduction to Ion Implantation, Ion Implantation. InTech. 2017.
- [37] Ivanov, A., Andrianov, S., Krushinevskii, E., Kulabukhova, N., Sboeva, E., & Sholokhova, A. Matrix representation of Lie transform in TensorFlow. In 9th Int. Particle Accelerator Conf.(IPAC'18). Vancouver, BC, Canada. 2018. P. 3438-3440.

- [38] Jamieson D.N., Rout B., Szymanski R. The new Melbourne nuclear microprobe system. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, Vol. 190, Issue 1-4, 2002. P. 54-59.
- [39] Kohonen T. *Self-Organizing Maps (Third Extended Edition)*, New York, 2001.
- [40] Majoros T., Ujvári B. Stability study of the neural network at particle physics detectors, *Carpathian Journal of Electronic and Computer Engineering*, Vol. 11. 2018. P. 48-52.
- [41] Mall S., Chakraverty S. Comparison of artificial neural network architecture in solving ordinary differential equations, *Advances in Artificial Neural Systems*, 2013.
- [42] Manuel J. E. et al. Design and construction of an electrostatic quadrupole doublet lens for nuclear microprobe application *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, Vol. 404. 2017. P. 21-28.
- [43] Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Multistep neural networks for data-driven discovery of nonlinear dynamical systems, *arXiv preprint arXiv:1801.01236*. 2018.
- [44] Ramírez I. et al. Convolutional neural networks for computer vision-based detection and recognition of dumpsters, *Neural Computing and Applications*, 2018, P. 1-9.
- [45] Schmidhuber, J. *Deep Learning in Neural Networks: An Overview // Neural Networks*. 61: 85–117. 2015.
- [46] Tara N Sainath, Brian Kingsbury, Vikas Sindhwani Low-rank matrix factorization for deep neural network training with high-dimensional output targets, *Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP), Conference on IEEE*. 2013. P. 6655–6659.
- [47] Wenlin Chen, James Wilson, Stephen Tyree Compressing neural networks with the hashing trick, *International Conference on Machine Learning*. 2015. P. 2285–2294.

- [48] Xue Jian, Li Jinyu, Gong Yifan Restructuring of deep neural network acoustic models with singular value decomposition. Interspeech. 2013. P. 2365–2369.