

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P11-84-866

В.В.Курышкин*, Л.А.Севастьянов*, А.Б.Швачка

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
КОРПУСКУЛЯРНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ

* Университет дружбы народов
им. Патриса Лумумбы, Москва

1984

Математическая модель экранирования корпускулярных потоков /1/

$$\iint A(\vec{\xi}, \vec{\eta}) X(\vec{\eta}, \vec{\xi}) d\vec{\eta} = Y(\vec{\xi})$$

связывает между собой три величины: функцию источника потока X , аппаратную функцию маски A и результирующую функцию эффектов экранирования Y . Ниже описаны алгоритмы отыскания всех трех входящих в модель величин. Задачи такого рода возникают при отыскании формы экранирующей маски, обеспечивающей создание элементов интегральной оптики заданного профиля /2/.

1. АЛГОРИТМ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ИСТОЧНИКА РАЗНОСТНЫМ МЕТОДОМ

В случае цилиндрической симметрии процесса при одновременной пространственной однородности эффективного распределения основное уравнение экранирования приводится к каноническому виду /1/:

$$\int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho = Y(\sigma). \quad /1/$$

Уравнение /1/ является интегральным уравнением первого рода /3/, следовательно, задача отыскания функции источника X по приближенно заданным A и Y является некорректной. Ее решение можно находить минимизацией тихоновского функционала или решением соответствующего уравнения Эйлера /1,3/. Для уравнения /1/ тихоновский функционал /1/ имеет вид:

$$M^{\alpha}[X] = \int_0^1 \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho - Y(\sigma) \right\}^2 d\sigma + \alpha \int_0^1 X^2(\rho) d\rho. \quad /2/$$

Уравнением Эйлера для задачи /2/ является интегродифференциальное уравнение /1/:

$$\int_0^1 A(\sigma, \rho) \left\{ \int_0^1 A(\sigma, r) X(r) dr - Y(\sigma) \right\} d\sigma + \alpha \left[q(\rho) X(\rho) - \frac{d}{d\rho} \left[p(\rho) \frac{dX}{d\rho}(\rho) \right] \right] = 0, \quad /3/$$

с граничными условиями /1/:

$$X(0) = 0, \quad X(1) = 0. \quad /4/$$

Задачу /1/, /2/ решаем с автоматическим выбором параметра регуляризации α методом, изложенным в /4/, т.е. отыскиваем точку равновесия по Нэшу /5/ пары функционалов:

$$M[X, \alpha] = \int_0^1 \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho - Y(\sigma) \}^2 d\sigma, \quad /5/$$

$$N[X, \alpha] = \int_0^1 \alpha^2(\rho) \{ q(\rho) X^2(\rho) + p(\rho) \left[\frac{dX}{d\rho}(\rho) \right]^2 \} d\rho. \quad /6/$$

Одним из наиболее эффективных методов решения задачи /5/, /6/ является /5/ итеративный поиск последовательности (X^k, α^k) , сходящейся к паре (X^*, α^*) , первая компонента которой X^* является решением задач /1/, /2/ и /3/, /4/, т.е. искомым функцией источника. Этот поиск осуществляется пошаговой минимизацией функционалов:

$$r_k M[X, \alpha^k] + (\tau_k \alpha^k - 1) \int_0^1 \{ X(\rho) - X^k(\rho) \}^2 d\rho, \quad /7/$$

$$r_k N[X^{k+1}, \alpha] + \int_0^1 \{ \alpha(\rho) - \alpha^k(\rho) \}^2 d\rho \quad /8/$$

с параметрами r_k , выбранными из условий сходимости /5/ итеративного поиска. Таким образом, на каждом шаге с номером k поиска решения (X^*, α^*) решается пара уравнений:

$$\int_0^1 A(\sigma, \rho) \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \tau) X(\tau) d\tau - Y(\sigma) \right\} d\sigma + \left(\alpha^k(\rho) + \frac{1}{r_k} \right) \times \\ \times \left\{ q(\rho) [X(\rho) - X^k(\rho)] - \frac{d}{d\rho} \left[p(\rho) \frac{d}{d\rho} (X(\rho) - X^k(\rho)) \right] \right\} = 0 \quad /9/$$

$$\alpha(\rho) \{ q(\rho) [X^{k+1}(\rho)]^2 + p(\rho) \left[\frac{dX^{k+1}}{d\rho}(\rho) \right]^2 \} + [\alpha(\rho) - \alpha^k(\rho)] \frac{1}{r_k} = 0. \quad /10/$$

Сходимость алгоритма и принадлежность решения X^* пространству непрерывных функций с квадратично интегрируемыми производными обеспечивается, в частности, и при $\tau \equiv 1$, $q \equiv 1$, $p = \text{const}$. Такие параметры были выбраны для численной реализации поиска функции источника. При этом переход к дискретной модели осуществляется конечно-разностным методом. Область интегрирования по переменным ρ , τ разбивалась на N_1 участков равной длины $\Delta\rho = \Delta\tau = 1/N_1$, область интегрирования по σ разбивалась на $N_2 = N_1 - 2$ участков равной длины $\Delta\sigma = 1/N_2$. Интегралы заменялись интегральными суммами по формуле трапеций, а вторые производные - конечно-разностными выражениями:

$$[X(\rho_{j+1}) - 2X(\rho_j) + X(\rho_{j-1})] / (\Delta\rho)^2.$$

Граничные условия $X(\rho_0) = X(\rho_{N_1-1}) = 0$ позволяют разрешить два крайних уравнения возникающей при дискретизации системы линейных алгебраических уравнений и привести систему к виду:

$$\sum_{j=1}^{N_2} \left(A_{ij} + \left(\alpha_j^k + \frac{1}{r_k} \right) B_{ij} \right) X_j = U_i, \quad i = 1, \dots, N_2. \quad /11/$$

Здесь $X_j = X(\rho_j)$, $j = 1, \dots, N_2$;

$$u_1 = u(\rho_1) = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} A(\sigma_1, \rho_1) Y(\sigma_1) + \right.$$

$$\left. \sum_{j=2}^{N_2-1} A(\sigma_j, \rho_j) Y(\sigma_j) + \frac{1}{2} A(\sigma_{N_2}, \rho_j) Y(\sigma_{N_2}) \right\};$$

$$A_{ij} = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} A(\sigma_1, \rho_i) A(\sigma_1, \rho_j) + \right.$$

$$\left. + \sum_{k=2}^{N_2-1} A(\sigma_k, \rho_i) A(\sigma_k, \rho_j) + \frac{1}{2} A(\sigma_{N_2}, \rho_i) A(\sigma_{N_2}, \rho_j) \right\};$$

$$B_{jj} = q + p / (\Delta\rho)^2, \quad j = 1, \dots, N_2;$$

$$B_{j,j+1} = -p / (\Delta\rho)^2, \quad j = 1, \dots, N_2 - 1; \quad B_{j-1,j} = -p / (\Delta\rho)^2, \quad j = 2, \dots, N_2.$$

При дискретизации уравнения /10/ получается система линейных алгебраических уравнений, которая с учетом граничных условий /4/ приводится к виду

$$\alpha_j (X_j^{k+1}) - p^2 \alpha_j (X_{j+1}^{k+1} - 2X_j^{k+1} + X_{j-1}^{k+1}) / (\Delta\rho)^4 + \frac{\alpha_j - \alpha_j^k}{r_k} = 0. \quad /12/$$

Расчеты проводились с помощью пакета программ, реализующего указанный алгоритм на фортране. Предварительная обработка экспериментальных данных осуществлялась методом сплайн-аппроксимации /6/ с помощью соответствующего комплекса программ. Все параметры r_k были выбраны тождественно равными 1, параметр q был выбран равным 1. Параметр p и начальное приближение α_0 параметра регуляризации варьировались при проведении серии численных экспериментов. В результате были найдены допустимые области выбора p и α_0 . При любых p и α_0 из области допустимых значений решение задачи /11/, /12/ /дискретный аналог функции источника/ получалось с двойной машинной точностью за число шагов, меньшее десяти.

2. АЛГОРИТМ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ИСТОЧНИКА МЕТОДОМ РАЗЛОЖЕНИЯ В РЯД ФУРЬЕ

В [1] было показано, что в случае однородного по координатам эффективного распределения и цилиндрической симметрии задачи справедливо соотношение

$$h(\vec{r}) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{2\pi} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Theta_M(\vec{r}, \vec{\eta}) d\vec{\eta}}{\left(1 + \frac{|\vec{\eta}|^2}{H^2}\right)^{\frac{n+3}{2}}}$$

При этом аппаратная функция маски имеет вид

$$\Theta_M(\vec{r}, \vec{\eta}) = \prod_{z=0}^H \Theta(R(z)^2 - |\vec{r}|^2 - |\frac{z}{H}\vec{\eta}|^2 - 2\frac{z}{H}(\vec{r}, \vec{\eta}))$$

Эти соотношения можно записать в канонических переменных $Y(\sigma) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma)$, где

$$A_n(\sigma) = \frac{n+1}{2\pi} \int_0^1 \frac{A(\sigma, \rho) \rho d\rho}{[1 + (\mu\rho)^2]^{\frac{n+3}{2}}}$$

Функция источника $X(\rho)$ при этом представляется в виде ряда Фурье:

$$X(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{n+1}{2\pi} \frac{1}{[1 + (\mu\rho)^2]^{\frac{n+3}{2}}} \quad /13/$$

Поиск функции источника в этом случае означает поиск коэффициентов a_n разложения $X(\rho)$ в ряд Фурье, который осуществляется минимизацией тихоновского функционала [3]:

$$\int_0^1 |Y(\sigma) - \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma)|^2 d\sigma + \alpha \sum_{n=0}^{\infty} a_n^2 \quad /14/$$

Уравнение Эйлера задачи /14/ имеет вид

$$\int_0^1 A_k(\sigma) \{Y(\sigma) - \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma)\} d\sigma - \alpha a_k = 0 \quad /15/$$

Конечномерную аппроксимацию интегродифференциального уравнения /14/ производим заменой ряда Фурье его конечным отрезком и заменой интегралов интегральными суммами. Тогда уравнение /15/ записывается в виде

$$\sum_{n=0}^L (C_{kn} + \alpha \delta_{kn}) a_n = Y_k, \quad k = 0, 1, \dots, L \quad /16/$$

Здесь

$$Y_k = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} \bar{A}_k(\sigma_1) Y(\sigma_1) + \sum_{j=2}^{L-1} \bar{A}_k(\sigma_j) Y(\sigma_j) + \frac{1}{2} \bar{A}_k(\sigma_L) Y(\sigma_L) \right\},$$

$$C_{kn} = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} \bar{A}_k(\sigma_1) \bar{A}_n(\sigma_1) + \sum_{j=2}^{L-1} \bar{A}_k(\sigma_j) \bar{A}_n(\sigma_j) + \frac{1}{2} \bar{A}_k(\sigma_L) \bar{A}_n(\sigma_L) \right\},$$

$$\bar{A}_k(\sigma) = \Delta\rho \frac{k+1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2} \frac{A(\sigma, \rho_1) \rho_1}{[1 + (\mu\rho_1)^2]^{\frac{k+3}{2}}} + \sum_{j=2}^{L-1} \frac{A(\sigma, \rho_j) \rho_j}{[1 + (\mu\rho_j)^2]^{\frac{k+3}{2}}} + \frac{1}{2} \frac{A(\sigma, \rho_L) \rho_L}{[1 + (\mu\rho_L)^2]^{\frac{k+3}{2}}} \right\}$$

Так же, как и в предыдущем разделе, конечномерный аналог регуляризованного решения задач /14/ и /15/, т.е. решение системы линейных алгебраических уравнений /16/, находим методом итераций с автоматическим выбором параметра регуляризации α . А именно, решаем задачу:

$$\sum_{m=0}^L \{C_{ml} + (\alpha_l^k + \frac{1}{r_k}) \delta_{lm}\} a_m = Y_l, \quad l = 0, 1, \dots, L;$$

$$\alpha_l^k = \alpha_l^{k-1} / [r_k (\alpha_l^k)^2 + 1], \quad l = 0, 1, \dots, L.$$

Расчеты проводились с помощью соответствующего комплекса программ, реализующих описанный алгоритм на фортране.

3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ

Найденное решение вспомогательной /обратной/ задачи используем для решения прямой задачи - прогноза результатов экранирования по известной функции источника /найденной при решении вспомогательной задачи/.

а/ Вспомогательная задача решена конечно-разностным методом, т.е. получена таблица значений функции источника на заданной конечной сетке аргументов области определения: $X_j = X(\rho_j)$, $j = 0, 1, \dots, L, L+1$, причем $X_0 = 0$, $X_{L+1} = 0$. Вспомогательная задача решена по результатам $Y_j = Y^1(\sigma_j)$, $j = 1, \dots, L$, $\sigma_1 = 0$, $\sigma_L = 1$. Эксперимента с экранирующей маской M^1 , аппаратная функция которой A^1 вычислена в точках сетки. $A_{ij}^1 = A^1(\sigma_i, \rho_j)$, $i, j = 1, \dots, L$.

Прямая задача заключается в предсказании результатов эксперимента $Y_j^2 = Y^2(\sigma_j)$, $j = 1, \dots, L$ через экранирующую маску M^2 с аппаратной функцией A^2 , принимающей в точках заданной ранее сетки значения $A_{jk}^2 = A^2(\sigma_j, \rho_k)$, $j, k = 1, \dots, L$. При этом предполагается, что функция источника X^2 в этом случае совпадает с функцией источника X^1 , вычисленной по результатам вышеупомянутого эксперимента. Интеграл /1/ заменяется интегральной суммой по формуле трапеций на сетке $\rho_j = j/(L+1)$, $j = 1, \dots, L$, с учетом граничных условий /4/: $Y_k^2 = \left\{ \sum_{j=1}^L A_{jk}^2 X_j^1 \right\} / (L+1)$.

Результаты численного прогноза сравниваются с результатами \tilde{Y}_2 эксперимента, произведенного с использованием экранирующей маски M^2 .

б/ Вспомогательная задача решена с помощью представления функции источника в виде конечного отрезка ряда Фурье:

$$X^1(\rho) = \sum_{n=1}^L a_n^1 \frac{n}{2\pi} \frac{1}{[1+(\mu\rho)^2]^{\frac{n+2}{2}}}$$

Коэффициенты Фурье a_n^1 , $n = 1, \dots, L$ получены при решении вспомогательной задачи в форме /16/ по результатам эксперимента с экранирующей маской M^1 с аппаратной функцией A^1 . Прямая задача состоит в предсказании результатов Y^2 эксперимента с маской, аппаратная функция которой A^2 . При этом предполагается, что функции источника для обоих экспериментов совпадают. Следовательно, для решения прямой задачи надо восстановить Y^2 по формуле

$$Y^2(\sigma) = \sum_{n=1}^L \tilde{a}_n^1 A_n^2(\sigma). \quad /17/$$

Здесь

$$A_n^2(\sigma) = \frac{\Delta\rho \cdot n}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2} \frac{A^2(\sigma, \rho_1) \rho_1}{[1+(\mu\rho_1)^2]^{\frac{n+2}{2}}} + \sum_{j=2}^{L-1} \frac{A^2(\sigma, \rho_j) \rho_j}{[1+(\mu\rho_j)^2]^{\frac{n+2}{2}}} + \frac{1}{2} \frac{A(\sigma, \rho_L) \rho_L}{[1+(\mu\rho_L)^2]^{\frac{n+2}{2}}} \right\}, \quad \rho_k = \Delta\rho \cdot k, \quad \Delta\rho = 1/(L+1).$$

При этом A_n^2 вычисляются на сетке значений $\sigma_j = (j-1)/(L-1)$, $j=1, \dots, L$. Для устойчивого суммирования отрезка ряда Фурье /17/ коэффициенты \tilde{a}_n^1 выбираются в виде /3/: $\tilde{a}_n^1 = a_n^1 / (1 + \alpha \xi_n)$. При этом последовательность ξ_n выбирается в виде $1/n^2$ и параметр регуляризации α подбирается экспериментально.

Результаты численных экспериментов по решению прямой задачи обоими методами совпадают, что еще раз свидетельствует в пользу состоятельности обсуждаемой математической модели экранирования корпускулярных потоков.

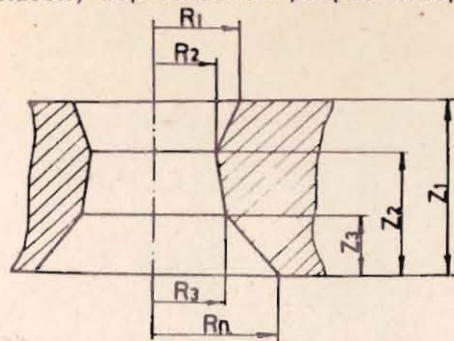
4. АЛГОРИТМ ОТЫСКАНИЯ ФОРМЫ ЭКРАНИРУЮЩЕЙ МАСКИ

Здесь, так же, как и в предыдущих пунктах, рассматривается случай цилиндрической симметрии. В связи с этим поиск формы маски M осуществляется устойчивой минимизацией функционала:

$$F^{\alpha}[A] = \int_0^1 \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho \right\}^2 d\sigma + \alpha \Omega.$$

Стабилизирующий функционал Ω выбираем, исходя из дополнительной информации о задаче.

Поиск нужной маски осуществляется в классе цилиндрических многосегментных масок, вертикальный разрез которых представлен на рисунке.



Вертикальный разрез n-сегментной цилиндрической маски.

В таком случае аппаратная функция маски /1/ принимает вид

$$A(\sigma, \rho; R_k, z_k) = \frac{\mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \prod_{k=1}^{n-1} \theta / R_k^2 - (\sigma R_n)^2 - (\rho \mu z_k)^2 - 2\sigma R_n \rho \mu z_k \cos \phi.$$

Стабилизирующий функционал выбираем равным $\Omega[R_k, z_k] = \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2)$, т.е. ищем экранирующую маску с минимальной толщиной и минимальным входным отверстием, обеспечивающую заданный эффект экранирования.

В итоге решаем задачу минимизации функционала

$$F^{\alpha}[R_k, z_k] = \int_0^1 \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho; R_k, z_k) X(\rho) d\rho \right\}^2 d\sigma + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2).$$

При этом $(2n-2)$ -мерный вектор $(R_1, \dots, R_{n-1}, z_1, \dots, z_{n-1})$ будет соответствовать параметрам физической экранирующей маски в случае, если выполняются условия

$$z_j > z_{j+1}, \quad R_j > 0, \quad j = 1, \dots, n-1. \quad /18/$$

Заметим еще, что не любая маска с параметрами, удовлетворяющими условиям /18/, может быть изготовлена на практике. Дополнительные ограничения реализуемости маски можно представить в виде

$$z_j \geq z_{j+1} + h_0, \quad R_j \geq R_0, \quad j = 1, \dots, n-1.$$

Итак, форма искомой маски находится минимизацией функционала:

$$F_n^{\alpha}[R_k, z_k] = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} [Y(\sigma_1) - Y(\sigma_1; R_k, z_k)]^2 + \sum_{j=2}^{L-1} [Y(\sigma_j) - \right.$$

$$-Y(\sigma_j; R_k, z_k)]^2 + \frac{1}{2} [Y(\sigma_L) - Y(\alpha_L; R_k, z_k)]^2] + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2), \quad /19/$$

в области D_n векторного пространства R^{2n-2} :

$$D_n = \{(R_k, z_k) \in R^{2n-2} / R_k \geq R_0, z_k \geq z_{k+1} + h_0, k = 1, \dots, n-1\}. \quad /20/$$

Здесь

$$\Delta\sigma = 1/(L-1), \quad \Delta\rho = 1/(L+1), \quad Y(\sigma; R_k, z_k) = \left\{ \sum_{j=2}^{L-1} A(\sigma, \rho_j; R_k, z_k) X(\rho_j) \Delta\rho. \right.$$

Минимум функционала /19/ зависит от n , а также от R_0, h_0 из /20/. При этом чем больше n , тем меньше значения достигает функционал /19/. Практически число сегментов n маски M выбираем минимальным из тех, при которых достигается заданная точность поиска. Минимизацию функционала проводим методом деформируемого многогранника /7,8/ с дополнительным проектированием на область D_n допустимых значений параметров R_k, z_k . Проектирование можно осуществлять методом деформируемого многогранника или случайным способом /7,8/, соответствующие методики известны под названиями: метод скользящего допуска и комплексный метод Бокса. Расчеты проводились с помощью двух комплексов программ, реализующих эти методы в классе двухсегментных масок. Из сравнения с экспериментальными данными видно, что относительная погрешность расчетов не превышает 1%.

ЛИТЕРАТУРА

1. Курышкин В.В., Севастьянов Л.А., Швачка А.Б. ОИЯИ, P11-84-102, Дубна, 1984.
2. Аникин В.И. и др. Математические задачи, связанные с процессом напыления. Изд-во ВИНТИ, М., 1982, №5175-82.
3. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. "Наука", М., 1979.
4. Ловецкий К.П. В сб.: Численные методы решения задач математической физики и теории систем. Изд-во Ун-та дружбы народов им. Патриса Лумумбы. М., 1978.
5. Бенсусан А., Лионс Ж.-Л., Темам Р. В сб.: Методы вычислительной математики. Изд-во ВЦ СО АН СССР, Новосибирск, 1975.
6. Василенко В.А. Сплайн-функции: теория, алгоритмы, программы. "Наука", Новосибирск, 1983.
7. Химмельблау Н. Нелинейное программирование. "Мир", М., 1969.
8. Численные методы устойчивой минимизации. /Под ред. Ф.Гилла и У.Мюррея/. "Мир", М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 декабря 1984 года.

Курышкин В.В., Севастьянов Л.А., Швачка А.Б. P11-84-866
Алгоритмизация математической модели
корпускулярного экранирования

В рамках математической модели процесса экранирования корпускулярных потоков, связывающей три характеристики процесса: функцию источника потока, аппаратную функцию экранирующей маски и функцию результата экранирования, описаны алгоритмы поиска всех трех характеристик. Задача такого рода возникает при отыскании формы экранирующей маски, обеспечивающей создание элементов интегральной оптики заданного профиля. Для цилиндрически симметричных потоков и масок относительная ошибка численных оценок экспериментальных данных не превышает 1%.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Kuryshkin V.V., Sevastianov L.A., Shvachka A.B. P11-84-866
The Algorithmic Realization of the Mathematical Model
of the Corpuscular Flux Masking

Numerical algorithms of searching for three characteristics of the corpuscular flux masking process incorporated in its mathematical model: the flux source function, the mask transparency function and the resulting masking function, - are described. Such problems appear when searching for the mask necessary while performing integral optics elements with prescribed profiles. In case of cylindrically symmetric flux and masks relative errors of numerical estimates for experimental data were less than 1%.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984