

С. Н. Сытова

Институт ядерных проблем Белгосуниверситета, Минск, Беларусь

Валидация и верификация программного обеспечения для моделирования взаимодействия излучения с веществом

С конца XX века в процессе бурного развития современной компьютерной техники и взрывного увеличения объема программного обеспечения (ПО), возникла насущная проблема в решении вопросов его валидации и верификации, в том числе ПО для моделирования физических процессов и явлений, а также обработки больших объемов данных крупнейших экспериментальных установок мира. Ряд ведущих научных, технических профессиональных и военных учреждений мира, в том числе Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) разработали руководства и стандарты [1–3] по проблемам моделирования, верификации и валидации систем, программного и аппаратного обеспечения. Также есть большое количество научных работ на данную тему [4–3] и др.

Под верификацией [2, 3] понимается процесс определения того, насколько реализация модели точно представляет концептуальное ее описание и решение. Валидация – процесс определения степени, в которой модель является точным представлением реального мира с точки зрения ее предполагаемого использования. То есть при верификации формулируется вопрос: «Правильно ли мы создаем программный продукт?», соответствует ли ПО его спецификации. При валидации задается вопрос: «Правильный ли продукт мы создаем?», выполняет ли ПО то, что действительно требуется пользователю. В [6] подчеркивается, что сам автор ПО должен быть уверен в ней и знать границы, в которых оно работает. И эта уверенность должна быть реальной, а все составные части ПО (например, движение частиц, моделирование полей и т. д.) должны тестироваться отдельно для получения предсказуемых результатов.

В [7] дан обзор ПО, используемого для моделирования взаимодействия излучения с веществом. Отметим, что многие исследователи все чаще используют программные комплексы собственного производства, более того экспресс-коды – не трехмерные полные «тяжелые» программы, а одномерные по пространству (1D-) и двумерные (2D-) коды [5]. Это связано с тем, что не все ученые имеют доступ к суперкомпьютерным вычислениям,

являющиеся дорогими. Но и суперкомпьютер не выдаст численный результат мгновенно. Для создания многомиллионных ускорительных комплексов и установок и проведения экспериментальных исследований на них такое моделирование должно быть выполнено, невзирая на материальные затраты, но предварительно следует выполнить целый ряд экспресс-расчетов по быстрым программам с целью предварительного сужения и уточнения параметров для последующего эффективного полноценного моделирования.

Рассмотрим кратко проблему моделирования нелинейных процессов взаимодействия излучения с веществом при прохождении пучков заряженных частиц через пространственно-периодические структуры и генерации ими электромагнитного излучения на примере объемных лазеров на свободных электронах (ОЛСЭ). ОЛСЭ представляют собой электронные устройства, в которых в условиях динамической дифракции происходит генерация электромагнитного излучения заряженными частицами, движущимися в существенно неоднородной (двумерной и трехмерной) пространственно-периодической системе (среде, структуре, резонаторе).

В рентгеновском диапазоне в качестве резонатора используются естественные кристаллы (кристаллические пластинки). В этом случае величина пространственного периода определяется периодом кристаллической решетки, а испускаемое излучение имеет длину, сравнимую с межатомными расстояниями, т.е. принадлежит рентгеновскому диапазону. В микроволновом диапазоне в качестве мишени может использоваться искусственная дифракционная решетка, гофрированный волновод, объемная периодическая система, состоящая из периодически натянутых диэлектрических или металлических нитей.

Используемый механизм излучения в ОЛСЭ – это теоретически предсказанное в начале 70-х годов XX века и экспериментально открытое в 1985 г. сотрудниками НИИ ЯП БГУ параметрическое рентгеновское излучение и квазичеренковское излучение в других частотных диапазонах. Принципы и теоретические основы функционирования ОЛСЭ были заложены в работах [8, 9]. Первое экспериментальное наблюдение генерации ОЛСЭ в миллиметровом диапазоне было проведено в НИИ ЯП БГУ в 2001 г. [10]. В дальнейшем были проведены эксперименты с сеточными и фольговыми резонаторами – неоднородными пространственно-периодическими структурами, обладающими всеми свойствами фотонных кристаллов.

ОЛСЭ в различных диапазонах могут быть использованы для создания нового поколения ускорителей элементарных частиц, передачи электромагнитной энергии на большие расстояния, нагрева термоядерной плазмы, высокостабильных передатчиков для систем связи в СВЧ-диапазоне и т.д. – во многих высокотехнологичных направлениях исследований, в экспериментальных диагностических целях и для различных медицинских применений.

Исследование линейного режима работы как ОЛСЭ, так и других усилителей и генераторов электромагнитного излучения на основе пучков заряженных частиц может быть проведено аналитически. Оно позволяет получить оценки на стартовые условия и физические параметры изучаемого устройства, которые необходимы для его функционирования. Однако во всех случаях в реальных условиях линейный режим работы быстро сменяется нелинейной стадией.

Математические модели, описывающие нелинейную стадию, представляют собой системы многомерных нелинейных уравнений в частных производных. Их решение должно быть проведено с использованием различных численных методов, поскольку аналитически получить решения таких систем уравнений практически невозможно. Такое моделирование может облегчить и упростить проведение полноценных дорогостоящих физических экспериментов, а также уточнить исходные модели физических процессов, выверить и систематизировать результаты экспериментальных исследований. Для моделирования различных вариантов ОЛСЭ был разработан комплекс программ VOLC («*VOL*ume *C*ode») [11–13].

VOLC – комплекс программ для экспресс-моделирования сложной динамики электронного пучка и распространения электромагнитных волн ОЛСЭ. Не требуя больших мощностей компьютера, он позволяет проверить все основные физические законы, лежащие в основе ОЛСЭ, провести быстрый предрасчет условий эксперимента, который затем может быть с большей точностью промоделирован с помощью «тяжелых» компьютерных кодов на суперкомпьютерной технике (при ее наличии). Таким образом, комплекс программ VOLC предназначен для экспресс-моделирования работы различных типов ОЛСЭ, в том числе экспериментальных физических установок ОЛСЭ НИИ ЯП БГУ.

Опишем здесь кратко основные этапы тестирования, валидации и верификации комплекса программ VOLC в соответствии с [1–3]. Во-первых, было проведено сравнение численных результатов с результатами, полученными аналитически, в случае стационарного

решения стандартной задачи дифракции в резонаторе и стационарного решения стандартной задачи дифракции с электронным пучком. Первое позволило протестировать и верифицировать моделирование электромагнитных полей в системе, второе – моделирование движения электронов в системе.

Проверка прохождения пучка заряженных частиц через резонатор является важной составляющей процесса валидации и верификации программы. Проведено сравнение результатов работы VOLC для полноценно работающего ОЛСЭ-генератора и при выключенной в системе дифракции, что означает движение пучка электронов в резонаторе без взаимодействия с электромагнитным полем. Получены также важные численные результаты, демонстрирующие различные стороны режимов усиления и генерации излучения в ОЛСЭ, проведена проверка выполнения основных закономерностей функционирования ОЛСЭ. Моделирование ОЛСЭ осуществлено в широком диапазоне параметров.

В результате цикла работ в 2003–2022 гг. с помощью VOLC продемонстрировано численное выполнение основных физических закономерностей ОЛСЭ, полученных аналитически, в том числе порогов генерации и подавления паразитных мод в системе вследствие ОРОС и динамической дифракции. Проверена чувствительность системы к изменению начальных данных. Проведено исследование возможности работы ОЛСЭ в режимах усиления и генерации в различных геометриях. Выполнено сравнение одномерных и неодномерных геометрий ОЛСЭ. Показано, что при изменении геометрии можно получить существенно *большие* значения амплитуд электромагнитного поля, чем в одномерной геометрии.

Все численные результаты подтверждают, что существует оптимальный набор параметров для эффективной генерации излучения в каждом из исследованных случаев, а комплекс программ VOLC является надежной программой, не давая сбоев ни при каких данных. позволяя проводить численные эксперименты в широком диапазоне параметров в интервале частот от рентгеновской до терагерцовой.

Литература

1. Modeling and simulation (M&S) verification, validation, and accreditation: U. S. Department of Defense, Instruction number 5000. 61. –

Arlington: DOD, 1996. – 15 p.

2. Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations: American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA Report G0771988. – Reston, 1998. – 29 p.

3. IEEE Standard for system, software, and hardware verification and validation: IEEE Standard 1012™-2016. – New York: IEEE, 2016. – 260 p.

4. Pelletier, D. Verification, validation, and uncertainty in computational fluids dynamics / D. Pelletier // Canadian Journal Civ. Engineer. – 2010. – Vol. 37. – P. 1003–1013.

5. Cyclotron auto resonance maser and free electron laser devices: a unified point of view / E. Di Palma [et al.] // J. Plasma Phys. – 2017. – Vol. 83. – № art. 905830102

6. Бэдсел, Ч. Физика плазмы и численное моделирование / Ч. Бэдсел, А. Лэнгдон. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с.

7. С.Н.Сытова. Проблема использования пакетов прикладных программ в современном научном моделировании физических задач / С.Н.Сытова // Сборник материалов Респ. научно-методич. конф. «Актуальные вопросы научно-методической и учебно-организационной работы: традиционные ценности и инновационные технологии в образовании как фактор прогрессивного развития общества», 22–23 февраля 2024 года. – Гомель, 2024. – С. 406–408.

8. Baryshevsky, V. G. Parametric beam instability of relativistic charged particles in a crystal / V. G. Baryshevsky, I. D. Feranchuk // Physics Letters A. – 1984. – Vol. 102. – P. 141–144.

9. Baryshevsky, V. G. Parametric (quasi-Cerenkov) X-ray free electron lasers / V. G. Baryshevsky, K. G. Batrakov, I. Ya. Dubovskaya // Journal of Physics D: Appl. Physics. – 1991. – Vol. 24. – P. 1250–1257.

10. First lasing of a volume FEL (VFEL) at a length range $\lambda \sim 4-6$ mm / V. G. Baryshevsky [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2002. – Vol. A483. – P. 21–24.

11. Sytova, S. Numerical Analysis of Lasing Dynamics in Volume Free Electron Laser / S. Sytova // Mathematical Modelling and Analysis. – 2008. – Vol. 13, № 2. – P. 263–273.

12. Сытова, С.Н. Модели объемных лазеров на свободных электронах / С.Н. Сытова // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2012. – Т. 20, № 6. – С. 124–135.

13. Сытова, С.Н. Нелинейная динамика излучения сильноточных пучков заряженных частиц в пространственно-периодических структурах / С.Н. Сытова // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2021. - № 1. – С. 62–72.