

Использование методов машинного обучения для анализа результатов численного моделирования лазерно-плазменного ускорения электронов

Т.М.Волкова, Е.Н.Неруш, И.Ю.Костюков

С помощью методов машинного обучения на основе самоорганизующихся карт Кохонена проведены анализ и классификация результатов численного моделирования ускорения электронов при взаимодействии мощного лазерного излучения с плазмой. Методом частиц в ячейках (particle-in-cell, PIC) выполнено трехмерное моделирование взаимодействия в широких диапазонах параметров (интенсивность лазерного излучения и концентрация плазмы). Для каждого набора параметров найден спектр ускоренных электронов, на основе которого вычислены заряд, средняя энергия и относительный разброс по энергии ускоренных электронов. С использованием полученных величин в качестве входных параметров карты проведена классификация различных режимов ускорения. Разработанная схема может применяться для выявления оптимальных режимов ускорения в более реалистичных условиях с учетом большего числа параметров.

Ключевые слова: лазерная плазма, плазменные методы ускорения, численное моделирование на основе метода частиц в ячейках, методы машинного обучения, нейронные сети, самоорганизующиеся карты Кохонена.

1. Введение

Благодаря быстрому развитию лазерных технологий в последнее время активно исследуется взаимодействие мощного лазерного излучения с веществом. Одним из интересных и успешно исследуемых процессов, сопровождающих данное взаимодействие, является лазерно-плазменное ускорение электронов [1, 2]. В экспериментах энергия электронов, ускоренных в лазерной плазме, превысила 8 ГэВ [3], что всего в несколько раз меньше максимальной энергии, достижимой в современных линейных ускорителях [4]. Однако, благодаря сверхвысокому градиенту лазерно-плазменного ускорения, такая энергия получена на длине в несколько десятков сантиметров, тогда как в стандартном линейном ускорителе энергия в 8 ГэВ достигается на длине около 1 км. Таким образом, развитие лазерно-плазменных технологий может сделать ускорители относительно компактными устройствами. Это способно революционизировать различные области науки и техники: от физики высоких энергий, где коллайдеры частиц являются главным инструментом исследований, до медицины и промышленности, где необходимы компактные источники рентгеновского излучения высокой яркости, в основе которых лежат ускорители электронов. В настоящее время существуют большие международные проекты, посвященные исследованию лазерно-плазменного ускорения [5, 6]

Лазерно-плазменное ускорение – это достаточно сложный процесс, и численное моделирование является «рабочей лошадкой» как для анализа и планирования экспериментов, так и для проверки теоретических моделей, осо-

бенно в областях параметров, где лабораторное исследование на данном этапе невозможно. Более того, многие интересные эффекты и режимы ускорения частиц в лазерной плазме вначале были обнаружены и исследованы с помощью численного моделирования, например сильно нелинейный режим ускорения (bubble-режим) [7], генерация бетатронного излучения [8], эффекты абсолютной фазы для сверхкоротких лазерных импульсов [9, 10], ускорение в полом плазменном канале [11] и т. д. Следует отметить, что полномасштабное численное моделирование, особенно в случае многопараметрического моделирования, приводит к генерации огромного объема данных. Их анализ и интерпретация являются достаточно трудоемким и неоднозначным процессом, требующим значительного времени.

В последние годы машинное обучение используется во многих сферах человеческой деятельности [12–14]. Более того, область его применения постоянно расширяется, поскольку использование цифровых технологий приводит к накоплению больших объемов данных, для обработки и анализа которых необходимы значительные усилия. В частности, методы машинного обучения позволяют автоматизировать процесс анализа результатов численного моделирования и сделать анализ более объективным (уменьшить влияние человеческого фактора в подготовке результатов анализа) [15–17]. В настоящее время разработано множество методов. Среди основных методов можно выделить следующие: «метод k -ближайших соседей» (k -nearest neighbors algorithm [18]), алгоритм «случайный лес» (random forest [19]), полносвязанные нейронные сети (fully-connected neural network [20]) и др. Следует отметить, что сама идея применения машинного обучения для исследования лазерно-плазменного взаимодействия не нова, хотя работы в этом направлении начались совсем недавно. В частности, такие методы обсуждались для планирования экспериментов и нахождения их оптимальной схемы [21], для выбора лучшей теоретической модели и уточнения параметров эксперимента, не поддающихся прямым измерениям [22], для автоматиза-

Т.М.Волкова, Е.Н.Неруш, И.Ю.Костюков. Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН, Россия, 603950 Н.Новгород, ул. Ульянова, 46; e-mail: kost@ipfran.ru

Поступила в редакцию 15 апреля 2021 г., после доработки – 7 июля 2021 г.

ции экспериментов по лазерно-плазменному ускорению, а также управления ими [23] и др.

В настоящей работе рассматривается применение одного из методов машинного обучения для обработки результатов численного моделирования лазерно-плазменного ускорения электронов и выявления различных режимов ускорения. В результате проведения больших серий численных экспериментов, как правило, получается большое количество данных в широких диапазонах лазерно-плазменных параметров. Выявление различных режимов взаимодействия и построение карты соответствия «параметры моделирования – режим взаимодействия» являются чрезвычайно важной и сложной задачей, которая сейчас практически всегда решается вручную. Особенно эта задача усложняется, когда размерность пространства параметров больше трех. В этом случае результаты очень трудно визуализировать и, следовательно, трудно классифицировать возможные режимы взаимодействия. Для автоматизации данной задачи мы предлагаем использовать одномерные самоорганизующиеся карты Кохонена.

2. Описание алгоритма карты

Самоорганизующаяся карта Кохонена (self-organizing map) относится к классу нейронных сетей с обучением без учителя [24]. В основе ее работы лежит один из методов проецирования многомерного пространства на пространство с более низкой размерностью. Для этого формулируются правила обучения нейрона, благодаря которому он

получает информацию относительно своего расположения. Вначале задается число нейронов (узлов) сети, которое обычно меньше числа входных векторов x_i , представляющих анализируемые данные. Сами нейроны помимо их положения на карте (определяемого вектором r_j) характеризуются также вектором веса m_j с той же размерностью, что и входные данные. Перед началом работы карту необходимо инициализировать, например задавая веса в виде случайных величин.

Процесс самоорганизации карты Кохонена представляет собой итеративный алгоритм. На каждом шаге случайным образом выбирается вектор из входных данных. После вычисления расстояния между двумя векторами $|x_i - m_j|$ выбирается вектор «нейрона-победителя», который наиболее близко расположен к входному вектору x_i . Обучение нейронов происходит за счет корректировки весов нейрона-победителя и его соседей. В результате корректировки расстояние между входным вектором и векторами нейрона-победителя и его соседей уменьшается. В простейшем случае процесс корректировки весов можно записать следующим образом:

$$m_j(t+1) = m_j(t) + h_{cj}(t) |x_i(t) - m_j(t)|, \quad (1)$$

где $h_{cj}(t)$ – так называемая функция соседства, которая в нашем случае задавалась в виде

$$h_{cj}(t) = \exp(-at) \left[1 - \frac{|x_i(t) - m_j(t)|}{\sigma} \right] \times$$

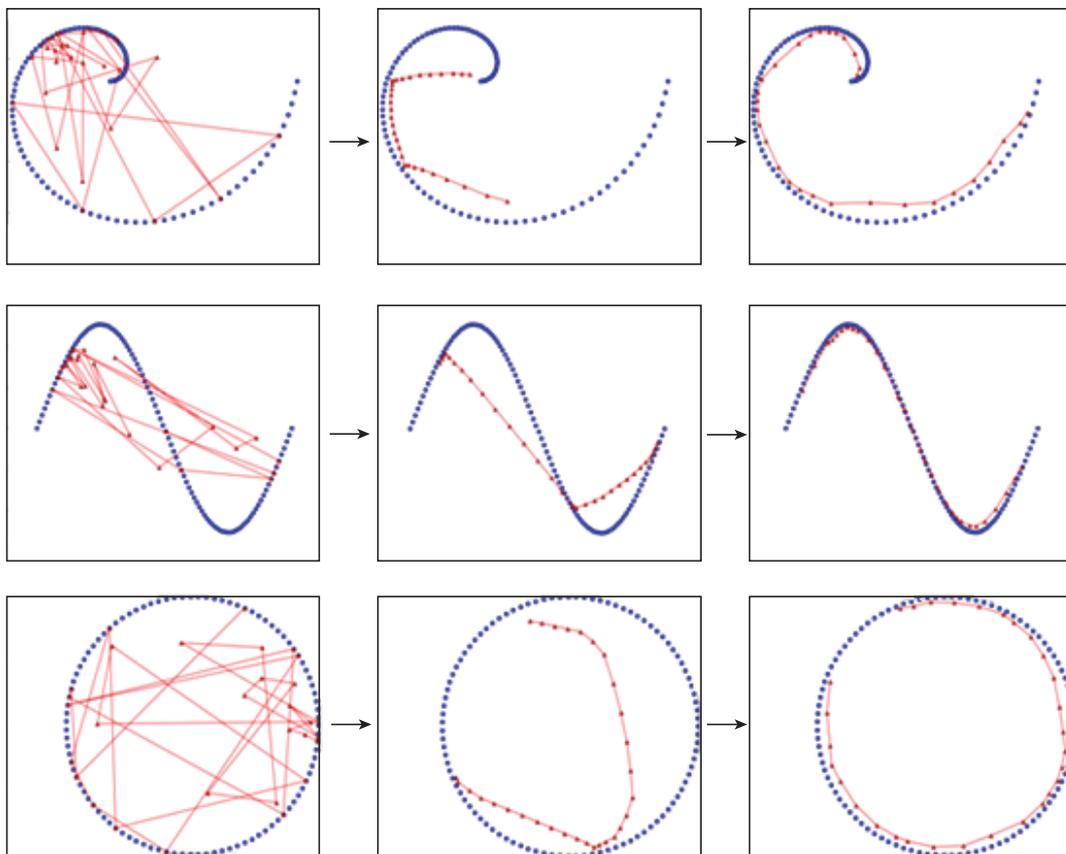


Рис.1. Иллюстрация работы алгоритма на основе карты Кохонена для простейших математических распределений. Синие точки соответствуют входным векторам. Распределение точек, отвечающих векторам нейрона сети, отмечено красным цветом, причем их начальные значения выбраны случайным образом из набора входных данных.

$$\times \Theta \left[1 - \frac{|x_i(t) - m_j(t)|}{\sigma} \right]; \quad (2)$$

α и σ – некоторые константы; t – эффективное время, описывающее шаги итерации; $\Theta(x)$ – функция Хевисайда, ($\Theta(x) = 0$ при $x < 0$ и 1 при $x \geq 0$). Функция соседства определяет как эффективное число соседей нейрона-победителя, участвующих в корректировке весов, так и скорость обучения.

На рис.1 проиллюстрирована работа нейронной сети на основе карты Кохонена для простейших математических распределений. В качестве входных векторов выбран упорядоченный набор точек, описывающих различные фигуры (спираль, синусоида, окружность). Входные векторы отмечены синим цветом. Начальные значения компонент векторов сети выбраны случайным образом из набора входных данных. Распределение нейронов сети показано красными точками. Видно, что вначале нейроны сети перепутаны. По итогам обучения они упорядочиваются и повторяют фигуру, поданную на вход сети.

Один из недостатков алгоритма связан с тем, что результат зависит от начальных распределений сети. Поэтому в процессе обучения карта может быть построена неправильно. Более того, вероятность ошибки увеличивается, если входные данные имеют сложную структуру. Для выявления случаев ошибочной аппроксимации применялась унифицированная матрица расстояний (u-matrix). Она отображает структуру полученных кластеров путем визуализации расстояния между ними. Кластером является группа векторов, расстояние между которыми внутри этой группы меньше, чем расстояние до соседних групп. Для нахождения матрицы вычисляется расстояние между вектором веса нейрона в сети и векторами весов его ближайших соседей. Вычисленные значения используются для определения цвета, которым будет отмечен элемент матрицы. Если карта была построена правильно, то на матрице не будет резких «перескоков» цвета, т.е. цвета, а значит и расстояния между соседними нейрона-

ми, будут изменяться плавно. Таким образом, визуализированная матрица может применяться для определения правильности работы карты. Если карта была построена неверно, то можно повторить вычисления с новым набором весов нейронов, которые выбираются случайно.

На рис.2 представлены примеры правильной и неправильной аппроксимаций с отображением матрицы расстояний. Справа от матрицы имеется цветовая шкала (рис.2,б,з), которая показывает соответствие между цветом точки на матрице и расстоянием до другой точки сети. Отметим, что при правильной аппроксимации (рис.2,а,б) расстояние между соседними точками плавно увеличивается, по диагонали получаются только нули (т.к. расстояние от точки до самой себя равно нулю), а самые далекие друг от друга точки на кривой и на матрице оказываются окрашенными соответствующим образом. При ошибочной аппроксимации (рис.2,в,з) наблюдаются резкие переходы цвета. Видно, что такие переходы характеризуют неправильное построение карты, поскольку расстояние между соседними точками не может резко изменяться. Следовательно, можно сказать, что карта в процессе обучения запуталась.

3. Анализ результатов моделирования лазерно-плазменного ускорения электронов

Процесс ускорения электронов в лазерной плазме состоит в следующем. Лазерный импульс, распространяясь в плазме, образует позади себя область, почти свободную от плазменных электронов. Ионы плазмы из-за большой по сравнению с электронами массы можно считать неподвижными на временах порядка длительности лазерного импульса. Таким образом, область, формирующаяся позади лазерного импульса и движущаяся за ним со скоростью, близкой к скорости света, имеет большой положительный заряд. Часть электронов плазмы может быть захвачена в эту область и ускориться до большой энергии, образуя сгустки ускоренных электронов.

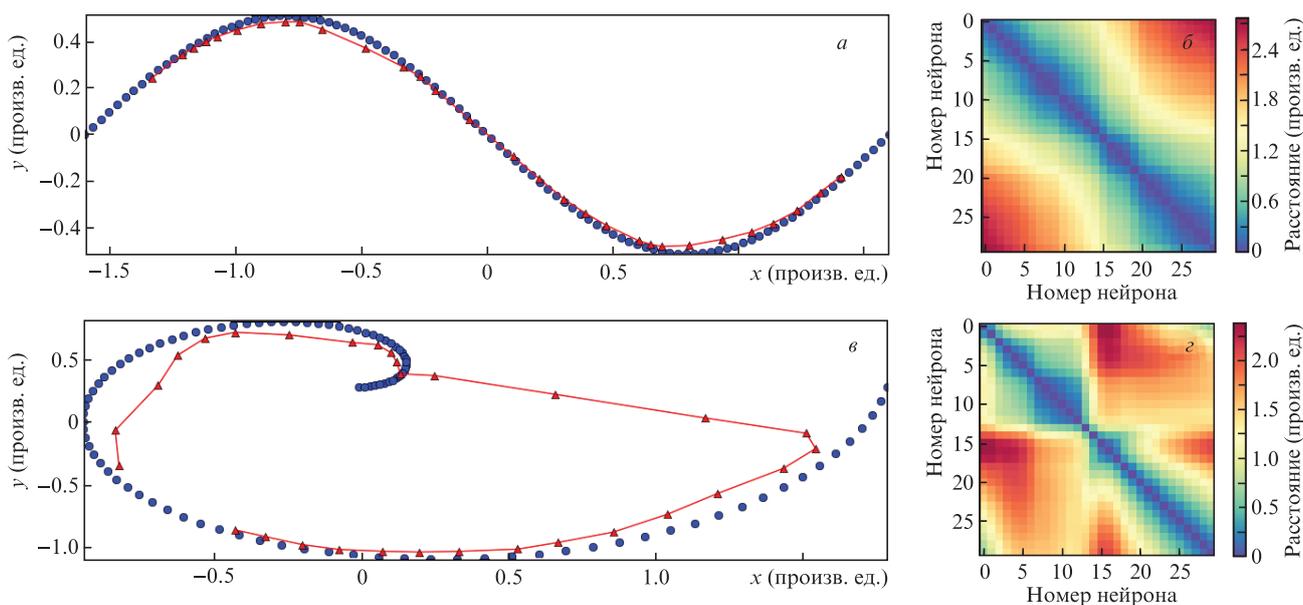


Рис.2. Иллюстрация правильной (а, б) и неправильной (в, з) работы алгоритма на основе карты Кохонена и диагностика работы с помощью унифицированной матрицы расстояний. На рис.2,а, в синие точки соответствуют входным векторам, а распределение точек, отвечающих векторам нейронов сети, отмечено красным цветом. На рис.2,б, з изображена унифицированная матрица расстояний, цветом показано расстояние между нейронами соответствующих номеров. Синий цвет – наименьшие расстояния, а красный – наибольшие.

С помощью PIC-кода QUILL [25] было выполнено трехмерное численное моделирование взаимодействия лазерного импульса с плазмой в широких диапазонах параметров. Линейно поляризованный лазерный импульс распространялся вдоль оси x и имел гауссов профиль:

$$a(\mathbf{r}, t = 0) = a_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2l_x^2} - \frac{y^2 + z^2}{2l_\perp^2}\right), \quad (3)$$

где $a_0 = eE_0/(mc\omega)$ – нормированная амплитуда лазерного импульса; E_0 – максимальное значение электрического поля импульса; l_x/c – длительность импульса; l_\perp – ширина поперечного распределения поля импульса; $\omega = 2\pi c/\lambda$ и λ – частота и длина волны лазерного излучения; e и m – заряд и масса электрона; c – скорость света. Лазерное поле было поляризовано вдоль оси y . В расчетах использовались следующие параметры: $l_x/c = 15$ фс, $l_\perp = 2.5$ мкм, $\lambda = 0.9$ мкм. Нормированная амплитуда импульса a_0 изменялась от 1 до 8 с шагом 1, а концентрация плазмы n – от $0.017n_c$ до $0.241n_c$ с шагом $0.014n_c$, где $n_c = 1.38 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ – критическая концентрация плазмы. Таким образом моделирование выполнялось для $8 \times 17 = 136$ наборов лазерно-плазменных параметров. Размер расчетной области составляет $24\lambda \times 24\lambda \times 30\lambda$. Сама расчетная область двигалась при моделировании со скоростью света, сопровождая лазерный импульс.

Для удобства на рис.3 представлены результаты моделирования только для 64 наборов лазерно-плазменных

параметров (концентрация плазмы изменялась от $0.017n_c$ до $0.115n_c$ с шагом $0.014n_c$) через 60 фс после начала взаимодействия. Видно, что процесс взаимодействия сильно меняется в зависимости от значений параметров. При каких-то значениях пучок ускоренных электронов не образуется, тогда как при других значениях формируется плотный сгусток высокоэнергетических электронов. В некоторых случаях лазерный импульс разваливается на части и образуется несколько сгустков электронов. При малых значениях a_0 вместо большой одиночной области с положительным зарядом формируется периодическая структура («кильватерная» волна, соответствующая квазилинейному режиму взаимодействия), которая не захватывает электроны. При численном моделировании размер плазменного промежутка, где происходило ускорение, составил 21 мкм, т.е. время взаимодействия лазерного импульса с плазмой равно 70 фс.

Основную долю в спектре (распределение по энергии) электронов, вылетевших из плазмы, составляют холодные электроны (с максимумом вблизи нулевой энергии). Чтобы учитывать при обработке результатов моделирования только электроны с высокой энергией, мы, как и в лабораторном эксперименте, учли движение электронов в вакуумном промежутке от плазмы до детектора. При движении в таком промежутке большинство электронов с малой энергией и большими значениями поперечных импульсов отстают от высокоэнергетических электронов, распространяющихся под малыми углами к оси x , и ухо-

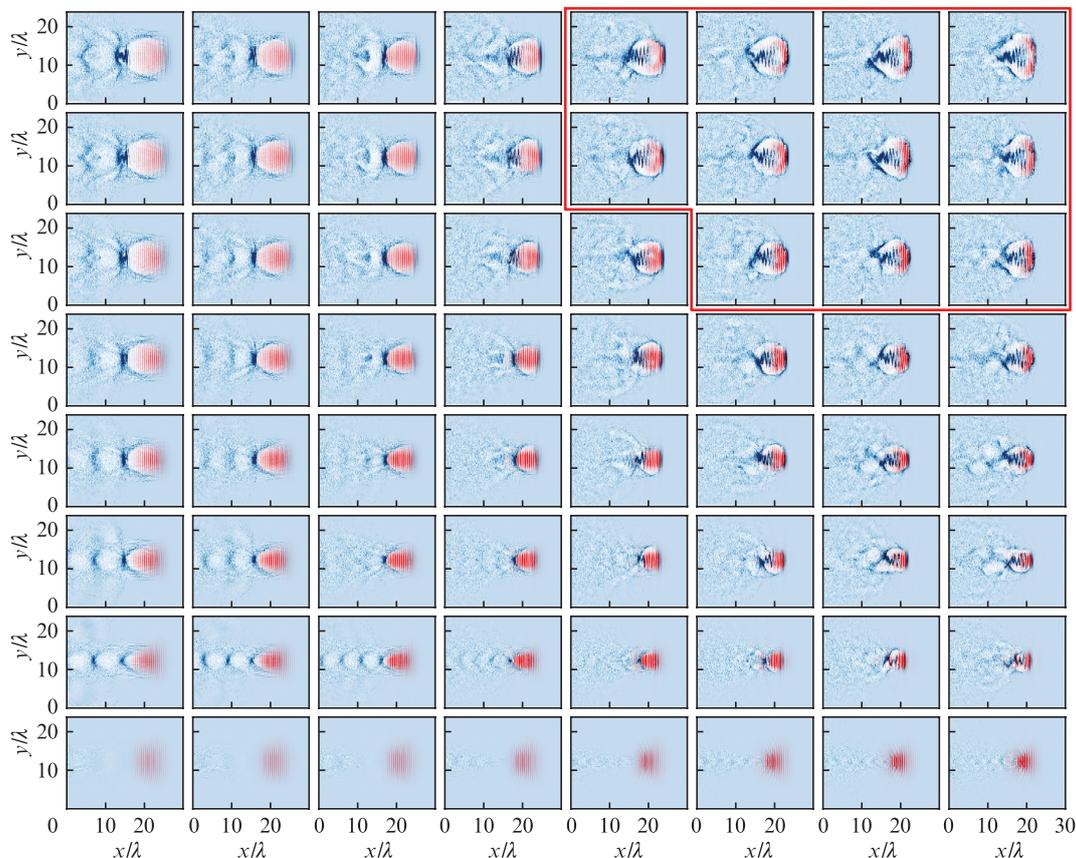


Рис.3. Распределения концентрации электронов (синий цвет) и лазерной интенсивности (красный цвет) в плоскости xu , полученные с помощью PIC-моделирования, для 64 (из 136) наборов лазерно-плазменных параметров через 60 фс после начала взаимодействия. Более яркий цвет соответствует более высокой электронной концентрации (лазерной интенсивности) и наоборот. В расчетах использовались параметры $l_x/c = 15$ фс, $l_\perp = 2.5$ мкм и $\lambda = 0.9$ мкм. Нормированная амплитуда лазерного импульса a_0 изменялась от 1 (нижний ряд) до 8 с шагом 1, а концентрация плазмы – от $0.017n_c$ (левый столбец) до $0.115n_c$ с шагом $0.014n_c$. Красной линией ограничена область, соответствующая оптимальным лазерно-плазменным параметрам (см. ниже рис.5).

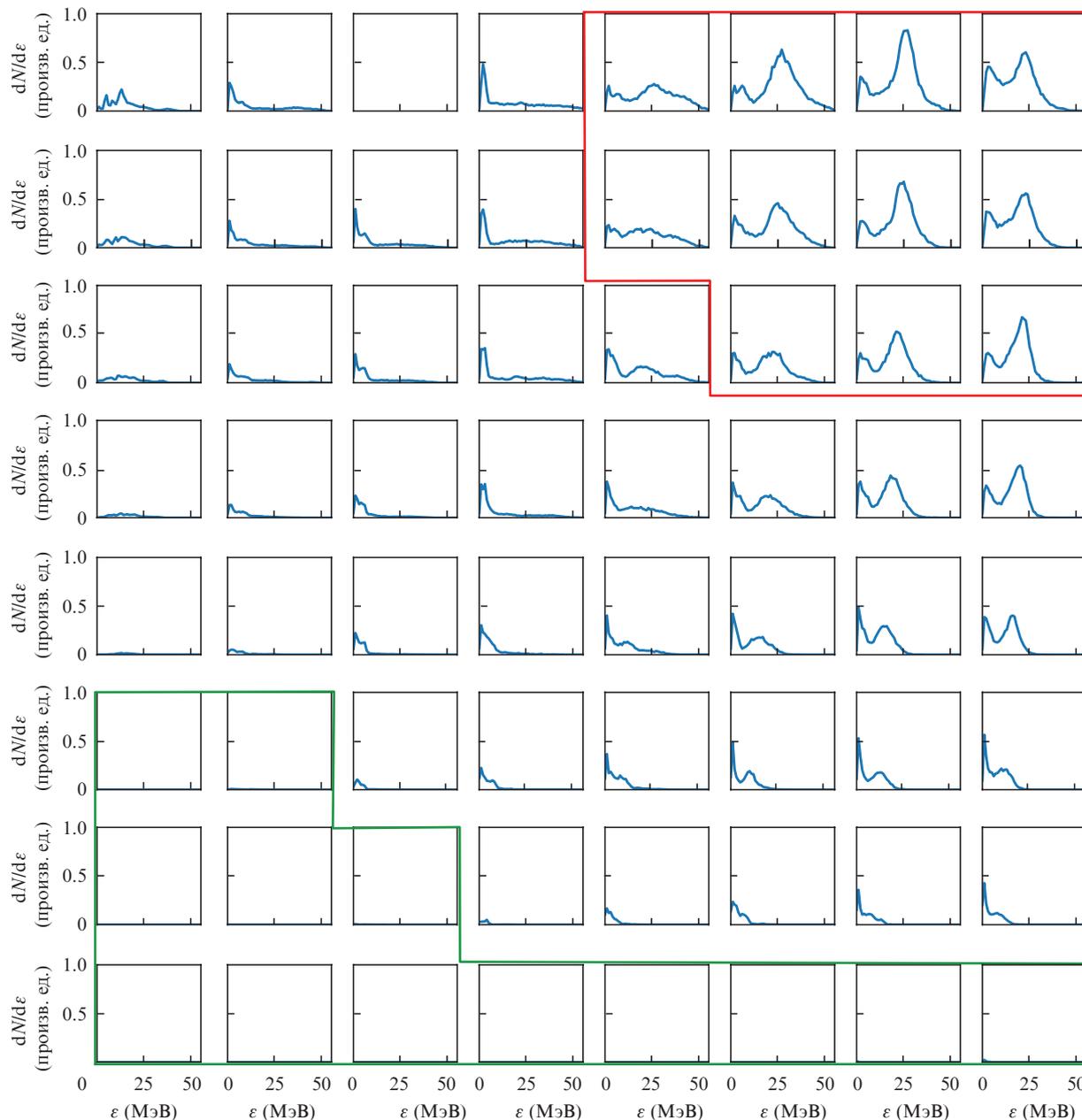


Рис.4. Спектры (распределение по энергии) электронов, ускоренных лазерным импульсом в плазме. Длина плазменного промежутка составила 21 мкм, а длина вакуумного промежутка – 30 мкм. Остальные параметры такие же, как и для рис.3. Красной линией ограничена область спектров, соответствующая оптимальным лазерно-плазменным параметрам (см. ниже рис.5), а зеленой – область с отсутствием ускоренных электронов.

дят через боковые поверхности. Таким образом, в детектор поступает лишь малая часть низкоэнергетических электронов. При численном моделировании время их движения в вакуумном промежутке составило 100 фс. На рис.4 для тех же параметров, что и для рис.3, представлены спектры электронов, достигших детектора. Видно, что спектры также сильно зависят от лазерно-плазменных параметров. При каких-то значениях этих параметров ускоренные электроны отсутствуют. При других значениях число ускоренных электронов велико. В некоторых случаях образуются сложные спектры с несколькими максимумами.

Найденные с помощью моделирования спектры ускоренных электронов $f(\epsilon)$ использовались для вычисления заряда сгустка Q , средней энергии $\langle \epsilon \rangle$ и относительного разброса по энергии $\Delta\epsilon$ электронов в сгустке:

$$Q = \int_0^\infty f(\epsilon) d\epsilon, \tag{4}$$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{Q} \int_0^\infty \epsilon f(\epsilon) d\epsilon, \tag{5}$$

$$(\Delta\epsilon)^2 = \frac{1}{Q} \int_0^\infty \left(\frac{\epsilon}{\langle \epsilon \rangle} - 1 \right)^2 f(\epsilon) d\epsilon. \tag{6}$$

В свою очередь, вычисленные значения Q , $\langle \epsilon \rangle$ и $\Delta\epsilon$ использовались в качестве входных параметров карты Кохонена с целью определения режимов взаимодействия. Входные параметры нормировались на свои максимальные значения. Обработывались результаты серии из 136 численных экспериментов.

Число режимов может быть произвольным. Мы выбрали четыре режима. Результат работы карты показан

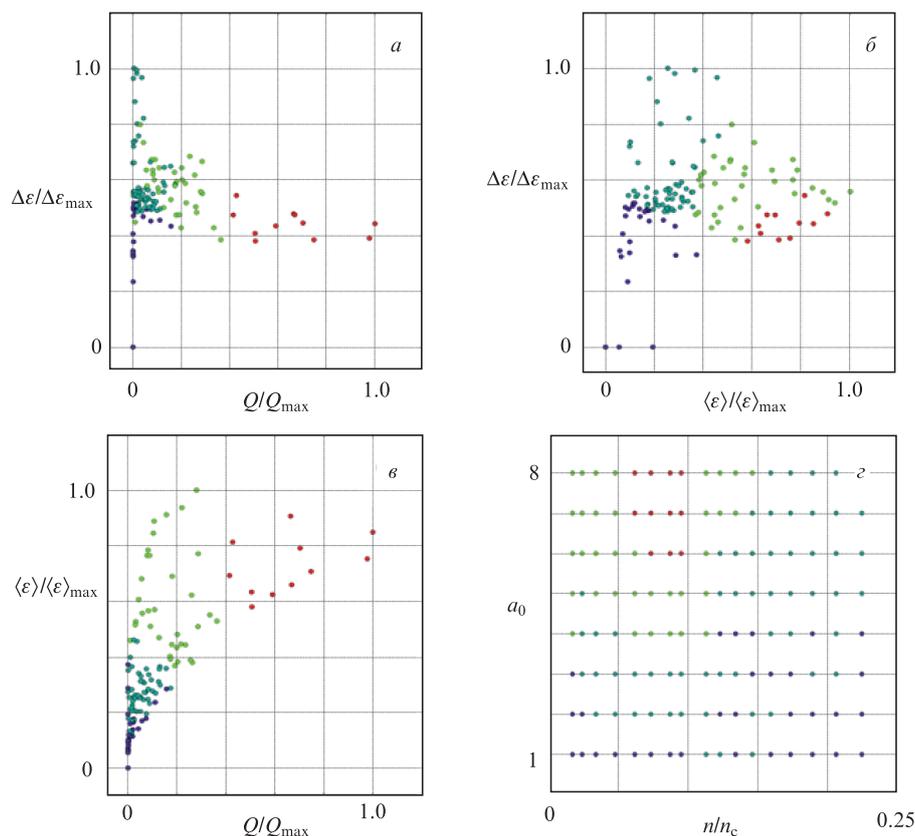


Рис.5. Параметры сгустков ускоренных электронов (выходные параметры PIC-моделирования), полученные в результате серии из 136 численных экспериментов с помощью PIC-кода и показанные на плоскостях $\Delta\varepsilon - Q$ (а), $\Delta\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle$ (б) и $\langle\varepsilon\rangle - Q$ (в), а также лазерно-плазменные параметры (входные параметры PIC-моделирования), используемые в численных экспериментах (г). Точки разного цвета соответствуют разным режимам ускорения, выявленным в результате работы карты Кохонена. Красные точки – оптимальные параметры.

на рис.5, где точки разного цвета – данные экспериментов, отвечающие разным режимам ускорения. Режимы выявлены на основе работы карты. Анализ унифицированной матрицы расстояний продемонстрировал корректность работы карты. Как видно из рис.5, карта выявила область лазерно-плазменных параметров, соответствующую режиму с малым зарядом и низкой средней энергией электронов в сгустке (синие точки); область, соответствующую режиму с большим зарядом ускоренных электронов в сгустке, имеющему к тому же высокую энергию (красные точки), а также области, соответствующие промежуточным режимам (темно-зеленые и светло-зеленые точки). Второй режим наиболее интересен для приложений. Во многих случаях (источники излучения, инжекторы частиц, ускорители и т.д.) обычно требуется большой заряд электронов в сгустке и высокая энергия частиц. Помимо прочего, второй режим характеризуется относительно небольшим разбросом по энергии ускоренных электронов, что также может быть важно для некоторых приложений.

4. Заключение

В работе исследованы возможности машинного обучения на основе самоорганизующейся карты Кохонена для анализа результатов численного моделирования лазерно-плазменного взаимодействия. В частности, рассматривалась способность используемого алгоритма выявлять различные режимы ускорения электронов лазерным импульсом, распространяющимся в плазме. Моделиро-

вание проводилось с помощью трехмерного релятивистского PIC-кода при следующих упрощающих предположениях: размеры лазерных импульсов, область расчета и время взаимодействия были достаточно малы, чтобы сократить время расчета и выполнить как можно больше численных экспериментов в широких областях лазерно-плазменных параметров. Всего было проведено 136 расчетов для различных значений амплитуды лазерного импульса и концентрации плазмы. В качестве результатов моделирования для каждого набора лазерно-плазменных параметров вычислялись заряд, средняя энергия и средний разброс по энергии ускоренных электронов в сгустке, которые служили набором входных параметров для карты Кохонена. Еще один входной параметр – число возможных режимов взаимодействия. В нашем случае рассматривались четыре режима. В результате работы карты был выявлен режим с большим зарядом сгустка, высокой средней энергией электронов и относительно малым разбросом их по энергии. Такой режим оптимален для приложений. Выявлены также режим с малым зарядом и низкой энергией и промежуточные режимы. Визуальный анализ полученных в численных экспериментах данных показал разумность результата работы карты.

Следует отметить, что на данном этапе поиск новых режимов лазерно-плазменного ускорения электронов не был целью настоящей работы. Ее основная цель заключалась в исследовании возможностей методов машинного обучения для выявления таких режимов. Поэтому для ускорения расчетов при моделировании использовались достаточно короткие и сильно сфокусированные импуль-

сы лазерного излучения, а концентрация плазмы была высокой, чтобы сократить время ускорения. В дальнейшем предполагается применить разработанный алгоритм на основе карты Кохонена для анализа численных экспериментов с более реалистичными параметрами, требующими, однако, более серьезных компьютерных ресурсов. Более того, поскольку пространство выходных параметров (заряд сгустка, средняя энергия электронов в сгустке, их разброс по энергии) было трехмерным, то для выявления режимов ускорения возможен (хотя и не удобен, по сравнению с двумерным пространством параметров) визуальный анализ. В последующих работах мы предполагаем рассматривать пространство параметров, размерность которого больше трех (например, добавляя спиновую деполяризацию, угловой разброс или эмитанс сгустка ускоренных электронов). В этом случае визуальный анализ становится неэффективным. В будущем предполагается также исследовать возможности других методов машинного обучения.

Работа выполнена в рамках программы НЦМУ «Центр фотоники» при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2020-906).

1. Esarey E., Schroeder C.B., Leemans W.P. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 1229 (2009).
2. Костюков И.Ю., Пухов А.М. *УФН*, **185**, 89 (2015) [*Phys. Usp.*, **58**, 81 (2015)].
3. Gonsalves A.J. et al. *Phys. Rev. Lett.*, **122**, 084801 (2019).
4. <https://www6.slac.stanford.edu/>.
5. Weikum M.K. et al. *J. Phys. Conf. Ser.*, **1350**, 012059 (2019).
6. Assmann R.W. et al. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, **229**, 3675 (2020).
7. Pukhov A., Meyer-ter-Vehn J. *Appl. Phys. B*, **74**, 355 (2002).
8. Kiselev S., Pukhov A., Kostyukov I. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 135004 (2004).
9. Zhidkov A., Fujii T., Nemoto K. *Phys. Rev. E*, **78**, 03640 (2008).
10. Nerush E.N., Kostyukov I.Yu. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 035001 (2009).
11. Pukhov A., Jansen O., Tueckmantel T., Thomas J., Kostyukov I.Yu. *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 245003 (2014).
12. Brink H., Richards J.W., Fetherolf M., Cronin B. *Real-world Machine Learning* (New York: Manning, 2017).
13. Carleo G. et al. *Rev. Mod. Phys.*, **91**, 045002 (2019).
14. Mehta P. et al. *Phys. Rep.*, **810**, 1 (2019).
15. Inguva P. et al. *Data-Centric Engineering*, **1**, e13 (2020).
16. Wang M., Hemati M.S. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, **33**, 235 (2019).
17. Colvert B., Alsalman M., Kanso E. *Bioinspiration Biomimetics*, **13**, 025003 (2018).
18. Bishop C.M. *Pattern Recognition and Machine Learning* (Springer, 2006).
19. Breiman L. *Machine Learning*, **45**, 5 (2001).
20. Ramsundar B., Zadeh R.B. *Tensor Flow for Deep Learning* (O'Reilly Media Inc., 2018).
21. Rodimkov Y. et al. *Entropy*, **23**, 21 (2021).
22. Gonoskov A. et al. *Sci. Rep.*, **9** (1), 7043 (2019).
23. Shaloo R.J. et al. *Nat. Commun.*, **11** (1), 6355 (2020).
24. Kohonen T. *Self-Organizing Maps* (New York: Springer, 2001).
25. <https://github.com/QUILL-PIC/Quill>.