Моделирование рассеяния волн на объемных объектах и применение в физически обоснованной нейросетевой архитектуре

Выполнили: Кривцов И.А., Смирнова М.А., Знаменский Н.Е.

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Что исследовали

- Анализ физики дифракции Френеля и рассеяния Ми
- Разработка численного моделирования рассеяния с помощью PyMeep (FDTD)
- Создание физически обоснованной нейросети для оптической дифракционной томографии

Как исследовали

Теоретический анализ

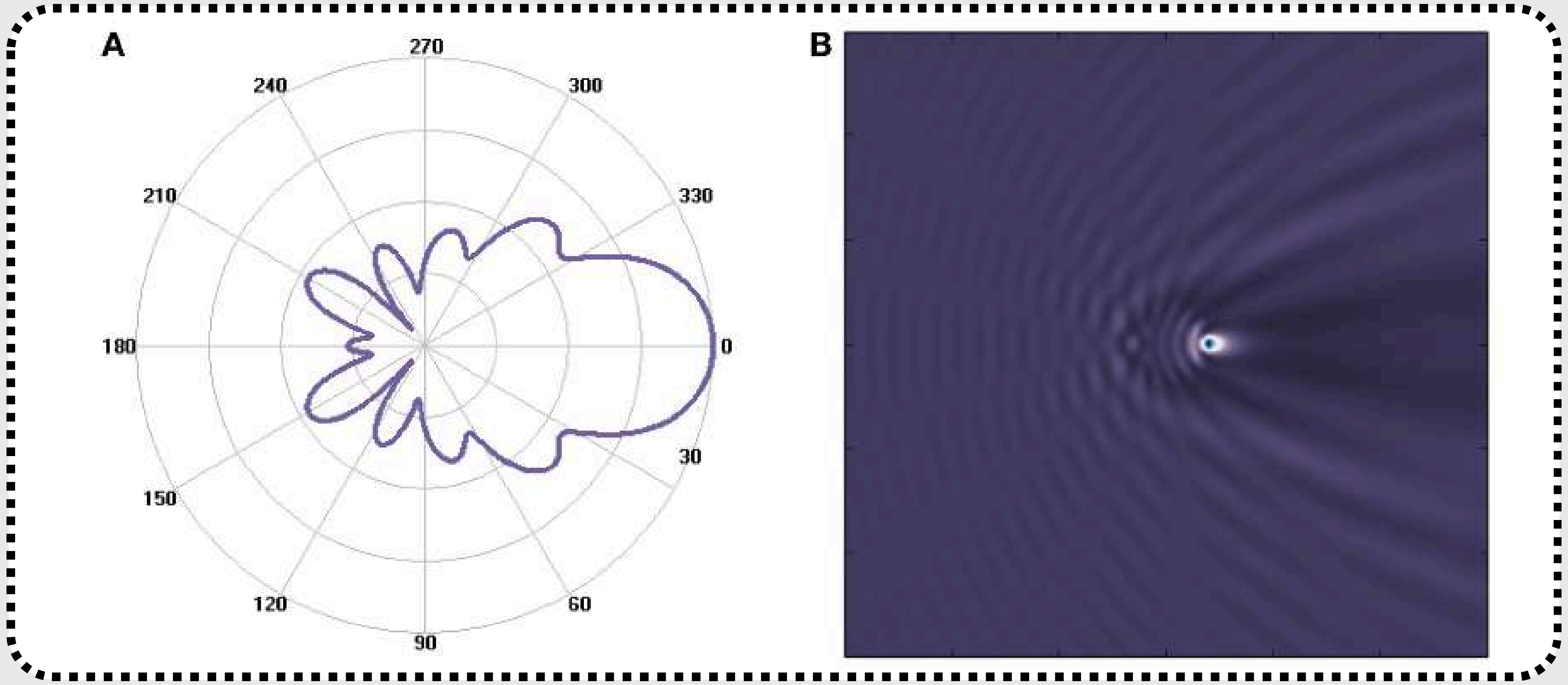
Выведение формул
Френеля и Мие

Моделирование с PyMeep

Инициализация среды,
задание геометрии,
источников
Запуск FDTD-цикла
Сбор результатов

Разработка нейросети

Построение на основе U-Net
с физической функцией
потерь



Основной цикл моделирования

Ядро Meep основано на методе конечных разностей во временной области (FDTD, Finite-Difference Time-Domain)

Основной цикл FDTD содержит следующие шаги:

1. *Обновление магнитного поля H :*

$$\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k) - \frac{\Delta t}{\mu(i,j,k)}\left(\nabla \times \mathbf{E}^{n}\right)(i,j,k)$$

2. *Применение источников к H (при необходимости)*

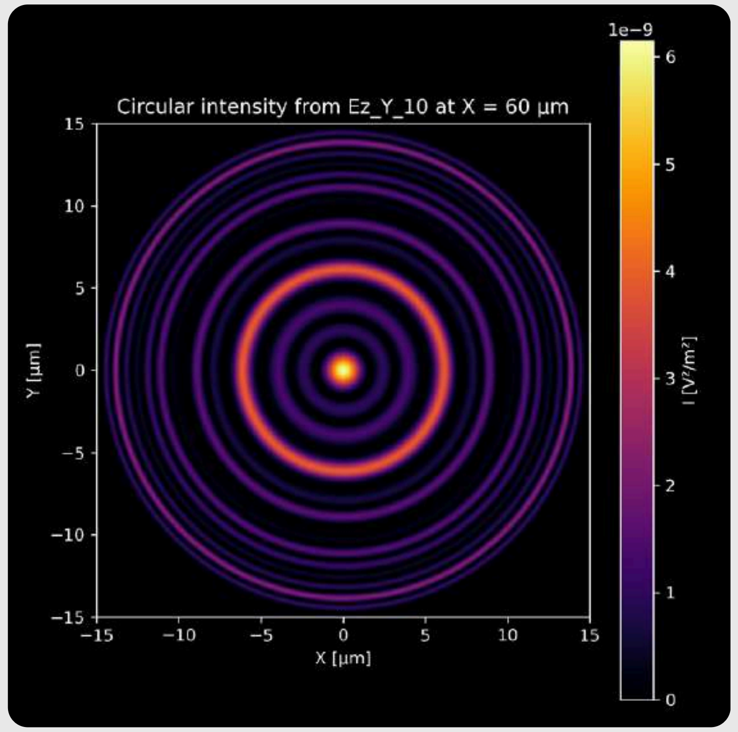
3. *Обновление электрического поля E :*

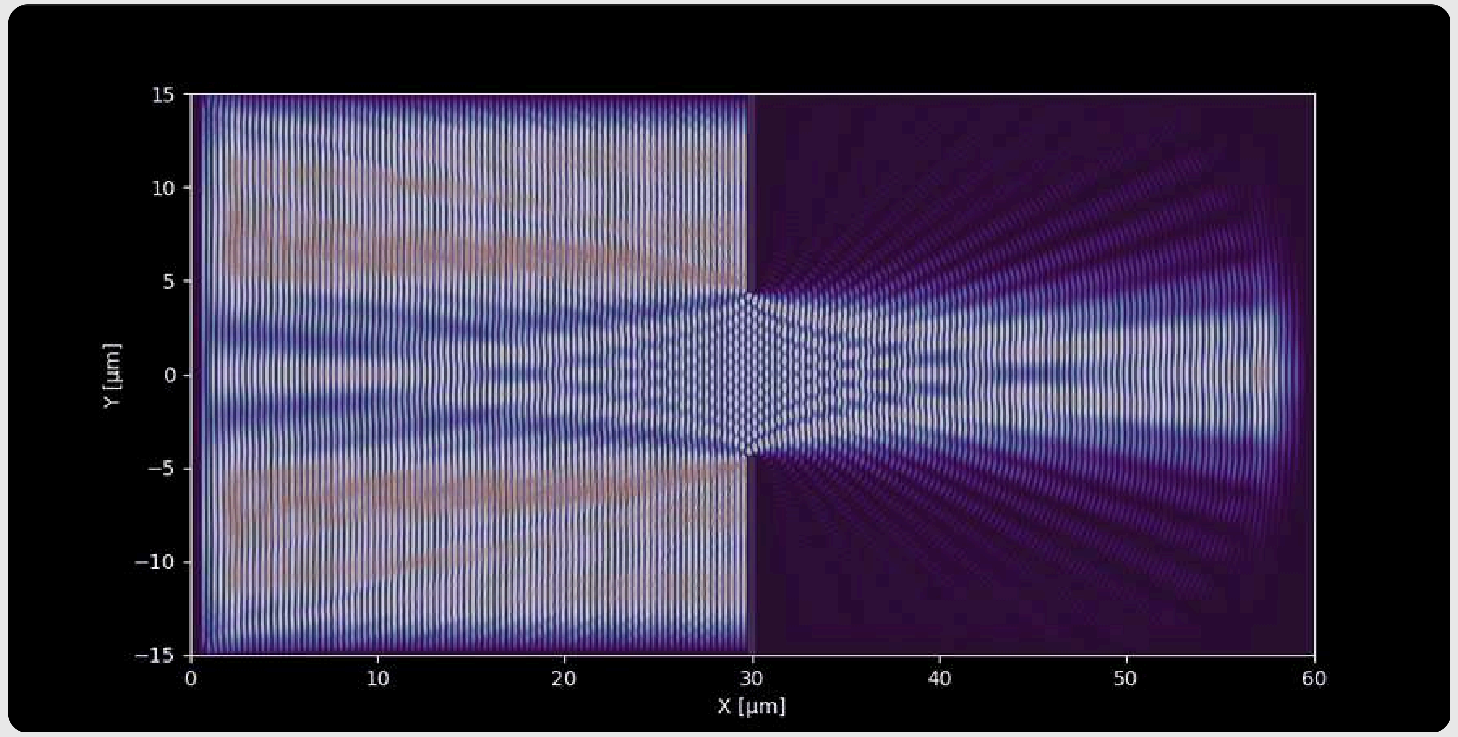
$$\mathbf{E}^{n+1}(i,j,k) = \mathbf{E}^{n}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)}\left(\nabla \times \mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - \mathbf{J}(i,j,k)\right)$$

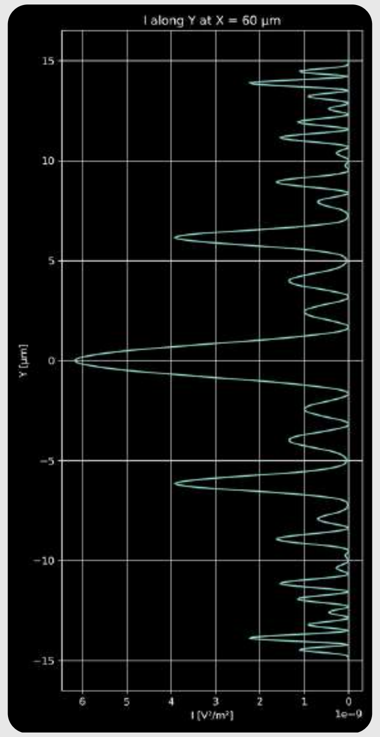
4. *Обновление $t = t + \Delta t$, $n = n + 1$*

Моделирование с PyMeep

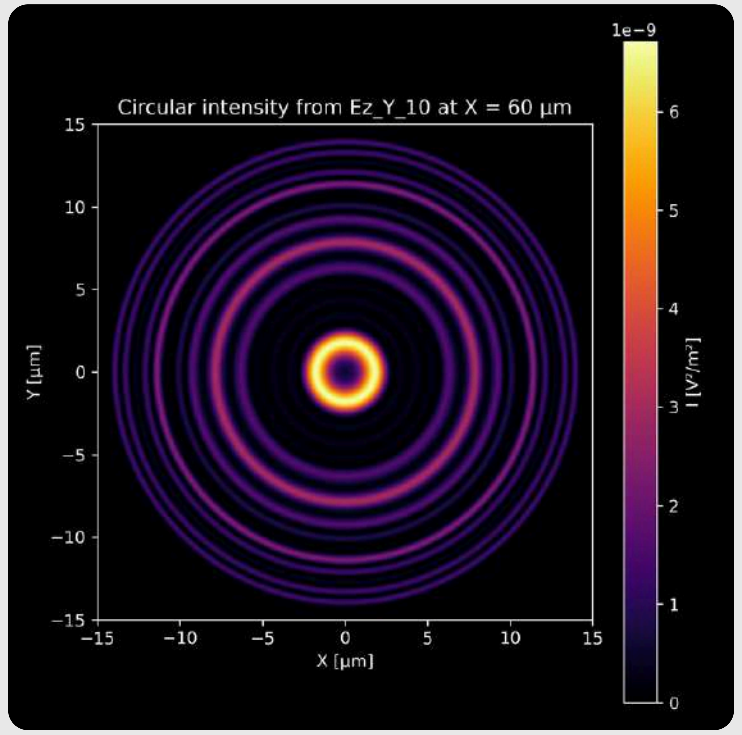
Дифракция на одной щели (нечетное число зон Френеля)

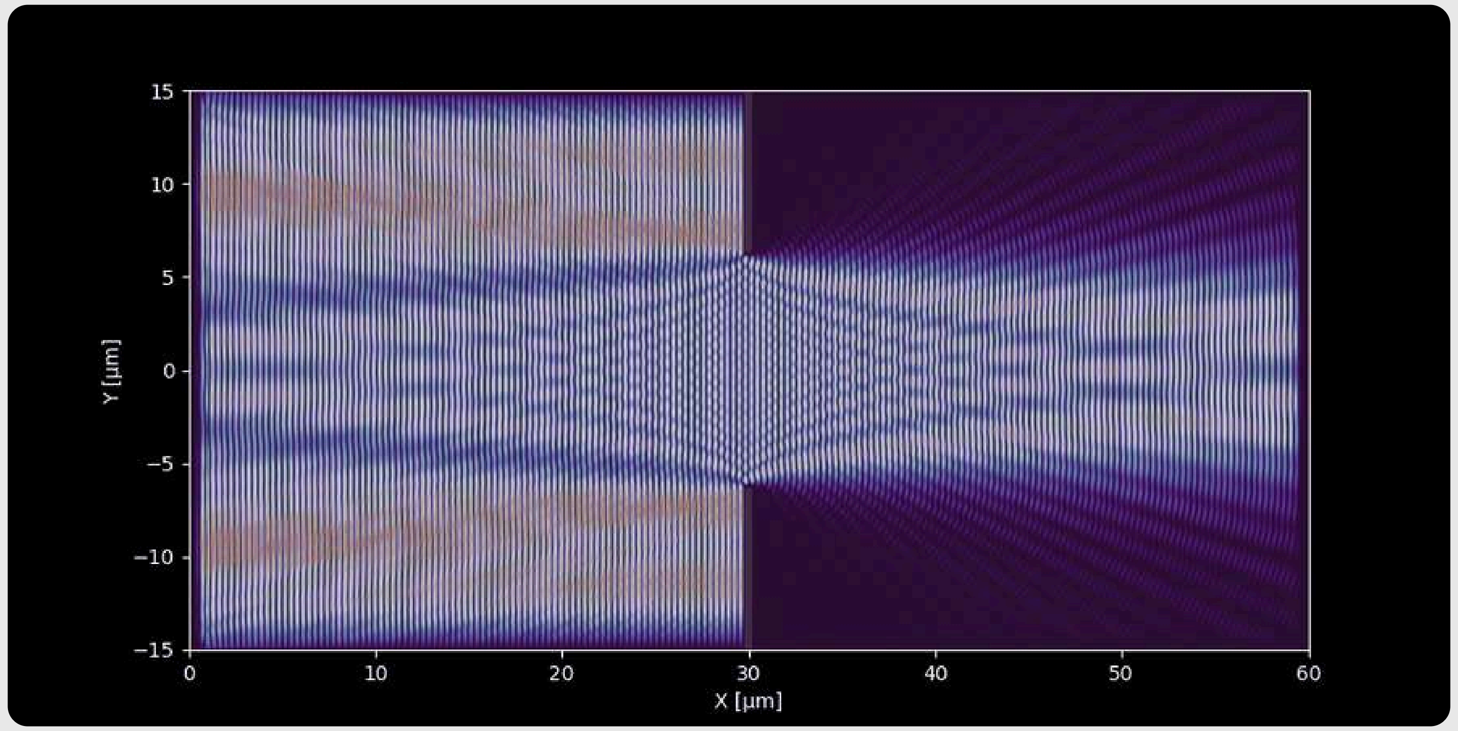


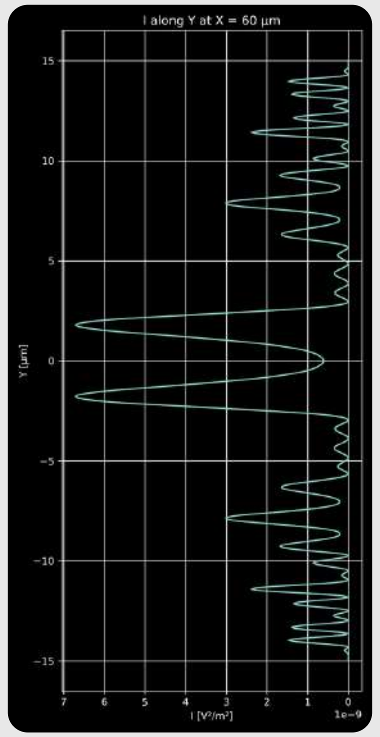




Дифракция на одной щели (четное число зон Френеля)

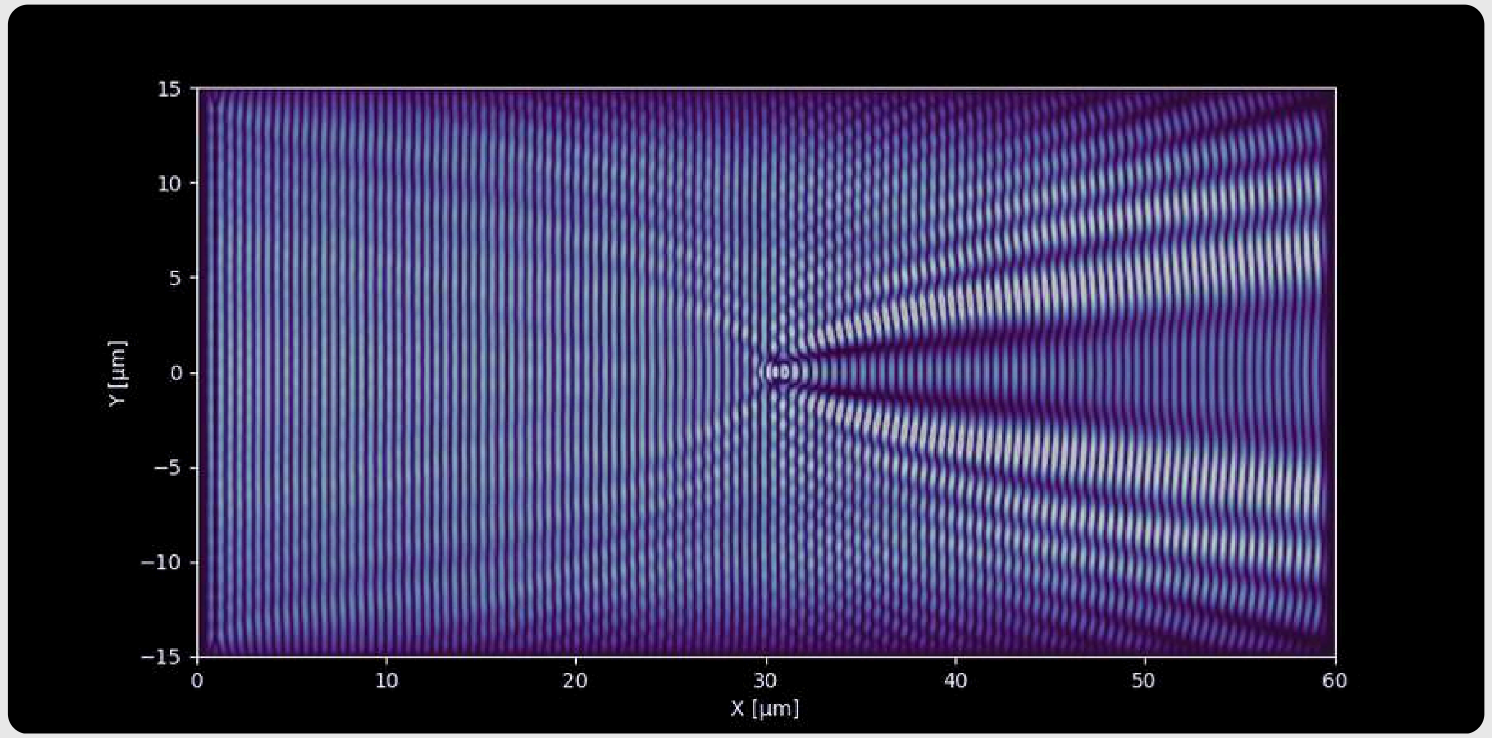


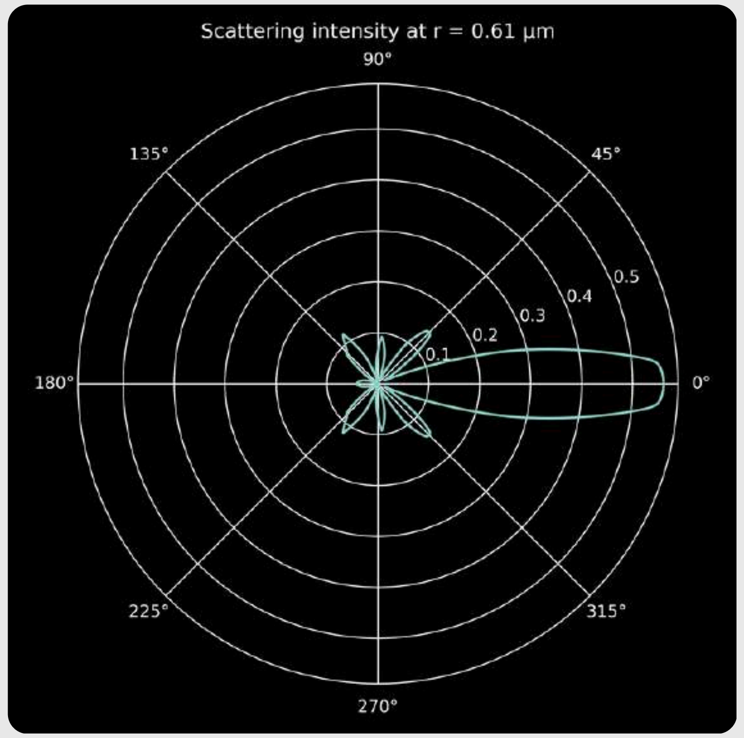




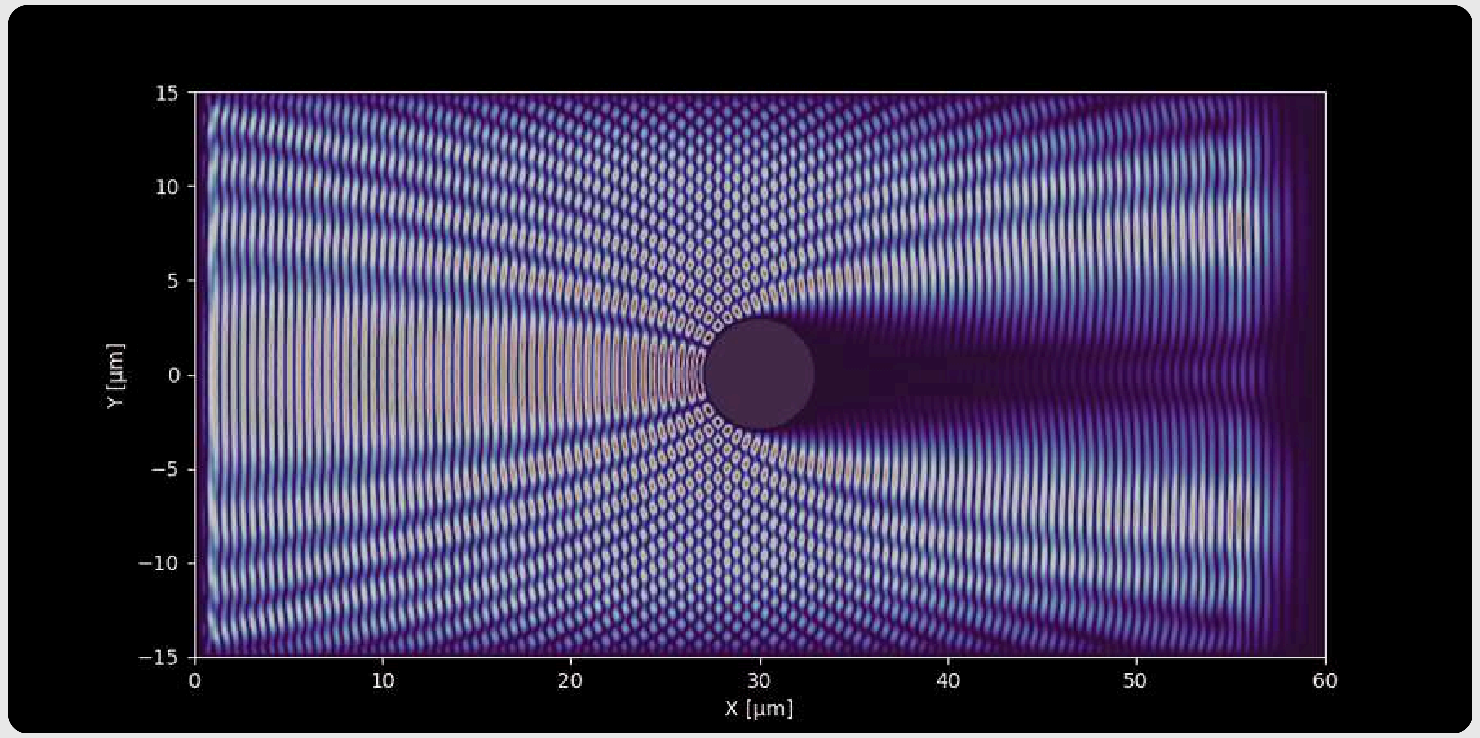
Моделирование с PyMeep

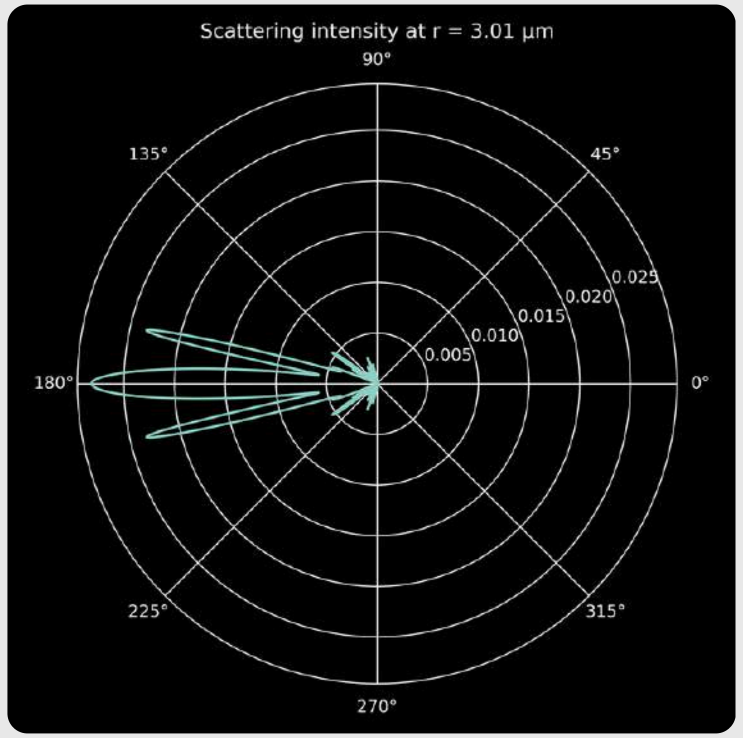
Рассеяние Mie (на сфере с малым показателем ε)



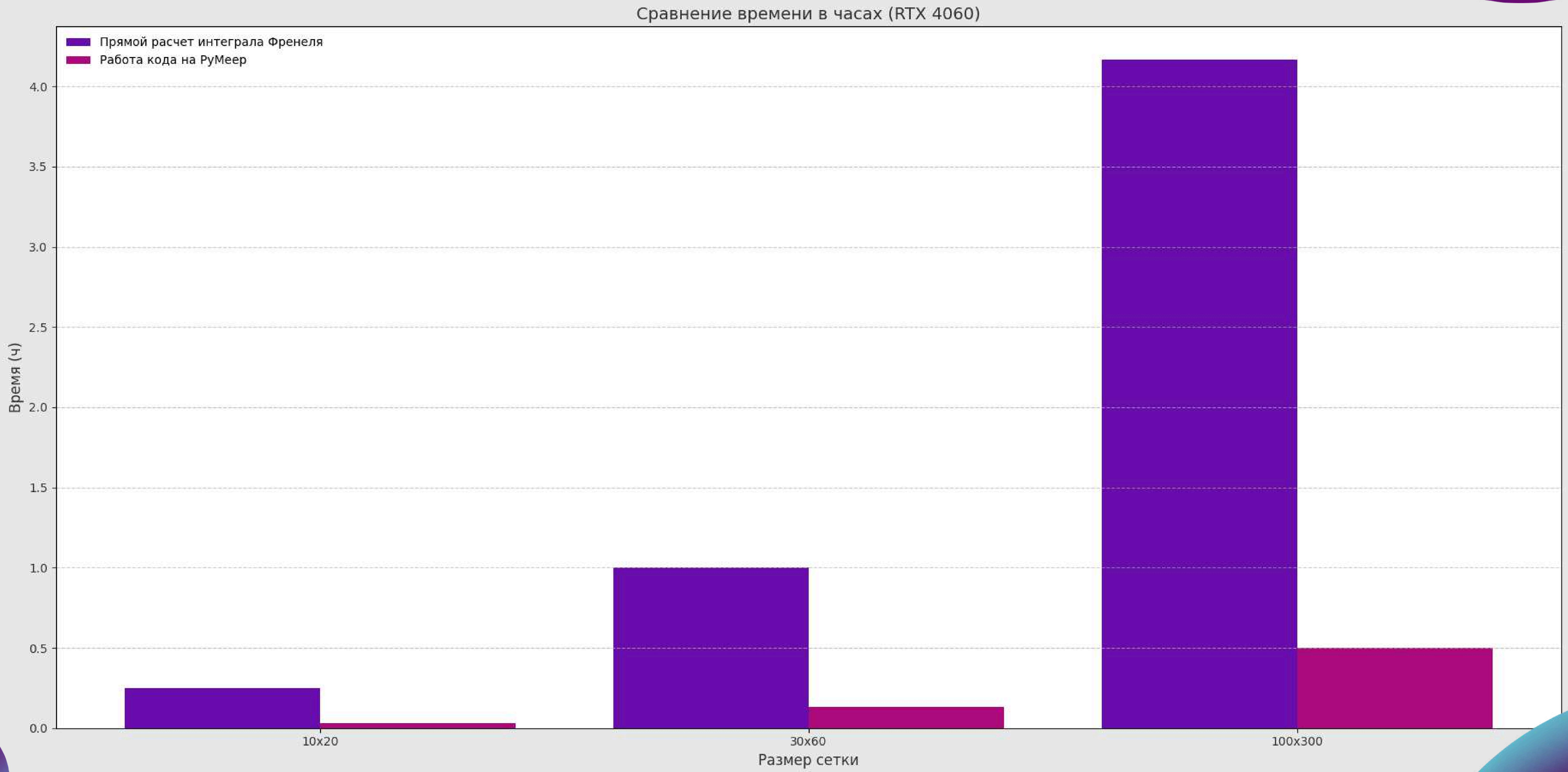


Дифракция на сфере





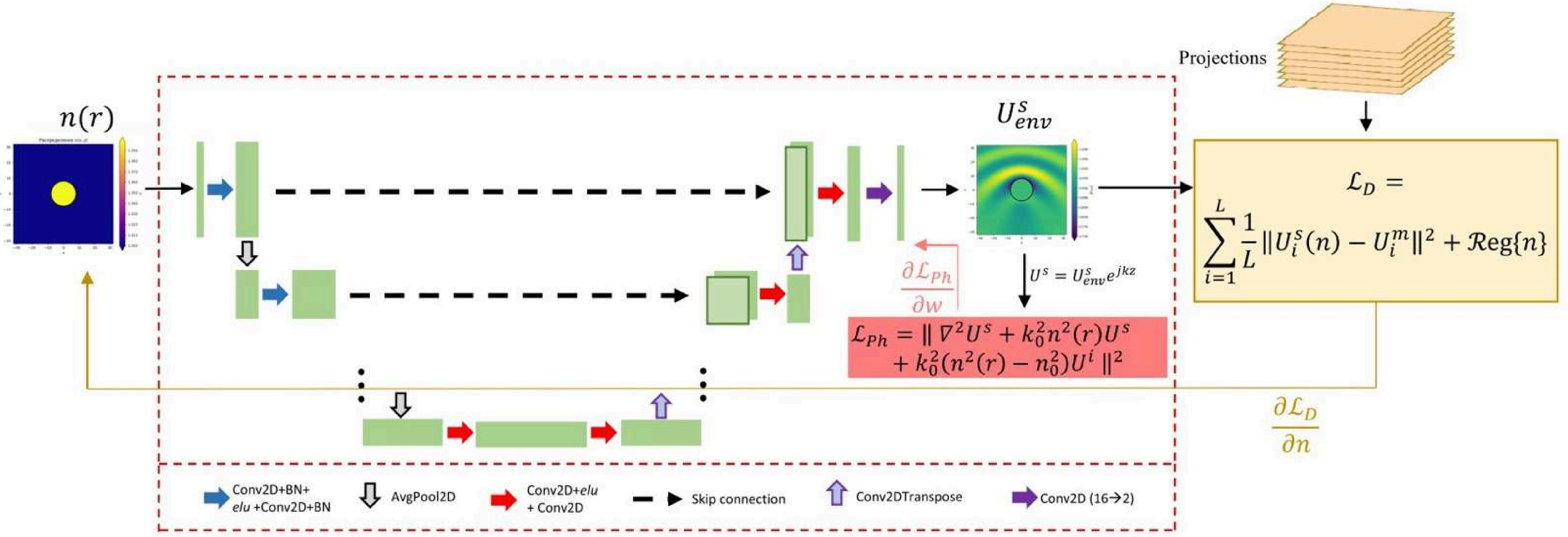
Анализ времени работы



Физически обоснованная нейросеть (Physics-Informed Neural Network)

За основу взята архитектура, где функция потерь вычисляется через уравнение Гельмгольца

Нейросеть принимает на вход трёхмерное распределение показателя преломления n(r) и предсказывает рассеянное поле Us(r)



Сравнение нейросети с классическим обучением

Классический метод (Supervised Learning):
Тренировка на размеченных парах «вход → выход»

$$L_{\text{MSE}} = \frac{1}{N} \sum_{r} \left\| U_{\text{pred}}(r) - U_{\text{true}}(r) \right\|^2$$

Наш подход (Physics-Informed Learning):
Минимизация остатка уравнения Гельмгольца

$$L_{\text{Ph}} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{N} \left\| \left[\nabla^2 + k_0^2 n^2(\mathbf{r})\right] U^s(\mathbf{r}) + k_0^2 \left[n^2(\mathbf{r}) - n_0^2\right] U^i(\mathbf{r}) \right\|^2$$

Преимущества Physics-Informed Learning:

Экономия данных:

- Не требуется множества помеченных примеров U_{true}
- Достаточно знать распределение n(r) и физический закон

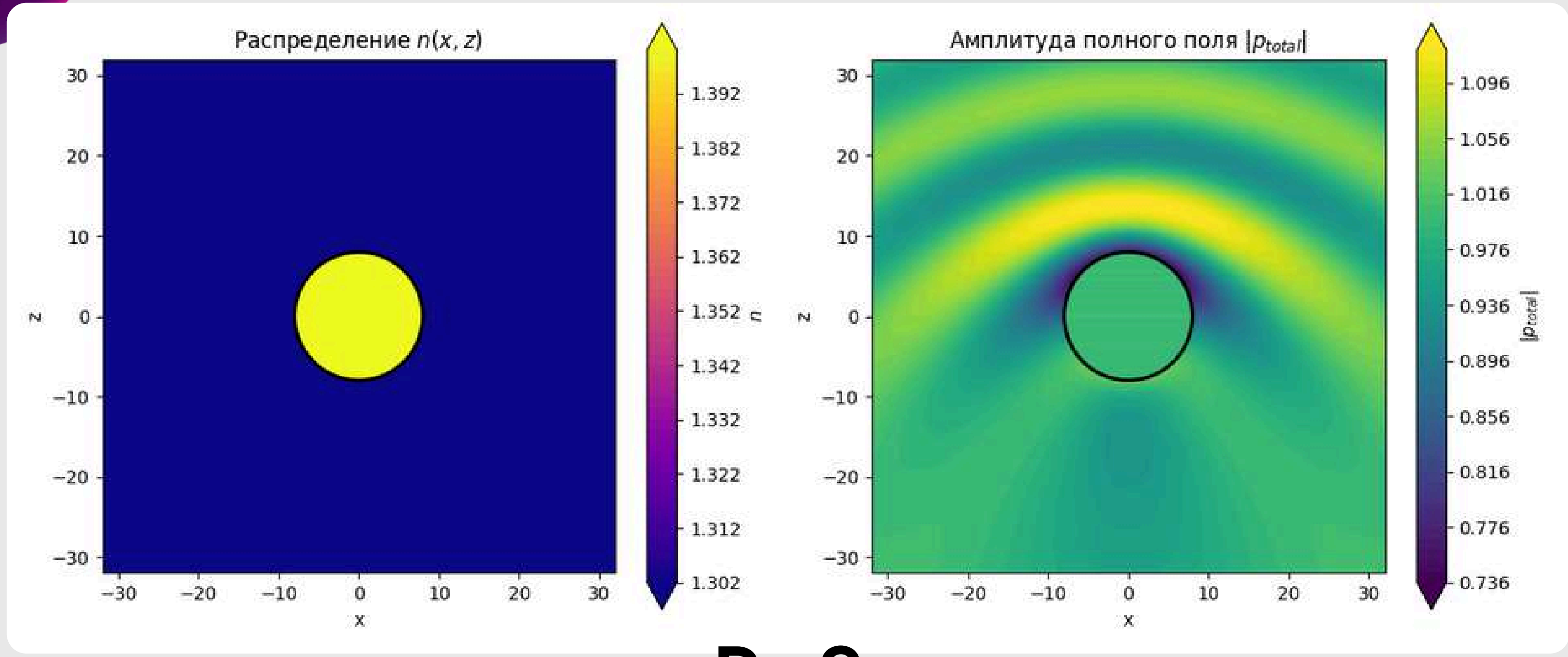
Ускорение вычислений:

- Тренировка без генерации «истинных» полей для каждого n(r)
- Автодифференциация уравнения экономит этап предварительной симуляции

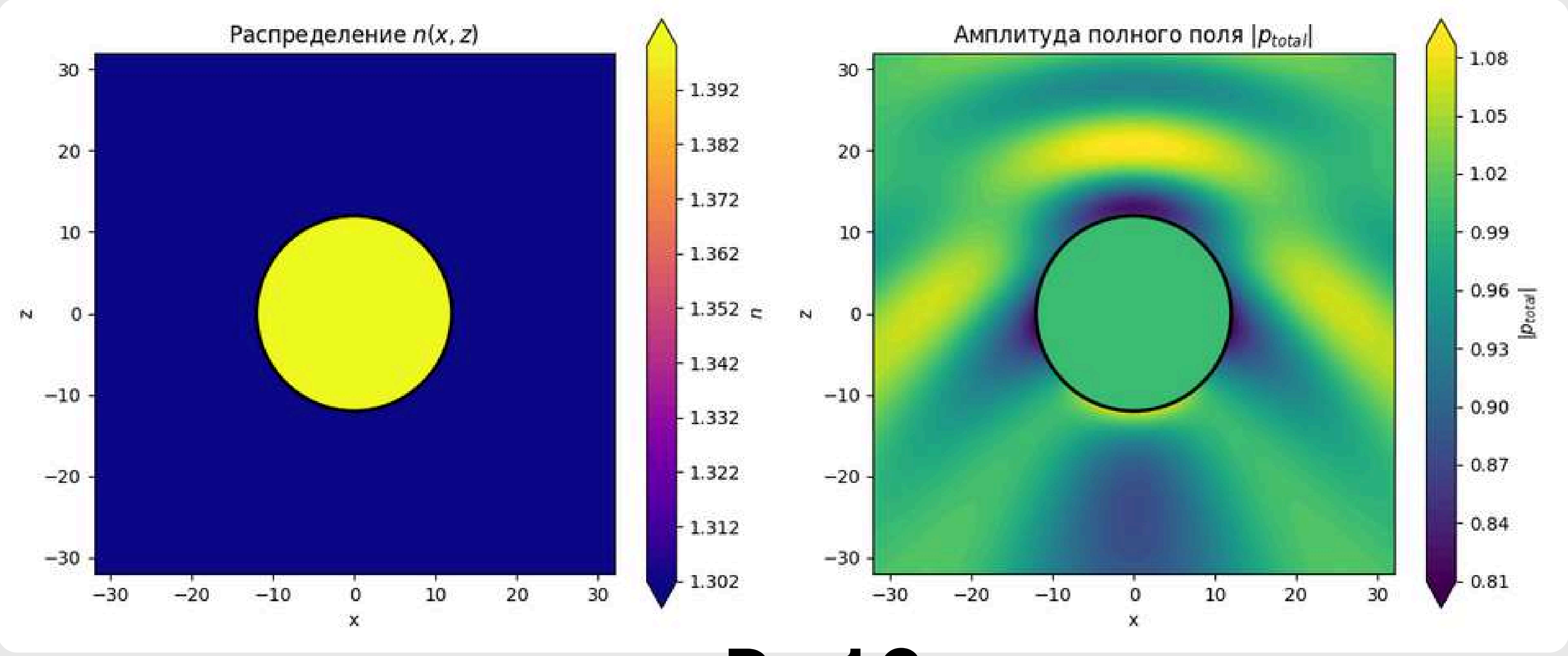
Сохранение физической точности:

- Условие «остаток = 0» гарантирует, что поле удовлетворяет Гельмгольцу.
- Возможность добавлять шум, ограниченные наблюдения

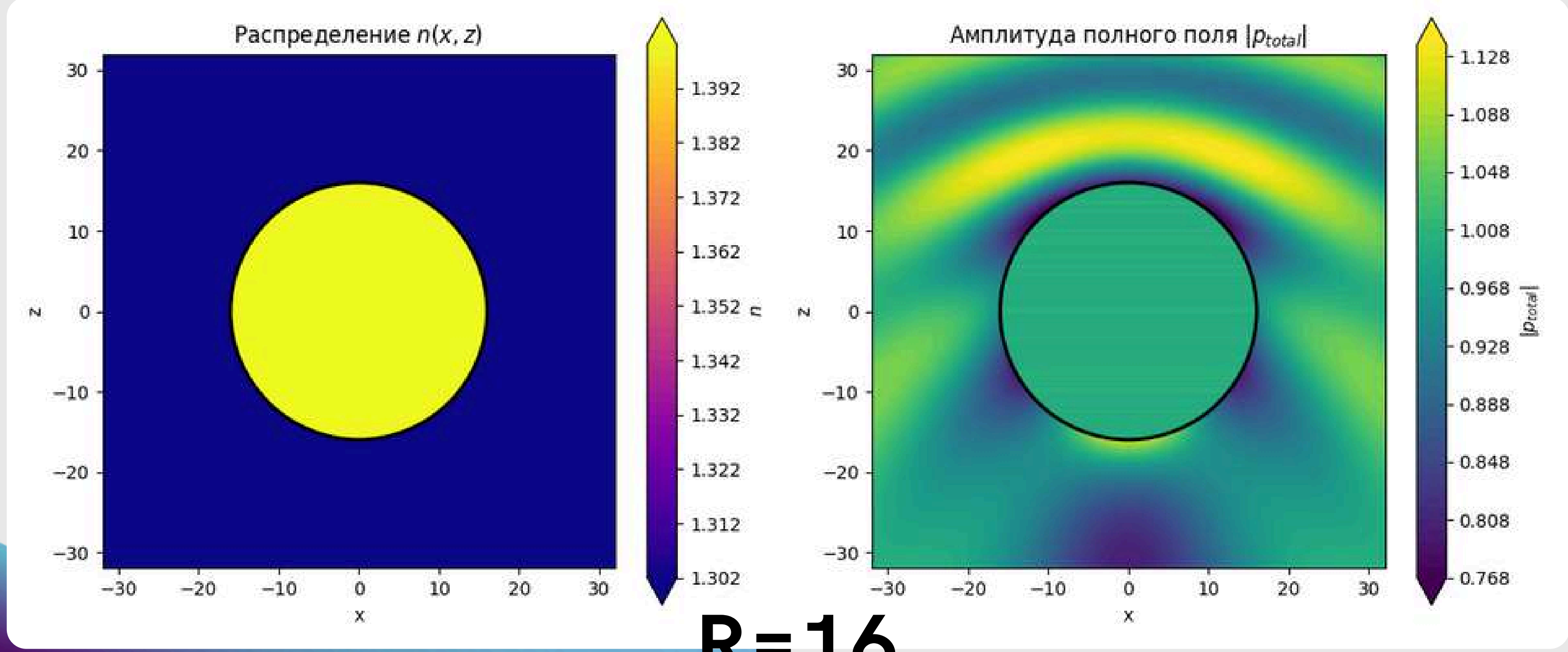
Результаты работы нейросети



R=8



R=12



R=16

Сравнение с теорией

- Моделируемый диапазон рассеяния соответствует классической теории Ми, включая графики интенсивности
- Положение минимумов и максимумов интенсивности совпадает с аналитическими предсказаниями
- Нейросеть воспроизводит решения уравнения Гельмгольца без использования прямых эталонных данных

Выводы

- Разработана и реализована эффективная модель численного моделирования рассеяния электромагнитных волн в среде с помощью библиотеки PyMeep, обеспечивающая высокую точность и масштабируемость расчетов
- Построена физически обоснованная нейросетевая архитектура для восстановления распределения электромагнитного поля. Модель не требует знания аналитического решения и обобщает поведение поля вне обучающей выборки
- Проведено сравнение скорости вычислений: код на PyMeep демонстрирует кратное ускорение по сравнению с прямым численным расчетом интеграла Френеля, особенно на больших размерах сетки. Это подтверждает эффективность предложенного подхода как в плане точности, так и производительности

Спасибо за внимание