

УДК 539.16, 546.7, 519.6

**АНАЛИЗ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА РАДИОАКТИВНЫХ ОБРАЗЦОВ
С ПОМОЩЬЮ ЭВОЛЮЦИОННОГО АЛГОРИТМА****В.Ю. Корда, А.С. Молев, Л.П. Корда***Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины, 61002, Харьков, ул. Чернышевского, 28, а.я. 8812*
Поступила в редакцию 10 января 2007 г.

Разработан эволюционный алгоритм с дополнительным поворотом распределения вероятности нормально распределенной многомерной случайной величины. Предложенный алгоритм оказывается способным исследовать очень сложные по топологии пространства параметров оптимизационных задач. Алгоритм применен для решения задачи об определении компонентного состава радиоактивных образцов. Программное обеспечение, созданное на основе нового эволюционного алгоритма, можно использовать для усовершенствования существующих и разработки новых систем диагностики, контроля и прогнозирования состояния радиоактивных отходов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: радиоактивные отходы, радиоактивный распад, эволюционный алгоритм.

Одной из важнейших проблем, стоящих перед современной ядерной энергетикой является проблема безопасного хранения и утилизации радиоактивных отходов. Неотъемлемой составной частью решения этой проблемы является динамический контроль состояния радиоактивных отходов в хранилищах и возможность прогнозирования изменения состояния и состава отходов с течением времени.

Принципиальная возможность динамического контроля компонентного состава радиоактивных образцов обусловлена тем, что зависимость полной активности радиоактивного образца от времени определяется законом радиоактивного распада. Динамически контролируя полную активность образца и оптимизируя параметры закона радиоактивного распада для совокупности различных изотопов радиоактивных ядер, мы имеем возможность определить количество радиоактивных ядер данного сорта в любой (будущий) момент времени и постоянные радиоактивного распада этих ядер.

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Закон радиоактивного распада для системы, содержащей ядра n различных радиоактивных элементов, имеет вид

$$N(t) = \sum_{i=1}^n N_i(0) \cdot \exp(-\alpha_i t), \quad (1)$$

где $N(t)$ - общее количество радиоактивных ядер (полная активность) в текущий момент времени t , $N_i(0)$ - количество радиоактивных ядер i -го сорта (активность) в начальный момент времени, α_i - постоянная радиоактивного распада ядер i -го сорта.

Если измерить зависимость полной активности радиоактивного образца от времени $N(t)$ за достаточно продолжительный период времени T , то с помощью подбора параметров правой части равенства (1) появляется принципиальная возможность определить компонентный состав изучаемого образца в начальный момент времени $N_i(0)$. Действительно, если экспериментально измеренную полную активность образца смоделировать формулой

$$N^{\text{exp}}(t) = \sum_{i=1}^{n^{\text{exp}}} N_i^{\text{exp}}(0) \cdot \exp(-\alpha_i^{\text{exp}} t), \quad (2)$$

а теоретически рассчитанную полную активность искать в виде

$$N^{\text{theor}}(t) = \sum_{i=1}^{n^{\text{theor}}} N_i^{\text{theor}}(0) \cdot \exp(-\alpha_i^{\text{theor}} t), \quad (3)$$

где $N_i^{\text{theor}}(0)$, α_i^{theor} и n^{theor} рассматриваются как свободные параметры, то величины этих параметров совпадут с соответствующими величинами параметров из формулы (2)

$$\begin{aligned} N_i^{\text{theor}}(0) &= N_i^{\text{exp}}(0), \\ \alpha_i^{\text{theor}} &= \alpha_i^{\text{exp}}, \\ n^{\text{theor}} &= n^{\text{exp}}, \end{aligned} \quad (4)$$

в случае, когда, например, величина

$$F(t) \equiv [N^{theor}(t) - N^{exp}(t)]^2, \quad (5)$$

обратится в нуль для всех значений параметра t из диапазона $0 \leq t \leq T$.

ЭВОЛЮЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ

Поиск функции $N^{theor}(t)$, для которой $F(t)$ принимает минимальные значения для всех возможных t , можно осуществить многими способами. В частности, можно применить метод наименьших квадратов. Однако этот метод может давать ошибочные результаты, обусловленные традиционными проблемами численных расчетов, в том числе, возникающими при численном обращении матриц. Для рассматриваемой нами задачи ошибки возникают в наиболее важных случаях, когда несколько радиоактивных элементов либо имеют очень большие периоды полураспада, либо их времена жизни сильно различаются, либо их начальные активности отличаются мало.

Поэтому для решения сформулированной задачи необходимо выбрать метод, который позволяет избежать ошибок, связанных с традиционными проблемами численных расчетов. На наш взгляд именно таким подходом может оказаться эволюционный алгоритм [1-5]. В случае поиска оптимальных величин вещественных параметров эволюционный алгоритм представляется следующей схемой [6,7].

Популяция состоит из N особей. Каждая особь содержит пару действительных векторов (x_i, ξ_i) ($i = 1, \dots, m$, m - количество свободных параметров). Во время репликации каждая особь производит M потомков согласно формуле

$$\begin{aligned} x_i' &= x_i + \xi_i \cdot N(0,1), \\ \xi_i' &= \xi_i \cdot \exp(A \cdot N(0,1)), \end{aligned} \quad (6)$$

где ξ_i - амплитуда прыжка в i -м направлении, $N(0,1)$ - нормально распределенная случайная величина с нулевым средним и единичным стандартным отклонением, A - параметр интенсивности обучения. После репликации из популяции в $N \cdot M$ особей-потомков выбираются N самых приспособленных, которые и формируют новую популяцию вместо предыдущей. Приспособленность определяется по минимуму (или максимуму) целевой функции. Один такой цикл называется поколением.

Рассмотрим в качестве примера образец, который содержит смесь двух радиоактивных изотопов. Тогда “экспериментальную” зависимость активности образца смоделируем следующим образом

$$N^{exp}(t) = N_1^{exp}(0) \cdot \exp(-\alpha_1^{exp} t) + N_2^{exp}(0) \cdot \exp(-\alpha_2^{exp} t), \quad (7)$$

а модель “теоретической” полной активности будем искать в виде

$$N^{theor}(t) = N_1^{theor}(0) \cdot \exp(-\alpha_1^{theor} t) + N_2^{theor}(0) \cdot \exp(-\alpha_2^{theor} t). \quad (8)$$

Целевую функцию определим формулой

$$F \equiv \sum_{i=1}^{100} [N^{theor}(t_i) - N^{exp}(t_i)]^2, \quad (9)$$

где $t_i = 0,1 \cdot (i-1)$. Минимум этой функции предоставит информацию о составе образца.

Для конкретных тестов алгоритма выберем следующие величины “экспериментальных” параметров

$$\begin{aligned} N_1^{exp}(0) &= 1,5, \\ \alpha_1^{exp} &= 4,2 \cdot 10^{-1}, \\ N_2^{exp}(0) &= 1,1, \\ \alpha_2^{exp} &= 5,9 \cdot 10^{-7}. \end{aligned} \quad (10)$$

Каждое исполнение алгоритма осуществляется с использованием новой последовательности псевдослучайных чисел. Поэтому для анализа достоверности получаемых результатов необходимо выполнить несколько независимых исполнений алгоритма. На рис. 1 показана динамика зависимости целевой функции (9) наилучшей особи в популяции от числа поколений для 5 независимых исполнений описанного алгоритма с законом репликации (6). Численность популяции – 30 особей, каждая из которых производит 10 потомков. Рис. 2 демонстрирует среднее значение величины F и ее среднее квадратичное отклонение от среднего значения в популяции. Эволюция параметров $N_{1,2}^{theor}(0)$ и $\alpha_{1,2}^{theor}$, относящихся к наиболее успешной особи в популяции, представлена на рис. 3.

Анализ кривых на рис. 1-3 свидетельствует об очень медленной адаптации параметров “теоретической” модели полной активности (8). Для выяснения причин такого поведения необходимо проанализировать рельеф пространства параметров задачи и способность алгоритма с выбранным механизмом репликации (6) исследовать пространство параметров такой топологии.

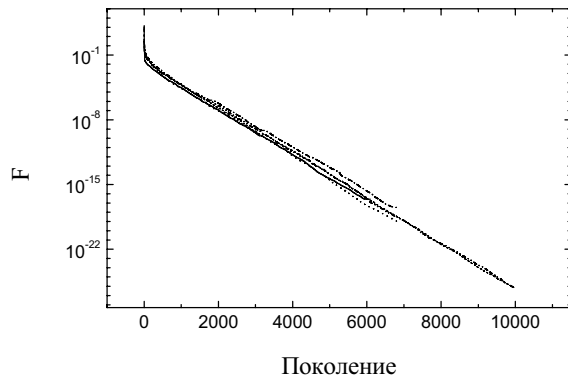


Рис.1. Динамика зависимости целевой функции (9) наилучшей особи в популяции от числа поколений для 5 независимых исполнений эволюционного алгоритма с законом репликации (6).

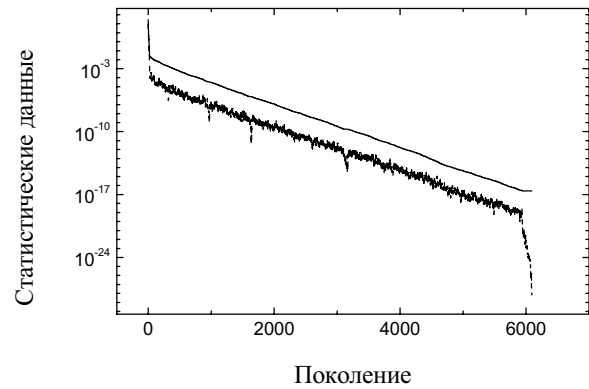


Рис.2. Среднее значение целевой функции (9) (сплошная линия) и ее среднее квадратичное отклонение от среднего значения в популяции (пунктирная линия).

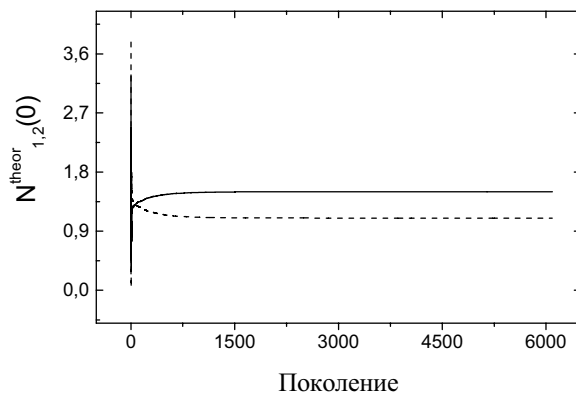
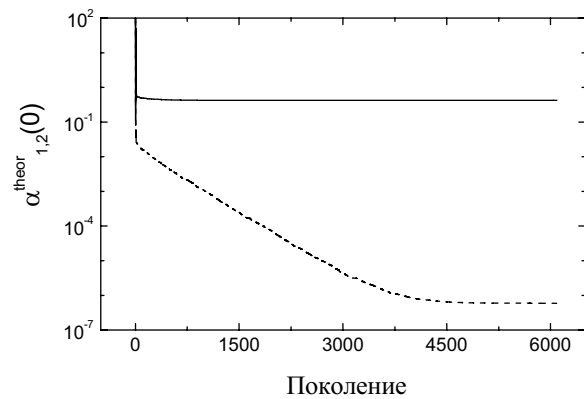


Рис.3. Эволюция параметров $N_{1,2}^{theor}(0)$ и $\alpha_{1,2}^{theor}$ для наиболее успешной особи в популяции для эволюционного алгоритма с законом репликации (6).



На рис. 4 представлена зависимость целевой функции (9) от значений параметров $N_1^{theor}(0)$ и α_1^{theor} в случае $N_2^{theor}(0) = N_2^{exp}(0)$ и $\alpha_2^{theor} = \alpha_2^{exp}$, а рис. 5 демонстрирует зависимость той же функции от величин параметров $N_2^{theor}(0)$ и α_2^{theor} в случае $N_1^{theor}(0) = N_1^{exp}(0)$ и $\alpha_1^{theor} = \alpha_1^{exp}$. Видим, что минимум целевой функции задачи лежит на дне достаточно узкого желоба, расположенного под углом к осям координат. В то же время в алгоритм мутации (6) заложен генератор нормального распределения случайной величины, которое может быть либо изотропным (рис. 6), либо вытянутым вдоль одной из осей координат (рис. 7, 8). Таким образом, алгоритм мутации (6) не способен самостоятельно определить направление наискорейшего спуска, если оно лежит под углом к осям координат.

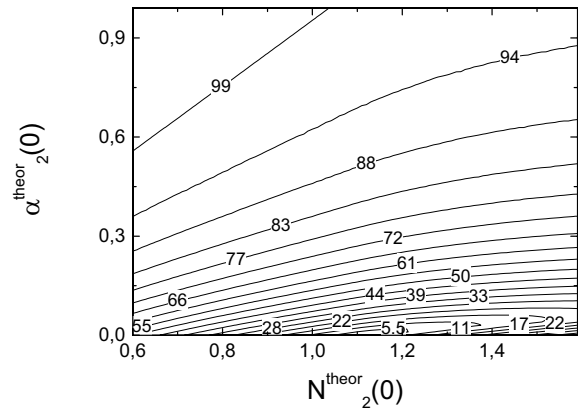
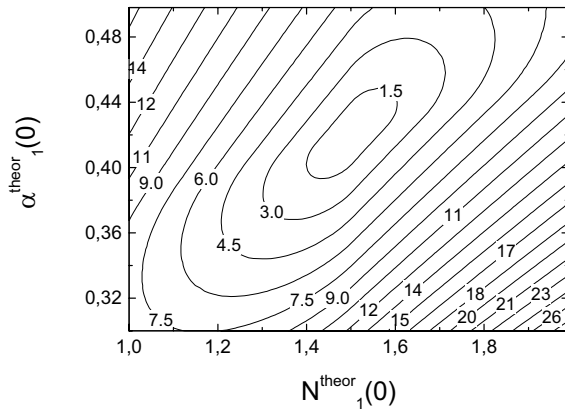


Рис.4. Зависимость целевой функции (9) от значений параметров $N_1^{theor}(0)$ и α_1^{theor} в случае $N_2^{theor}(0) = N_2^{exp}(0)$ и $\alpha_2^{theor} = \alpha_2^{exp}$.

Рис.5. Зависимость целевой функции (9) от значений параметров $N_2^{theor}(0)$ и α_2^{theor} в случае $N_1^{theor}(0) = N_1^{exp}(0)$ и $\alpha_1^{theor} = \alpha_1^{exp}$.

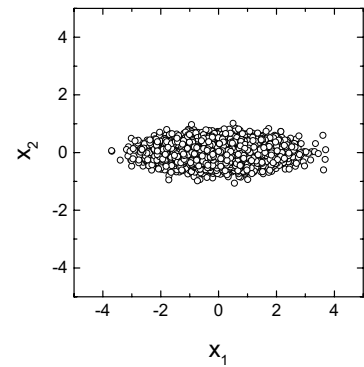
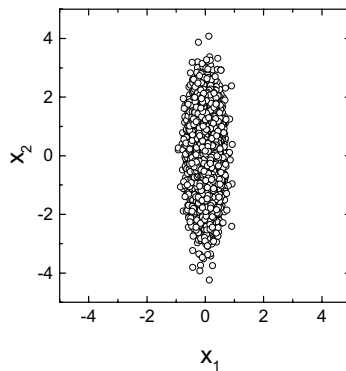
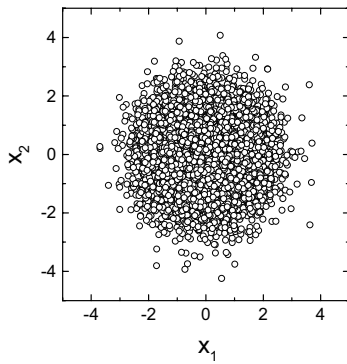


Рис.6. Нормально распределенная двумерная случайная величина (x_1, x_2) . Изотропный случай.

Рис.7. Нормально распределенная двумерная случайная величина (x_1, x_2) . Амплитуда вероятности вдоль оси x_1 меньше такой же величины вдоль оси x_2 .

Рис.8. Нормально распределенная двумерная случайная величина (x_1, x_2) . Амплитуда вероятности вдоль оси x_2 меньше такой же величины вдоль оси x_1 .

ЭВОЛЮЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ С ПОВОРОТОМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Анализ рис. 6-8 подсказывает путь разрешения обнаруженной проблемы. После генерации координат по томка x_j' согласно формуле (6) необходимо выполнить дополнительный многомерный поворот в пространстве параметров задачи:

$$x_i'' = g_{i,j} x_j', \tag{11}$$

где унитарная матрица m -мерного поворота имеет вид (см., например, [8]):

$$g = g^{(m-1)} \dots g^{(1)},$$

$$g^{(k)} = g_1(\theta_1^k) \dots g_k(\theta_k^k),$$

$$g_j(\theta_j^k) \Rightarrow \begin{cases} x_{j'} = x_j \cdot \cos(\theta_j^k) + x_{j+1} \cdot \sin(\theta_j^k) \\ x_{j+1}' = -x_j \cdot \sin(\theta_j^k) + x_{j+1} \cdot \cos(\theta_j^k) \end{cases},$$

$$1 \leq k \leq m-1,$$

$$\begin{aligned}
 &1 \leq j \leq k, \\
 &0 \leq \theta_1^1, \theta_1^2, \dots < 2\pi, \\
 &0 \leq \theta_2^1, \theta_2^2, \dots, \theta_3^1, \theta_3^2, \dots < \pi.
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

Такой поворот определяется $m(m-1)/2$ обобщенными углами Эйлера θ_j^k , которые дополнительно адаптируются эволюционным алгоритмом.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Результаты применения эволюционного алгоритма с законом репликации (6), (11) к задаче (7)-(10) представлены на рис. 9–11. Рис. 9 и 10 демонстрируют динамику зависимости целевой функции (9) наилучшей особи в популяции от числа поколений для 5 независимых исполнений описанного алгоритма с законом репликации (6), (11), а также среднее значение величины F и ее среднее квадратичное отклонение от среднего значения в популяции. Эволюция параметров $N_{1,2}^{theor}(0)$ и $\alpha_{1,2}^{theor}$, относящихся к наиболее успешной особи в популяции, представлена на рис. 11.

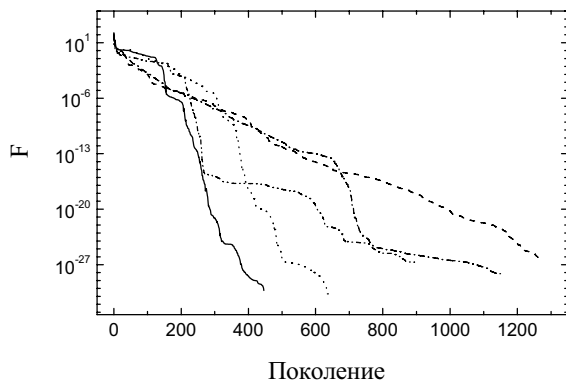


Рис.9. Динамика зависимости целевой функции (9) наилучшей особи в популяции от числа поколений для 5 независимых исполнений эволюционного алгоритма с законом репликации (6), (11).

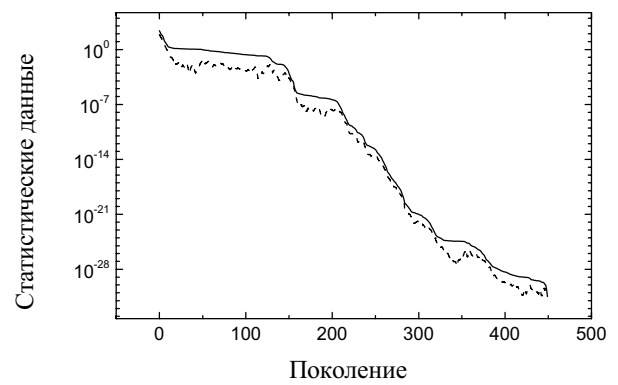


Рис.10. Среднее значение целевой функции (9) (сплошная линия) и ее среднее квадратичное отклонение от среднего значения в популяции (пунктирная линия).

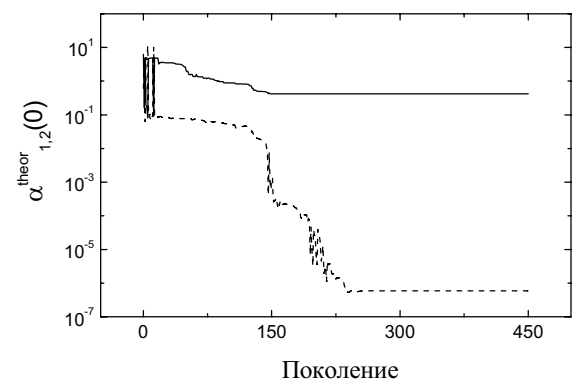
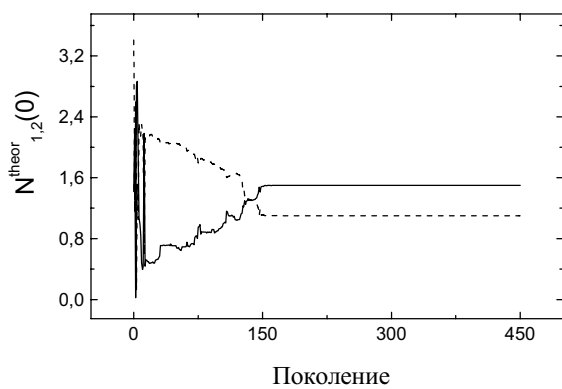


Рис.11. Эволюция параметров $N_{1,2}^{theor}(0)$ и $\alpha_{1,2}^{theor}$ для наиболее успешной особи в популяции для эволюционного алгоритма с законом репликации (6), (11).

Из рис. 9–11 видно, что эволюционный алгоритм с дополнительным поворотом распределения вероятности нормально распределенной случайной величины (11) на порядок быстрее настраивает значения параметров модели по сравнению с традиционным вариантом алгоритма (6). В новой формулировке эволюционный алгоритм оказывается способным исследовать значительно более сложные по топологии пространства параметров задач.

ВЫВОДЫ

В настоящей работе нами разработан и применен новый эволюционный алгоритм для определения количества радиоактивных ядер любого сорта и периодов их полураспада, что необходимо для получения полной информации о компонентном составе, например, радиоактивных отходов. Программное обеспечение, созданное на основе эволюционных компьютерных технологий, предоставляет возможность в каждый момент времени анализировать и прогнозировать динамику изменений, которые происходят, например, в контейнерах, содержащих радиоактивные отходы.

Практическое значение результатов работы состоит в том, что они могут быть внедрены на программируемых детектирующих, регулирующих и контролирующих приборах для технологических процессов и систем безопасности на атомных электростанциях. Эволюционные алгоритмы можно также использовать для решения других проблем ядерной энергетики, таких как оптимизация процессов наработки, использования и утилизации ядерного топлива, оптимизация ремонтных работ на ядерных реакторах и оптимизация методов разработки новых материалов реакторостроения, а также при решении ряда экологических проблем [9–11]. В конечном итоге создание новых компьютерных моделей и алгоритмов будет способствовать увеличению сроков функционирования атомных электростанций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Korda V.Yu., Molev A.S., Korda L.P. Evolving model-free scattering matrix via evolutionary algorithm: ^{16}O - ^{16}O elastic scattering at 350 MeV // *Phys. Rev. C*. - 2005. - V.72.(014611) - P.11.1 - 11.7.
2. Berezovsky S.V., Korda V.Yu., Klepikov V.F. Multi-level genetic-algorithm optimization of the thermodynamic analysis of incommensurate phase in ferroelectric $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}_6$ // *Phys. Rev. B*. - 2001. - V.64.(064103) - P.3.1 - 3.7.
3. Morris J.R., Deaven D.M., Ho K.M. Genetic-algorithm energy minimization for point charges on a sphere // *Phys. Rev. B*. - 1996. - V.53, №4. - P.R1740 - R1743.
4. Michaelian K. Evolving an energy dependent optical model description of heavy-ion elastic scattering // *Revista Mexicana de Fisica*. - 1996. - V.42(suppl.1). - P.203 - 215.
5. Winkler C., Hofmann H.M. Determination of bound-state wave functions by a genetic algorithm // *Phys. Rev. C*. - 1997. - V.55, №2. - P.684- 687.
6. Bäck T. and Schwefel H.-P. An overview of evolutionary algorithms for parameter optimization // *Evolutionary Computations* - 1993. - V.1, №1. - P.1 - 23.
7. Fogel D.B. An introduction to simulated evolutionary optimization // *IEEE Transactions on neural networks* - 1994. - V.5, №1. - P.3 - 14.
8. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп. - М.: Наука. Гл. Ред. Физ.-мат. лит., 1991. - 576с.
9. І.М. Неклюдов, В.Ф. Клепиков, В.Ю. Корда та ін. Еволюційні алгоритми у природничих науках: наукометричне дослідження // *Вісник НАН України*. - 2005. - №9. - С.19 - 25.
10. И.М.Неклюдов, В.Ф.Клепиков, В.Ю.Корда и др. Эволюционные компьютерные технологии: наукометрическое исследование // *Вопросы атомной науки и техники*. - Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (88). - 2005. - №5. - С.121 - 127.
11. В.Ф. Клепиков, В.Ю. Корда, А.Г. Шепелев и др. Электроядерная энергетика: тенденции развития. Анализ баз данных INIS и SCOPUS // *Вісник Харківського національного університету*. - Серія фізична „Ядра, частинки, поля”. - 2005. - №710, вип.3. - С.123 - 127.

ANALYSING COMPOSITION OF THE RADIOACTIVE SPECIES WITH HELP OF EVOLUTIONARY ALGORITHM

V.Yu. Korda, A.S. Molev, L.P. Korda

*Institute of Electrophysics and Radiation Technologies, National Academy of Sciences of Ukraine,
28, Chernyshevsky st., p.o. box 8812, Kharkov, 61002*

The evolutionary algorithm with the additional turn of the probability distribution of the normally distributed multi-dimensional random variable is developed. The proposed algorithm appears to be capable of investigating the spaces of optimization problems with complicated topology. The algorithm is implemented for the problem of determining the composition of the radioactive species. The software created on the ground of the novel evolutionary algorithm can be used in improving the existed and developing the new systems for the diagnostics, control and prediction of state of the radioactive waste.

KEY WORDS: radioactive waste, radioactive decay, evolutionary algorithm