

Численное моделирование процессов рассеяния рентгеновского излучения при радиографическом контроле материалов.

М.Е.Жуковский, С.В.Подоляко

Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Россия

zhuk@kiam.ru тел.: (095)250-78-25

Г.-Р. Йениш, К. Беллон

Федеральный институт исследования и контроля материалов, Германия.

В работе рассматривается методика численного моделирования процессов формирования радиографических образов сложных многокомпонентных объектов с учетом процессов поглощения и рассеяния проникающего излучения. Предложенная методика основана на эффективном описании сложных трехмерных объектов, имеющих кусочно-однородную структуру, с помощью точного задания оболочек, разделяющих гомогенные составляющие объекта. В сочетании с разработанной модификацией метода Монте-Карло предложенный подход дает эффективный вычислительный аппарат для анализа закономерностей формирования радиографических изображений внутренней структуры объектов, ориентированный на современные многопроцессорные вычислительные системы. Обсуждаются полученные с помощью разработанной методики результаты численного анализа влияния различных механизмов взаимодействия фотонов с веществом (в том числе когерентное и некогерентное рассеяние с учетом связанности электронов в атоме) на формируемое радиографическое изображение внутренней структуры объекта. Показано преимущество описываемой методики по сравнению с известным программным комплексом MCNP.

Numerical modeling processes of X-ray scattering in Radiography.

M.Zhukovskiy, S.Podoliako

Keldysh Institute for applied mathematics RAS, Russia

G.-R.Jaenisch, C.Bellon.

Bundesanstalt fuer Materialforschung und –pruefung, Germany

Abstract

Technique of numerical modeling the radiographic images of complex multicomponent objects forming with counting absorption and scattering processes of penetrating radiation is considered in publication. The technique is based on effective description of 3D complex objects of piecewise-homogeneous structure using by accurate specifying envelopes dividing homogeneous parts of object. Constructed approach coupling with Monte Carlo method gives effective parallel computing method for analysis of peculiarities of forming radiographic images of inner object structure. Results of numerical investigation of influencing various photon interaction mechanisms on object imaging are discussed. In particular, the vital importance of scattering radiation is shown. Advantages of constructed technique in comparison with well known MSNP-codes are demonstrated.

Введение.

В задачах радиографии информацию о внутренней структуре объектов получают путем просвечивания этих объектов проникающим излучением и анализа прошедшего излучения, которое состоит из первичной (нерассеянной) и рассеянной компонент. Традиционные методы и схемы радиометрической дефектоскопии (см., например, [1]) учитывают только первичную компоненту при анализе и интерпретации прошедшего излучения, при этом используются различные методики уменьшения влияния рассеянного излучения (нежесткая коллимация, дискриминация по фотопику и др.). Как правило, применение этих методик требует существенного увеличения мощности проникающего излучения и усложнения способов регистрации прошедшего сквозь объект излучения. Между тем, детальное знание распределения рассеянного излучения позволяет корректно учесть его при использовании радиографических методов, ориентированных на обработку первичного излучения, и дает возможность снизить экспозиционную дозу облучения при проведении экспериментальных работ. Кроме того, в некоторых случаях (например, при исследовании структуры труднодоступных образцов) рассеянное излучение является единственным источником информации об объекте при их радиометрическом анализе.

Таким образом, актуальной является задача разработки радиографических методов и способов их оптимизации для анализа внутренней структуры сложных многокомпонентных объектов с использованием информации о пространственном распределении рассеянной компоненты регистрируемого излучения.

Одним из мощных и экономически выгодных методов для решения указанных задач является математическое моделирование процессов трансформации проникающего излучения в объектах с использованием современных высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем. Стандартные радиографические модели основаны на использовании закона ослабления, при этом предполагается, что эффекты рассеяния приводят только к уменьшению контрастности радиографических изображений и не влияют на образ внутренней структуры. Однако во многих практических приложениях только детальное описание различных механизмов взаимодействия проникающего излучения с материалами объектов дает возможность интерпретировать и объяснить такие детали радиографических образов, как «кrapчатость» и ряд других.

Например, широко распространенный программный комплекс MCNP [2] (The N-particle Monte-Carlo code) дает возможность исследовать процессы формирования образов с учетом как первичного, так и рассеянного излучения и провести анализ влияния различных механизмов взаимодействия фотонов с веществом (фотопоглощения, когерентного и Комптоновского рассеяния, образования электрон-позитронных пар и т.д.). Однако, описание геометрии сложных многокомпонентных объектов (таких, например, как литье) является чрезвычайно сложным в рамках указанного программного продукта. Кроме того, специфика использованного в MCNP подхода к распараллеливанию накладывает обременительные ограничения на число фотонных историй при проведении вычислительных экспериментов на большинстве используемых 32-х разрядных процессорных системах, что может привести к слишком большой погрешности получаемых результатов.

В настоящей работе рассматривается оригинальный подход для геометрического описания сложных многокомпонентных объектов, который в совокупности с методом Монте-Карло дает возможность эффективного моделирования процессов трансформации проникающего излучения в конструкционных материалах этих объектов на современных высокопроизводительных вычислительных системах. Обсуждаются результаты численного анализа влияния различных механизмов взаимодействия фотонов с веществом (в том числе когерентное и некогерентное рассеяние с учетом связанности электронов в атоме) на формируемое радиографическое изображение внутренней структуры объекта.

Физическая модель.

В задачах технической диагностики объектов корректный учет рассеянного излучения играет важную роль при интерпретации рентгеновских изображений для решения задач восстановления внутренней структуры исследуемых объектов [3,4]. В этой ситуации полнота физической модели и точность используемого константного обеспечения имеет первостепенное значение, поскольку обратные задачи вычислительной диагностики являются, как правило, некорректно поставленными, и, поэтому, малые изменения входных данных могут привести к значительному искажению результатов исследований. Кроме этого, моделирование трансформации ионизирующего излучения в объектах может использоваться при выборе оптимальных условий проведения экспериментов, например при разработке методов, уменьшающих эффекты размытия рентгеновских изображений, обусловленных влиянием эффектов рассеяния.

В настоящей работе рассматривается диапазон энергий фотонов проникающего излучения до 1 МэВ (Рентгеновское излучение). Основными процессами взаимодействия квантов с веществом в этом диапазоне являются когерентное (Рэлеевское) и некогерентное (Комптовское) рассеяние и фотоэлектрическое поглощение фотонов (рис.1). Эффекты связанности

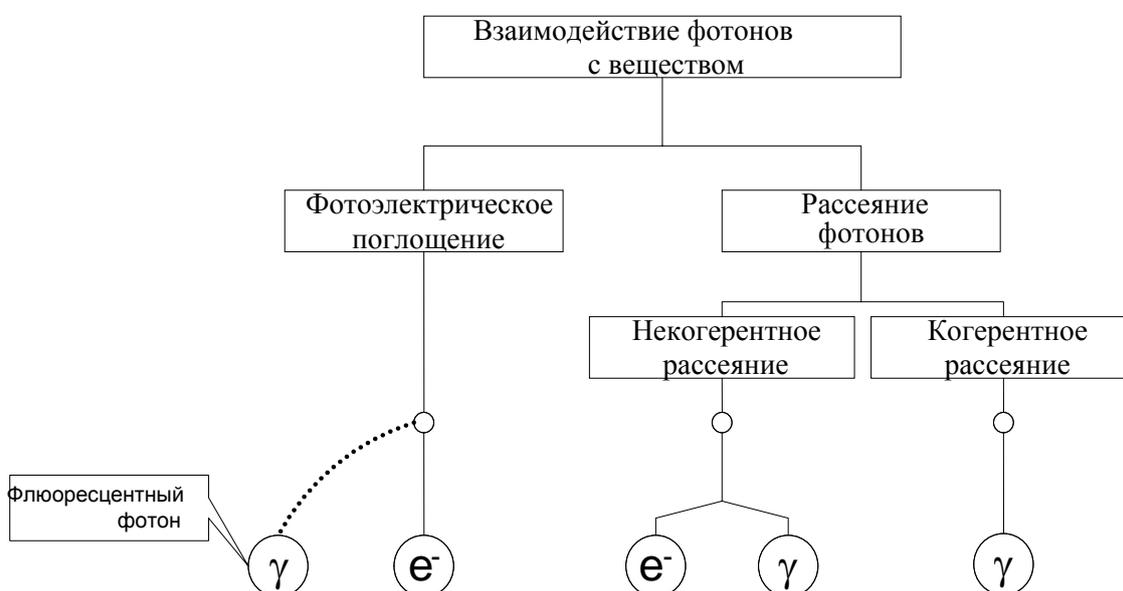


Рис.1

электронов в атоме учитываются путем введения форм-фактора для когерентного и функции рассеяния для некогерентного рассеяний [5,6]. Согласно [2], вторичные эффекты, такие как флуоресценция и перенос электронов, несущественны в рассматриваемом энергетическом диапазоне с точки зрения влияния на исследуемое распределение прошедшего сквозь объект излучения.

В зависимости от энергии излучения и от материала преобладающим является тот или иной тип взаимодействия. Для низких энергий основную роль играет фотопоглощение фотонов. Вероятность фотоэффекта быстро падает с ростом энергии фотона. При увеличении энергии рентгеновского излучения основным механизмом взаимодействия фотонов с веществом становится комптоновское рассеяние. В случае если величина передаваемого импульса при столкновении кванта с электроном мала, рассеяние фотонов на атомных электронах происходит без потери энергии (Рэлеевское или когерентное рассеяние).

Как известно [7,8], если рассматривать рассеяние фотона на электроне, свободном от связи с другими частицами, то дифференциальное сечение рассеяния неполяризованного фотона зависит только от энергии и направления рассеиваемого фотона и выражается формулой Клейна-Нишины-Тамма:

$$\frac{d\sigma_{KN}(\cos\theta, \varepsilon)}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1 + \varepsilon(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\varepsilon^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \varepsilon(1 - \cos\theta)} \right] d\Omega \quad (1)$$

здесь $r_e = e^2/m_e c^2 = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ м}$ - классический радиус электрона (e - заряд, m_e - масса электрона, $\varepsilon = E/m_e c^2$ - энергия фотона, отнесенная к энергии покоя электрона), θ - угол отклонения рассеянного кванта от первоначального направления движения, $d\Omega = \sin\theta \cdot d\theta d\varphi$ - элемент телесного угла.

Предположение о свободном и покоящемся электроне справедливо только при условии, что импульс, передаваемый электрону, намного превышает импульс его первоначального движения в атоме $\lambda_e \gg \lambda/\sin(\theta/2)$, где λ и λ_e - первоначальные длины волн соответственно фотона и электрона. Наличие связей и первоначального движения электронов приводит к уменьшению вероятности комптоновского рассеяния и исчезновению жёсткого соотношения между λ , λ_e и θ . В этом случае сечение комптоновского рассеяния определяется комбинацией σ_{KN} и нерелятивистской функции некогерентного рассеяния Хартри-Фока $I(Z, \varepsilon, \theta)$ [5]:

$$d\sigma_{Compton}/d\Omega = I(Z, \varepsilon, \theta) \cdot d\sigma_{KN}/d\Omega \quad (2)$$

Учет указанного эффекта, приводит к уменьшению вероятности комптоновского рассеяния вперёд (к полному запрету рассеяния по направлению первоначального движения фотона) и к некоторому увеличению вероятности рассеяния назад, относительно первоначального движения фотона для небольших энергий и более тяжелых элементов.

Рассеяние фотонов на электронах становится когерентным при небольшой величине передаваемого импульса (Рэлеевское рассеяние). Такое рассеяние происходит без потери энергии квантом проникающего излучения. Дифференциальное сечение Рэлеевского рассеяния в случае учета связанности электронов является произведением Томпсоновского классического сечения σ_{Th} (предельный вид формулы (1) при малых энергиях) и квадрата релятивистского атомного форм-фактора Хартри-Фока $C(Z, \varepsilon, \theta)$ [6]:

$$\frac{d\sigma_{Rayleigh}}{d\Omega} = C^2 \cdot \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega}, \quad \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2\theta) \quad (3)$$

Основной эффект влияния форм-фактора $C(Z, \varepsilon, \theta)$ заключается в уменьшении вероятности рассеяния фотонов в обратном направлении для высоких энергий и лёгких элементов, что противоположно действию функции рассеяния $I(Z, \varepsilon, \theta)$ (на рис.2 изображено угловое распределение когерентно рассеянных фотонов в железе).

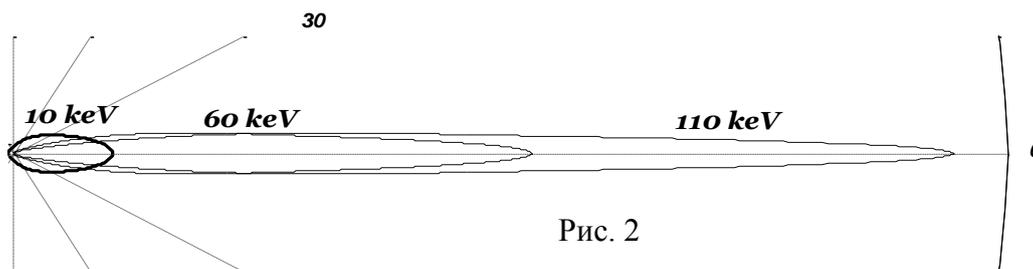


Рис. 2

На рис.3, 4 изображены графики функции, $I(Z, \nu)/Z$ и $C(Z, \nu)/Z$ для алюминия и железа ($\nu = \sin(\theta/2)/\lambda$).

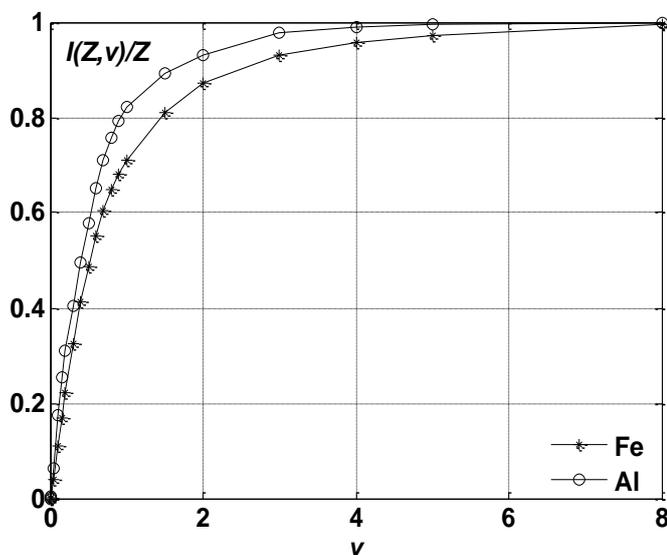


Рис.3

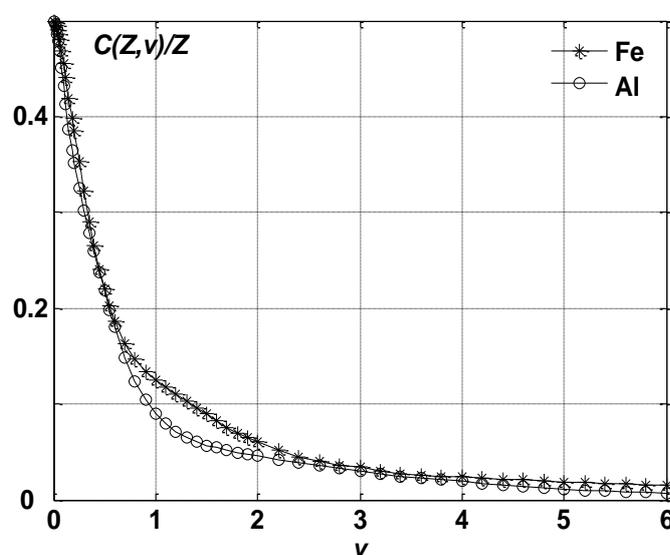


Рис.4

Отметим, что рассеяние фотонов прямо вперед с точки зрения процесса переноса излучения означает, что фактически квант не рассеивается. При этом его энергия, естественно, сохраняется. Уменьшение сечения комптоновского рассеяния в направлении первоначального движения фотонов, компенсируется когерентным рассеянием при высоких энергиях и малых углах. Если бы все атомные электроны участвовали в Рэлеевском рассеянии независимо друг от друга, то их суммарный эффект при малых значениях передаваемого импульса точно компенсировал бы уменьшение комптоновского рассеяния, однако из-за эффекта связанности, электроны атома участвуют в указанном процессе когерентно. Поэтому вероятность рассеяния возрастает вследствие явлений интерференции.

Методика моделирования процессов рассеяния излучения.

Для анализа основных закономерностей и особенностей формирования рентгеновских изображений исследуемых объектов в рамках разработки математических моделей диагностических систем необходимо иметь эффективную методику моделирования процессов распространения излучения в многокомпонентных объектах сложной формы, ориентированную на современные многопроцессорные вычислительные комплексы. Такая методика должна включать в себя следующие основные части:

- экономичный, с точки зрения объема требуемых вычислительных ресурсов, способ дискретного описания трехмерных многокомпонентных объектов сложной формы;
- эффективный алгоритм для многократного вычисления оператора, связывающего геометрическую форму исследуемого объекта и его проекционный образ на некоторой (детекторной) поверхности;
- метод моделирования взаимодействия рентгеновского излучения с материалами объекта, допускающий эффективное распараллеливание на современных многопроцессорных суперкомпьютерах.

Для исследования взаимодействия ионизирующего излучения с гетерогенными кусочно-однородными объектами и анализа закономерностей формирования рентгеновских изображений их внутренней структуры разработан расчетно-методический аппарат, основанный на поверхностно ориентированном описании многокомпонентных объектов сложной формы [3]. Этот аппарат включает в себя:

- Поверхностно ориентированное описание многокомпонентных объектов сложной формы, основанное на точном определении границ гомогенных составляющих внутренней структуры объекта и задании соответствующих разделяющих замкнутых оболочек;
- Эффективный «лучевой» (“Ray-tracer”) алгоритм для вычисления оператора, связывающего форму и внутреннюю структуру объекта с его проекционным изображением на детекторной поверхности, основанный на определении точек пересечения луча «источник-детектор» с разделяющими гомогенные части объекта поверхностями [9];
- Методику расчета трансформации рентгеновского излучения в объектах сложной формы с учетом спектрального состава ионизирующего излучения, а также эффектов фотопоглощения, Комптоновского и Рэлеевского рассеяния. Эта методика построена на основе явного выделения граничных поверхностей с использованием триангуляционных моделей в сочетании с методом Монте-Карло, допускающим эффективное распараллеливание на многопроцессорных вычислительных системах.

Гетерогенные среды с кусочно-однородной структурой могут быть адекватно описаны посредством точного задания разделяющих гомогенные части таких сред поверхностей. Поверхностно ориентированное описание кусочно-однородных объектов позволяет определять соответствующие структуры с использованием замкнутых оболочек.

Адекватное описание таких структур может быть проведено с помощью введения пары (μ, U) . Здесь $\mu = \{\mu_p\}$ набор параметров для описания характеристик среды. Например, μ_p ($p = 1, \dots, P$) может быть вектором, определяющим коэффициенты ослабления, поглощения и рассеяния фотонов данной энергии в p -той однородной части объекта. Вторая составляющая поверхностного описания $U = \{u_q\}$ ($q = 1, \dots, Q$) - множество замкнутых оболочек u_q , задающих границы гомогенных составляющих объекта.

Пусть F - совокупность измеренных данных, характеризующих образ объекта на детекторной плоскости. Тогда связь между внутренней структурой объекта и его проективными образами для данной конфигурации оболочек $\{u_q\}$ и набора характеристик $\{\mu_p\}$ может быть записана с помощью операторного уравнения:

$$A(\mu, U) = F \quad (3)$$

A называется при этом оператором связи или прямым оператором.

В радиографических приложениях оператор A определяется интегралами вдоль лучей на множестве линий, связывающих источник с точкой (пикселем) на детекторной поверхности (каждой конфигурации «источник-объект-детекторная поверхность»).

Для дискретизации замкнутых оболочек, описывающих гомогенные компоненты объекта, в описываемом алгоритме используется триангуляционная модель. Эта модель, использующая нерегулярные поверхностные ячейки, применяется при расчете прямого оператора (оператора связи) для произвольно сложных многокомпонентных объектов. Поэтому важным является разработка эффективных алгоритмов расчета оператора A , связывающего объект и его проекцию на детекторной поверхности для широкого класса сложных объектов, имеющих кусочно-однородную структуру. Ниже кратко описывается такой алгоритм, основанный на триангуляции указанных оболочек.

Оператор A в данной работе определяется следующим образом. Пусть $L(x, y)$ - отрезок луча, соединяющий точечный источник и точку на детекторной плоскости D . Тогда

$$A = \int_{L(x,y)} \mu(l) dl \quad (4)$$

где интегрирование ведется вдоль линии $L(x, y)$, а μ - коэффициент линейного ослабления потока рентгеновских квантов.

В случае полихромного источника со спектром $S(\varepsilon)$, интенсивность регистрируемого первичного (нерассеянного) излучения определяется формулой:

$$I(x, y) = I_0 \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} S(\varepsilon) e^{-A(\mu(\varepsilon), U)} d\varepsilon.$$

Пусть (μ, U) описывает внутреннюю структуру кусочно-однородной среды, где $\mu = \{\mu_p\}$ ($p = 1, \dots, P$) набор параметров для описания характеристик среды, а $U = \{u_q\}$ ($q = 1, \dots, Q$) - множество замкнутых оболочек u_q , задающих границы однородных составляющих объекта.

Рассмотрим далее фиксированную точку расположения источника $S = (x_s, y_s, z_s)$ и плоскость $D = \{x, y, z = 0\}$ в качестве детекторной поверхности. Правая часть (3) для многокомпонентной структуры, состоящей из P различных материалов, может быть представлена в виде:

$$F(x, y) = \sum_{p=1}^P \mu_p V_p(x, y), \text{ где } V_p(x, y) \text{ есть оптическая толщина материала с индексом } p \text{ вдоль линии } L(x, y), \text{ соединяющей источник } S \text{ с точкой } (x, y) \text{ на проекционной (детекторной) плоскости } D.$$

В соответствии с определением (4) вычисление прямого оператора требует нахождения полной оптической длины объекта вдоль лучей $L(x, y)$. Поэтому необходимым является, во-первых, нахождение треугольников, из которых состоят рассматриваемые оболочки после триангуляции, пересекаемых этими лучами и, во-вторых, нахождение всех точек пересечения этих лучей с указанными треугольниками.

Необходимо отметить, что подход, основанный на описании граничных поверхностей, имеет важную особенность, которая должна быть учтена при разработке эффективного вычислительного алгоритма, а именно:

Разделяющие поверхности после триангуляции состоят из совокупности треугольников, т.е. эти поверхности состоят из фасеток, граней и вершин. Ясно, что точки пересечения лучей с разделяющей поверхностью могут принадлежать каркасу соответствующей оболочки, образованному гранями и вершинами. В этом случае данная точка пересечения луча с поверхностью принадлежит с геометрической точки зрения двум или нескольким треугольникам, что приводит к существенному усложнению логической части алгоритма. Ситуация усугубляется наличием вычислительных ошибок округления, когда рассматриваемый луч проходит через треугольники вблизи их границ. Эти ошибки определения точек пересечения для соседних треугольников могут привести к появлению фиктивных точек или к исчезновению (пропуску) действительных.

Отметим еще одну важную черту, характерную для рассматриваемого подхода. Количество рассматриваемых лучей может достигать десятков и сотен миллионов для каждой детекторной плоскости, а разделяющая оболочка после триангуляции может состоять из десятков тысяч треугольников для достаточно сложных структур. Такие величины параметров дискретной модели требуют разработки эффективного способа просмотра всех возможных

пар «луч-треугольник» при поиске точек пересечения луча с поверхностью разделяющей оболочки.

В [3] предложен следующий двухэтапный алгоритм, учитывающий указанные выше особенности рассматриваемого поверхностно ориентированного подхода:

- сначала определяются все треугольники, которые пересекает данный луч. Этот «качественный» этап проводится с использованием рамки (ребер и вершин) треугольника, а факт пересечения лучом треугольника устанавливается с помощью специальной системы неравенств (см. [3]);
- затем с использованием фасеток определяются координаты точек пересечения («количественный» этап).

Следует отметить, что реализация этой концепции позволяет рассчитывать прямой оператор и находить распределение оптических длин $V(x, y)$ без учета связей различных треугольников на поверхности. Т.е. достаточно использовать только список дискретных точек P_n поверхности и соответствующий список треугольников $T_m(P_{n_1}, P_{n_2}, P_{n_3})$. Этот подход позволит рассматривать сложные мультиоболочечные объекты, и дает простой алгоритм нахождения точек пересечения луча с оболочкой, основанный на анализе отдельных треугольников поверхности.

Важно отметить, что рассматриваемый алгоритм дает возможность вычислять первичное (нерассеянное) прошедшее сквозь объект излучение с минимальными вычислительными затратами. Этот алгоритм может быть использован для математического моделирования в задачах вычислительной диагностики, а также для анализа связи между внутренней структурой объекта и его проекционным образом [9].

Отметим, что в сравнении со стандартными “Ray-tracer” алгоритмами (см., например, [10]), применяемыми в задачах моделирования рентгеновской радиографии [11,12], предложенный алгоритм позволяет уменьшить вычислительные затраты на два – три порядка в зависимости от конкретной задачи. Кроме того, рассматриваемый подход снимает известную проблему артефактов [13], возникающую из-за ошибок округления вблизи границ между двумя или более фасетками.

Рассмотрим теперь основные особенности реализации метода Монте-Карло в подходе с использованием поверхностно ориентированного описания объектов.

Применение метода Монте-Карло для моделирования взаимодействия рентгеновского излучения с материалами и трансформации этого излучения при прохождении через сложные многокомпонентные объекты обусловлено высокой гибкостью и приспособленностью этого метода к решению сложных граничных задач. Кроме того, интенсивное развитие в настоящее время высокопроизводительных многопроцессорных суперкомпьютеров в сочетании с возможностью эффективного распараллеливания метода Монте-Карло дает мощный и эффективный инструмент для математического моделирования задач рентгеновской диагностики и неразрушающего контроля.

Как известно, метод Монте-Карло основан на моделировании случайных траекторий фотонов, каждая из которых состоит из отрезков «свободного» движения частиц и точек взаимодействия квантов излучения с веществом. Рассмотрим основные особенности моделирования траекторий частиц внутри объекта, описание которого реализуется с использованием указанного поверхностно ориентированного подхода. Будем считать, что внешние границы объекта являются абсолютно поглощающими, в том смысле, что фотон, однажды вылетевший из объекта, обратно не возвращается. Полагаем также, что каждая траектория кванта заканчивается либо фотопоглощением его внутри объекта, либо вылетом наружу с последующей регистрацией в случае, если этот квант попадает на детекторную поверхность.

Для каждой фотонной траектории исходными являются начало первого звена и направление движения частицы. Исходя из этого, метод расчета траекторий фотонов проводится в следующей последовательности.

Сначала определяется оптическая толщина объекта в направлении движения фотона от начала звена до выхода из объекта, при этом используется разработанный в [3] алгоритм нахождения точек пересечения соответствующего луча с разделяющими оболочками.

После определения конца текущего звена траектории в случае, если фотон остался в объекте, проводится розыгрыш типа взаимодействия этого фотона с веществом той части объекта, в которой заканчивается рассматриваемое звено траектории. Как указывалось выше, рассматриваются три типа взаимодействия: фотоэлектрическое поглощение, когерентное и некогерентное рассеяния. Для данного вещества и данной энергии фотона каждый из этих процессов характеризуется вероятностью P_{ph}, P_r, P_c соответственно. Эти вероятности вычисляются через коэффициент ослабления $\mu(\epsilon)$ излучения в веществе, который является суммой величин μ_{ph}, μ_r, μ_c , выражающих вклад соответствующих процессов и пропорциональных их полным сечениям: $\mu = \mu_{ph} + \mu_r + \mu_c$. Поэтому $P_{ph} = \mu_{ph}/\mu$, $P_r = \mu_r/\mu$ и $P_c = \mu_c/\mu$.

Следующим этапом алгоритма является определение направление движения фотона после рассеяния (в случае, если в результате взаимодействия этот фотон не поглотился). Это направление вычисляется с помощью розыгрыша случайной величины – угла рассеяния кванта с использованием известных угловых распределений, соответствующих рассматриваемым типам рассеяния. В частности, угловое распределение фотонов, испытавших комптоновское рассеяние, определяется формулой Кляйна-Нишины-Тамма.

Оценка прошедшего сквозь объект ионизирующего излучения с помощью прямых испытаний методом Монте-Карло может оказаться неэффективной, когда лишь незначительная часть фотонных траекторий несет информацию о решении рассматриваемой задачи. Может оказаться, в особенности это характерно для сильно поглощающих сред, что очень малая доля первичных фотонов достигает детекторной плоскости.

Существует много приемов увеличения эффективности расчетов методом Монте-Карло, которые так или иначе связаны с увеличением информации, извлекаемой из отдельной траектории фотона. В рассматриваемом алгоритме реализована модификация метода Монте-Карло, являющиеся результатом аналитических методов решения задачи, позволяющих заменить одну из случайных величин ее вероятным значением.

Во-первых, вместо того, чтобы путем розыгрыша случайной величины определять приведет ли данный акт взаимодействия к поглощению или к рассеянию фотона, полагается, что фотон всегда рассеивается с весом, равным вероятности «выживания» $w_s = \mu_s/\mu$; $\mu_s = \mu_r + \mu_c$. Этот вес имеет смысл средней доли фотонов в данной истории, которые не поглотились в данном акте взаимодействия. Таким образом, в процессе движения фотон в n -ом столкновении выживает с соответствующим уменьшением веса

$$w_s(n+1) = w_s(n) \cdot \mu_s(n+1)/\mu(n+1).$$

Следовательно, при данном числе траекторий фотонов происходит формальное увеличение количества источников фотонов по сравнению с проведением прямых испытаний, что приводит к уменьшению дисперсии результата.

Другой способ увеличения информационной ценности фотонных историй состоит в следующем. Вместо того, чтобы рассматривать пересечение детекторной плоскости фотоном как случайное событие, аналитически подсчитывается вероятность того, что квант после очередного рассеяния достигнет детекторную плоскость без последующих столкновений. В этом случае количество регистрируемого излучения будет вычисляться как взвешенная сумма по всей совокупности звеньев рассматриваемой траектории.

Такой подсчет вклада траекторий ведет к уменьшению дисперсии результата, поскольку подсчитывается парциальный вклад каждого звена, в отличие от метода прямых испытаний, когда подсчитываются фотоны, действительно пересекшие детекторную плоскость, что может случиться не более одного раза за всю траекторию.

Отметим в заключение, что описанный в работе алгоритм реализован в виде параллельного программного комплекса с использованием интерфейса MPI, ориентированного на многопроцессорные вычислительные системы. Расчеты проводились на МВС-1000М.

Подробно рассмотренная методика моделирования трансформации рентгеновского излучения в материалах многокомпонентных объектов описана в [3].

Результаты моделирования процессов рассеяния.

Как указывалось выше, рассеянное излучение играет заметную роль при формировании радиографических изображений внутренней структуры объектов. С одной стороны в ряде ситуаций влияние этого излучения сводится к размытию (blurring) рентгеновских снимков, что значительно затрудняет применение стандартных методик для их интерпретации в задачах вычислительной диагностики. С другой стороны в некоторых случаях рассеянное излучение не только не уменьшает контрастность изображений, но приводит к подчеркиванию границ моногенных составляющих объекта. Кроме того, в некоторых экспериментах, например, для заглубленных в грунте или во внешних конструктивах объектов, информацию об объекте можно получить путем анализа обратно рассеянного излучения.

Ниже обсуждаются примеры расчета трансформации рентгеновского излучения в объектах, дается феноменологическая интерпретация некоторых эффектов.

Рассмотрим вначале результаты сравнительных расчетов, проведенных с использованием описанного выше алгоритма и с помощью известного пакета MCNP. Для сравнения в расчетах использовался монохроматический источник рентгеновского излучения с энергией фотонов 100 кэВ, железная пластина 5x5x1 см. Результаты расчетов как прямого, так и рассеянного излучений (рис.5, 6) совпадают в рамках статистической погрешности расчетов.

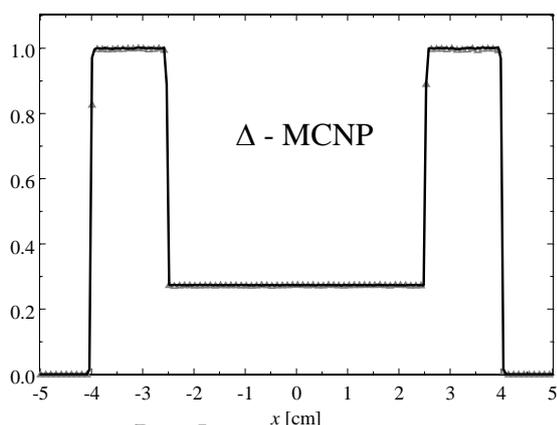


Рис.5

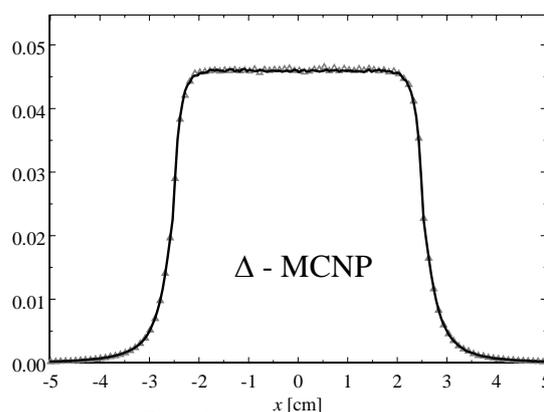


Рис.6

При этом, эффективность моделирования с использованием рассмотренного в данной работе алгоритма по крайней мере на порядок выше, чем с помощью MCNP. На указанных рисунках приведены графики относительной интенсивности регистрируемого излучения от координаты вдоль центрального среза изображения пластины на детекторной плоскости. Сплошной линией изображены результаты, полученные с использованием предложенной методики, треугольниками – MCNP.

Рассмотрим теперь влияние рассеянного излучения на качество рентгенографического изображения «дефекта» на примере, в котором железная пластина с полостью («дефектом») просвечивается излучением с энергией 80 кэВ (рис.7). В расчетах использовалась пластина 5x5x1 см с полостью посередине 0.8x0.8x0.4 см. Источник излучения расположен сверху пластины на расстоянии 100 см. Детекторная плоскость расположена вплотную к нижней грани объекта и имеет 300x300 детекторов размером 0.5x0.5 мм.

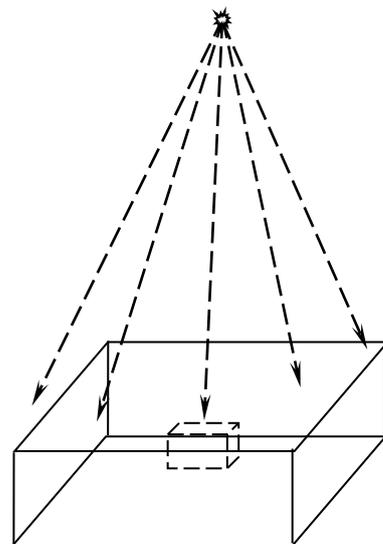


Рис.7

На рис.8,9 приведены цифровые изображения рассматриваемого объекта в прямом (рис.8) и рассеянном (рис.9) излучении для случая, когда детекторы регистрируют интенсивность прошедшего сквозь пластину излучения. Эти иллюстрации показывают, что для рассматриваемой ситуации изображение полости (дефекта), формируемое прямым (нерассеянным) излучением практически отсутствует, в то время как в рассеянном излучении эта полость достаточно хорошо видна (светлые участки соответствуют большей интенсивности, темные – меньшей). Указанные отличия в изображении полости в прямом и рассеянном излучении объясняется следующим образом.

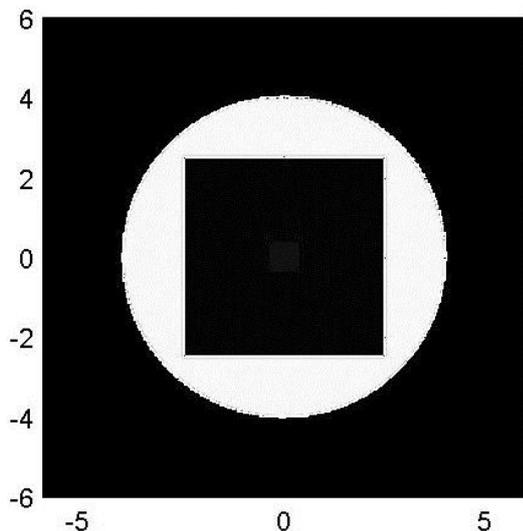


Рис. 8

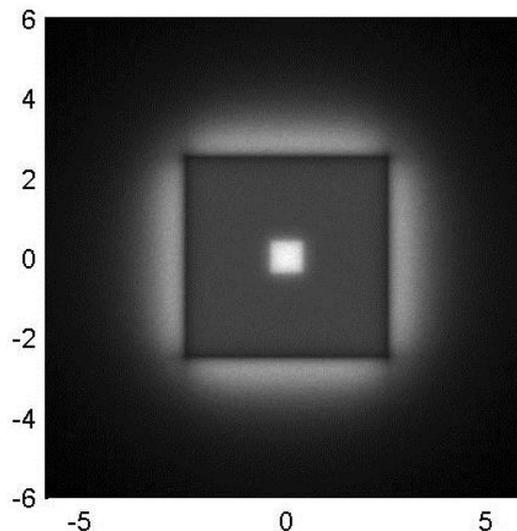


Рис. 9

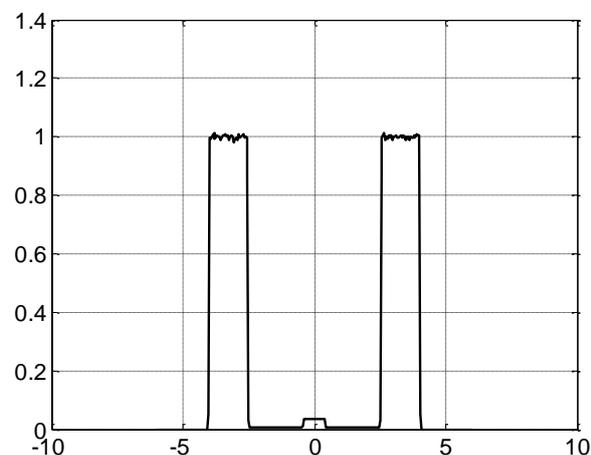


Рис. 10

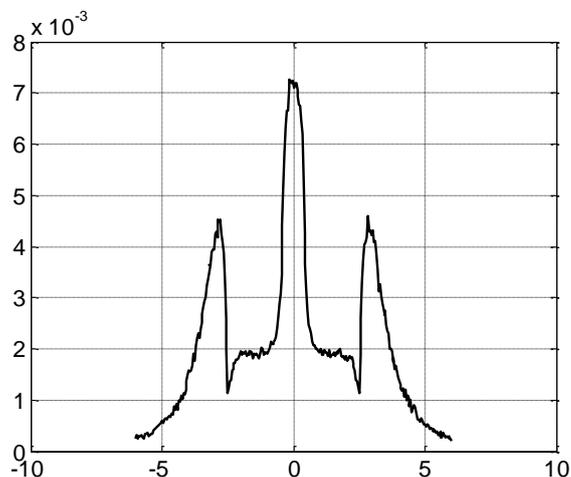


Рис. 11

На рисунках 10 и 11 изображены графики зависимости интенсивности регистрируемого излучения $I(x)$ при $y = 0$ (x - координата детектора по горизонтали, y - по вертикали). Из этих графиков видно, что относительное изменение интенсивности прямого излучения (в окрестности $x = 0$), обусловленное наличием полости, мало заметно на фоне максимальной интенсивности (рис.10), в то время как аналогичное изменение в рассеянном излучении (рис.11) весьма велико. Отметим также хорошо заметное подчеркивание границ объекта на изображении, формируемом рассеянным излучением (рис.9).

Рассмотрим этот эффект более подробно. Пусть на пластину толщиной d вертикально падает монохроматическое излучение, средняя длина пробега фотонов которого в материале пластины равна r , причем $d > r$ (рис.12).

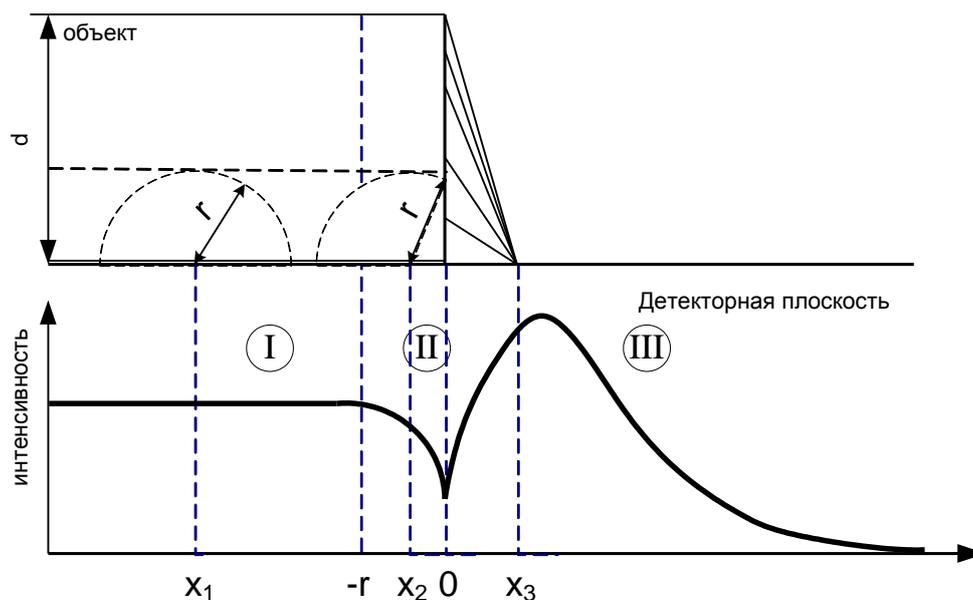


Рис. 12

Очевидно, что основной вклад в детектор, регистрирующий рассеянное излучение в точке x , вносят фотоны, рассеянные внутри сферы радиуса r . В этом случае можно выделить три области на детекторной плоскости, отличающиеся различным вкладом рассеянных фотонов. Область I – множество всех детекторов, для которых указанная выше полусфера целиком лежит внутри материала. Очевидно, интенсивность излучения в этих детекторах будет одинаковой. В области II ($-r < x < 0$) объем рассеивающего вещества, дающий вклад в соответствующие детекторы, уменьшается с приближением к границе пластины до половины полусферы для точек, лежащих на границе. Наконец, в области III ($x > 0$) вклад в детекторы вносит излучение, рассеянное в прямоугольной области $-r < x < 0$ по всей толщине пластины, поскольку вылетевшие за пределы объекта фотоны не испытывают поглощения. Поэтому происходит увеличение интенсивности регистрируемого излучения. Затем эта величина достигает максимума и уменьшается в соответствии с угловым распределением рассеянных фотонов. Описанная выше закономерность формирования радиографического образа объекта в рассеянном излучении хорошо видна на рис.11 в окрестности края пластины ($x \approx \pm 2.5$). Величина максимума и его положение зависит от соотношения величин d и r . В случае $d < r$ максимума интенсивности нет. Детально рассмотренные эффекты обсуждаются в [10].

Приведенные примеры изображений структуры объекта свидетельствуют о важности учета и анализа рассеянного излучения в задачах радиографического контроля, причем в ряде случаев такой анализ проще и дешевле проводить средствами математического моделирования.

Литература.

1. *Радиоизотопная дефектоскопия*. М., Атомиздат, 1976.
2. J.F.Briesmeister (ed.). *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*. LANL Report LA-13709-M, Los Alamos, 2000.
3. В.П.Загонов, М.Е.Жуковский, С.В.Подolyako, М.В.Скачков, Г.-Р.Тиллак, К.Беллон. *Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации рентгеновского излучения в задачах вычислительной диагностики*. М., Математическое моделирование. 2004, т.16, №5, с.103-116.
4. *Proceedings of the 2nd International Conference on Computer Methods and Inverse Problems in Nondestructive Testing and Diagnostics*. Minsk, Belarus, DGZfP Berichtsband 64, 1998.
5. J.H.Hubbell, W.J.Veigele, E.A.Briggs, R.T.Brown, D.T.Cromer, and R.J.Howerton. *Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections*. J. Phys. Chem. Ref. Data **4**, 471-538 (1975); erratum in **6**, 615-616 (1977).
6. J.H.Hubbell, and Overbo. *Relativistic Atomic Form Factors and Photon Coherent Scattering Cross Sections*. J. Phys. Chem. Ref. Data **8**, 69-105, (1979).
7. У.Фано, Л.Спенсер, М.Бергер. *Перенос гамма-излучения*. Госатомиздат, Москва, 1963.
8. *Экспериментальная ядерная физика*, под ред. Э. Сегре, Издательство «Иностранной литературы», Москва, 1955.
9. V.P.Zagonov, S. V.Podolyako, G.-R.Tillack, C.Bellon. *Fast 3D ray tracer algorithm for cone beam radiography*. 3-я международная конференция «Компьютерные методы и обратные задачи в неразрушающем контроле и диагностике», Москва 2002, с.102.
10. J.Encarna and W Straßer. *Computer Graphics*. Oldenburg Verlag, München, 1986.
11. Jiadong Xu, R.M. Wallingford, T.Jensen, and J.Gray. *Recent developments in the X-Ray Radiography Simulation Code: XRSIM*. In: D.O.Thompson and D.E.Chimenti (Eds.). *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, Volume 13, pp. 557-562, Plenum Press, 1994.
12. A. Gliere. Sindbad. *From CAD Model to Synthetic Radiographs*. In: D.O.Thompson and D.E.Chimenti (Eds.). *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, Volume 14, pp. 353-359, Plenum Press, 1995.
13. C.Bellon, G.-R.Tillack, C Nockemann, and L Stenzel. *Computer Simulation of X-Ray NDE Process Coupled With CAD Interface*. In: D.O.Thompson and D.E.Chimenti (Eds.). *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, Volume 16, pp. 325-330, Plenum Press, 1997.
14. V.M.Artemiev, J.N.Gray, G.-R.Tillack. *Scattering effect in radiation techniques – theory and experiment*. Computer Methods and Inverse Problems in Nondestructive Testing and Diagnostics. The 2nd International Conference Minsk, Belarus, DGZIP, Berichtsband 64, 323-330, 1998.