

## Введение

Математическое моделирование процессов взаимодействия ионизирующего излучения с объектами сложной геометрии и внутренней структуры имеет важное значение во многих приложениях. В частности, в рамках задач рентгеновской диагностики материалов и конструкций требуется определить и проанализировать рентгеновские изображения исследуемых объектов, а при исследовании электромагнитного воздействия проникающего излучения необходимо проанализировать распределение потоков релятивистских электронов, возникающих в результате взаимодействия ионизирующего излучения с материалами объектов.

Для решения указанных прикладных задач разработан расчётно-методический аппарат, основанный на поверхностно ориентированном описании многомерных объектов сложной формы. 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 плоскости, основанный на определении точек пересечения луча «источник-детектор» с разделяющими гомогенные части объекта поверхностями [1];
- Методика 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.

Основные особенности указанного выше расчётного алгоритма опубликованы в [2]. В [2] рассмотрена, также, реализация метода Монте – Карло и его модификаций в сочетании с использованием поверхностно ориентированного описания объектов. За рамками статьи [2] осталось несколько приёмов увеличения эффективности расчётов методом Монте – Карло в следующих важных частных случаях:

- Имеет место «ужесточение» энергетического спектра, которое заключается в более интенсивном поглощении низкоэнергетических фотонов и соответствующем снижении их вклада в формирование рентгеновского изображения исследуемого объекта;
- Требуется определить рентгеновское изображение объекта, оптическая толщина которого больше трёх пробегов фотона;
- Требуется получить плотность потока электронов, инжектируемых с поверхности объекта, толщина оболочки которого значительно превышает величину пробега электрона в приповерхностном материале объекта.

В настоящей работе приводится более полное (с учётом указанных выше частных случаев) описание метода Монте – Карло и его модификаций, реализованных в вычислительном комплексе для математического моделирования процессов трансформации ионизирующего излучения в кусочно-однородных структурах.

## **§1. Описание основного алгоритма расчётов методом Монте – Карло**

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. Для энергетического диапазона рентгеновского излучения (до 1 МэВ) основными типами такого взаимодействия являются:

- фотоэлектрическое поглощение, когда фотон исчезает;

- когерентное (Рэлеевское) рассеяние, приводящее к изменению направления движения кванта без изменения его энергии;
- некогерентное (Комптоновское) рассеяние, когда изменение направления движения фотона сопровождается уменьшением его энергии.

С физической точки зрения поток рассеянных фотонов может быть описан с помощью уравнения Больцмана [3] без учета внутренних источников излучения, таких как источники флуоресцентного рентгеновского излучения. Можно показать, что постановка задачи о переносе излучения с использованием уравнения Больцмана может быть эквивалентно переформулирована в терминах совокупности обыкновенных стохастических дифференциальных уравнений первого порядка Ланжевеновского типа, подразумевающих Марковские свойства рассматриваемых процессов [4]. Это дает основание для применения метода Монте-Карло для решения задач о трансформации рентгеновского излучения в объектах.

Рассмотрим основные особенности моделирования траекторий частиц внутри объекта. 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:

- вычисляется конец текущего звена траектории путем розыгрыша случайной величины – длины пути фотона до точки взаимодействия;
- в случае, если конец звена лежит вне объекта, траектория считается оконченной, в противном случае определяется (розыгрывается) тип взаимодействия частицы с веществом той компоненты объекта, в которой лежит конец данного звена: если оказывается, что типом взаимодействия

- является фотоэффект, траектория фотона считается оконченной, иначе определяется вид рассеяния (когерентное или некогерентное);
- вычисляется новое направление движения кванта путем розыгрыша случайной величины – угла рассеяния фотона.

Остановимся на каждом из этих этапов подробнее.

Для определения конца очередного звена траектории фотона реализован алгоритм, состоящий из следующих основных шагов.

Сначала определяется оптическая толщина объекта  $b_t$  в направлении движения фотона от начала звена до выхода из объекта, при этом используется описанный в [2] алгоритм нахождения точек пересечения соответствующего луча с оболочками, разделяющими гомогенные части

объекта. Очевидно,  $b_t = \sum_{k=1}^{K-1} b_k$ ,  $b_k = \mu_k (z_{k+1} - z_k)$ , где  $z_k$  - координаты

точек пересечения (в локальной системе координат, начало которой совпадает с началом текущего звена траектории, а ось  $z$  с направлением движения фотона) указанного луча с разделяющими оболочками,  $z_1 = 0$  - начало звена, а  $\mu_k$  - соответствующие коэффициенты ослабления.

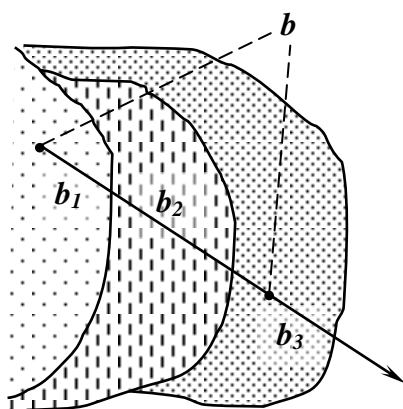


Рис.1

Затем, в соответствии с законом ослабления излучения в веществе, разыгрывается длина данного звена траектории  $b$ , измеренная в длинах пробегов фотонов в материалах пересекаемых компонент объекта. А именно, если  $\gamma$  - равномерно распределенная случайная величина ( $\gamma \in (0,1)$ ), то  $b = \sum_i b_i = -\ln \gamma$ , где  $b_i$  -

безразмерная толщина  $i$ -той пересекаемой компоненты, а сумма берется по всем пересекаемым компонентам.

Теперь, если оказывается, что  $b > b_t$ , то фотон считается вылетевшим из объекта. В противном случае определяется минимальное  $j$  такое, что

$$b \leq \sum_{k=1}^j b_k \text{ (на рис.1 - } j = 3\text{)}.$$

Тогда  $\Delta b = b - \sum_{k=0}^{j-1} b_k$ ,  $b_0 = 0$ , а соответствующая координата конца

звена определяется по формуле:  $z = z_j + \Delta b / \mu_j$ .

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  $\rho_{ph}, \rho_r, \rho_c$  соответственно. Эти вероятности вычисляются через коэффициент ослабления  $\mu(\epsilon)$  излучения в веществе, который является суммой величин  $\mu_{ph}, \mu_r, \mu_c$ , выражающих вклад соответствующих процессов и пропорциональных их полным сечениям:  $\mu = \mu_{ph} + \mu_r + \mu_c$ . Поэтому  $\rho_{ph} = \mu_{ph} / \mu$ ,  $\rho_r = \mu_r / \mu$  и  $\rho_c = \mu_c / \mu$ .

Следующим этапом алгоритма является определение направления 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

$$f(\cos \theta, \varepsilon) = f_0(\varepsilon) \left\{ \frac{1}{[1 + \varepsilon(1 - \cos \theta)]^2} \left[ 1 + \cos^2 \theta + \frac{\varepsilon^2 (1 - \cos \theta)^2}{1 + \varepsilon(1 - \cos \theta)} \right] \right\},$$

$$\text{где } f_0(\varepsilon) = \left[ \int_{-1}^1 f(s, \varepsilon) ds \right]^{-1}.$$

В случае когерентного рассеяния – формулой Томпсона

$$f(\cos \theta) = \frac{3}{8} (1 + \cos^2 \theta).$$

Имея нормированное распределение  $f(x)$ ,  $x = \cos \theta$ ,  $\theta$  - полярный угол отклонения кванта от направления движения до рассеяния, и равномерно распределенную в интервале (0,1) случайную величину  $\gamma$ , величину  $x$  можно получить из уравнения (см., например, [5])

$$F(x, \varepsilon) = \int_x^1 f(s, \varepsilon) ds = \gamma, \quad \varepsilon - \text{энергия кванта.} \quad (1)$$

Азимутальный угол  $\varphi$  определяется по формуле  $\varphi = 2\pi\gamma$ , причем в этой формуле и в (1)  $\gamma$  - независимые случайные числа.

Основную трудность при определении полярного угла  $\theta$  представляет решение уравнения (1)  $x = F^{-1}(\gamma, \varepsilon)$ . Вычисление этого угла на каждом звене траектории, учитывая, что число таких траекторий может достигать  $10^{10}$ , требует огромных вычислительных затрат. Поэтому в алгоритме предусмотрено использование заранее подготовленных двумерных таблиц  $x(\gamma, \varepsilon)$ , построенных с заданной точностью на равномерных сетках по  $\gamma$  и  $\varepsilon$ . При этом внимание уделяется как точности вычисления интеграла в (4), так и требованию малости изменения значений в соседних ячейках таблиц. Применение этих таблиц позволяет свести вычисление косинуса полярного угла рассеяния фотона к нескольким арифметическим операциям определения номера элемента двумерного массива  $x(\gamma, \varepsilon)$ .

На рис.2, 3 изображены графики функций  $f(x, \varepsilon)$  и  $x(\gamma, \varepsilon)$  соответственно, для случая комптоновского рассеяния при значениях энергии  $\varepsilon = 0$  (кривая обозначена цифрой 1),  $\varepsilon = 50$  (2),  $\varepsilon = 100$  (3) и  $\varepsilon = 150$  кэВ (4). Отметим, что кривая 1 соответствует также угловому распределению фотонов при когерентном рассеянии, в этом случае ситуация существенно упрощается, поскольку сечение этого процесса не зависит от энергии фотона.

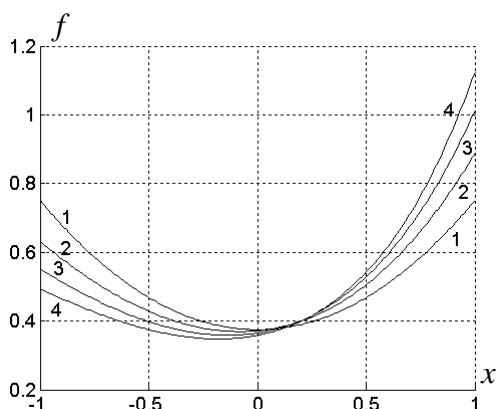


Рис.2

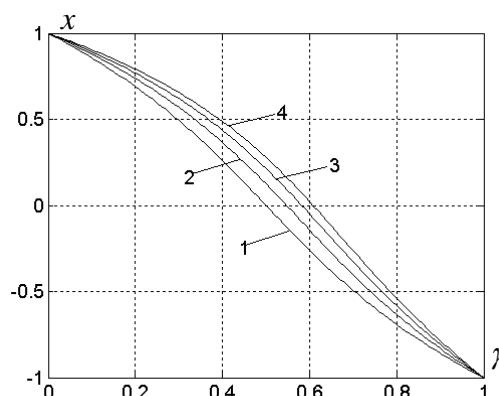


Рис.3

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.

Существуют приемы увеличения эффективности расчетов методом Монте-Карло, которые так или иначе связаны с увеличением информации, извлекаемой из отдельной траектории фотона. В основном алгоритме реализованы две, помимо прямых испытаний, модификации метода Монте-Карло, являющиеся результатом аналитических методов решения задачи, позволяющих заменить одну из случайных величин ее вероятным значением.

В первой из этих модификаций вместо того, чтобы путем розыгрыша случайной величины определять приведет ли данный акт взаимодействия к поглощению или к рассеянию фотона, полагаем, что фотон всегда рассеива-

ется с весом, равным вероятности «выживания»  $w_s = \mu_s/\mu$ . Этот вес имеет смысл средней доли фотонов в данной истории, которые не поглотились в данном акте взаимодействия. Таким образом, в процессе движения фотон в каждом столкновении выживает с соответствующим уменьшением веса

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

Таким образом, 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.

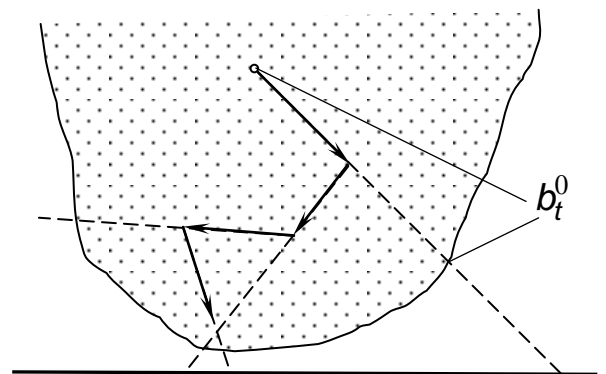


Рис.4

Вероятность  $\rho_n$  того, что после  $n - 1$ -го столкновения фотон попадет на детекторную плоскость, равна (см. рис.4)

$\rho_n = e^{-b_t^n}$ , если луч вдоль направления движения пересекает эту плоскость, и

$\rho_n = 0$ , в противном случае.

Вклад  $n$ -го звена в общий результат будет иметь вид

$$Q = w_n \rho_n.$$

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.

Важным моментом при использовании метода Монте-Карло является выбор генератора случайных чисел, равномерно распределенных в интервале  $(0, 1)$ . Современные стандартные генераторы случайных чисел (например, входящие в стандартные библиотеки фортрана) дают, как правило, хороший результат и требуют весьма скромных вычислительных затрат. Однако, применение таких генераторов иногда бывает ограничено версией установленного программного обеспечения, что вызывает затруднения при переносе разрабатываемых программ с одного вычислительного комплекса на другой. Поэтому в настоящей работе использовались генераторы, не зависящие от операционной системы и комплектности стандартных библиотек. А именно, применялся генератор [6] и так называемые ЛП<sub>τ</sub> - последовательности [7].

Генератор [6] по быстродействию и качеству случайных чисел вполне аналогичен стандартным, в то время как применение ЛП<sub>τ</sub> - последовательностей с использованием экономичного способа их вычислений [8] позволяет сэкономить во многих задачах более 20% расчетного времени при том же качестве результатов.

Приведем описание тестирования разработанной методики расчета интенсивности проникающего излучения.

Отметим, во-первых, что использованная модификация метода Монте-Карло обеспечивает практически точное вычисление интенсивности нерассеянного (первичного) излучения согласно закону ослабления, так как при весовом способе подсчета числа нерассеянных фотонов, достигших детекторной плоскости, статистическая погрешность метода Монте-Карло слабо влияет на результат. Поэтому при проведении расчетов с помощью статистических испытаний необходимым является совпадение результатов

вычисления параметров нерассеянного излучения с аналогичными величинами, рассчитанными без использования метода Монте-Карло, например, с помощью алгоритма [1].

Выбор теста для проверки качества результатов расчета рассеянного излучения является значительно более трудной задачей. Однако удастся построить достаточно простое аналитическое решение для однократно рассеянных фотонов от коллимированного источника ионизирующего излучения падающего перпендикулярно на пластину толщиной  $d$  вдоль оси  $z$ . А именно, зависимость интенсивности  $J$  однократно рассеянного излучения (под интенсивностью излучения здесь понимается количество зарегистрированных фотонов на единицу площади детектора) от расстояния  $x$  от начала координат, расположенного на детекторной плоскости, определяется формулой:

$$J(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} d\varepsilon \cdot f(\varepsilon) \int_0^d \mu_s(\varepsilon) dz \cdot e^{-\mu(\varepsilon)(d-z)} \cdot \rho_s(\varepsilon, z/r) \cdot \frac{z}{r^3} \cdot e^{-\mu(\varepsilon', z/r)r}.$$

В этой формуле  $r = \sqrt{z^2 + x^2}$ ,  $\varepsilon$  - энергия падающего фотона,  $\varepsilon'$  - энергия рассеянного фотона,  $f(\varepsilon)$  - нормированный спектр излучения,  $\mu_s(\varepsilon)$  - коэффициент рассеяния (когерентного или некогерентного),  $\mu(\varepsilon)$  - коэффициент ослабления проникающего излучения,  $\rho_s$  - плотность вероятности рассеяния.

Результаты расчетов, проведенных для различных материалов и различных характерных энергий ионизирующего излучения, показали, что их отличие от тестовых значений находится в пределах статистической погрешности вычисления рассеянного излучения. Описанный выше алгоритм реализован в виде параллельного программного комплекса с использованием интерфейса MPI, ориентированного на многопроцессорные вычислительные системы. Расчеты проводились на МВС-1000М.

## §2. Модификации метода Монте – Карло при «ужесточении» энергетического спектра

При получении рентгеновского изображения объекта, находящегося под воздействием рентгеновского излучения от полиэнергетического источника имеет место трансформация энергетического спектра источника в энергетический спектр фотонов, регистрируемых на детекторной плоскости. Поскольку низкоэнергетичные фотоны имеют больший коэффициент ослабления, чем высокоэнергетичные, то они дают, соответственно, меньший вклад в формирование рентгеновского изображения за объектом. В связи с этим происходит смещение и локализация в области высоких энергий энергетического спектра фотонов, регистрируемых на детекторной плоскости. Чем больше оптическая толщина объекта, тем сильнее эта локализация, которую будем называть «ужесточением» энергетического спектра.

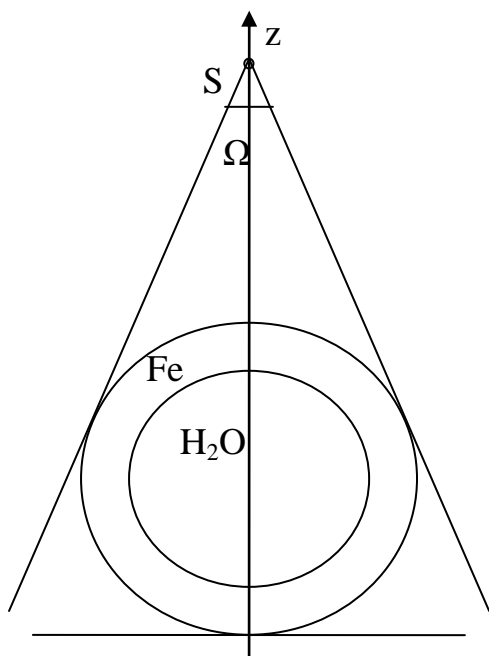


Рис.5

В качестве примера рассмотрим следующий эксперимент (рис.5). Железная ( $Fe$ ) труба, заполненная водой ( $H_2O$ ), находится под воздействием рентгеновского излучения от точечного источника ( $S$ ). Ось  $z$  проходит через источник и пересекает ось симметрии трубы под прямым углом. Интенсивность прошедшего объект излучения регистрируется на детекторной плоскости  $z = 0$ , которая касается внешней поверхности трубы. Ось  $y$  параллельна оси симметрии

трубы. Источник расположен в точке с координатой  $z_s = 100$  см и излучает в телесный угол  $\Omega = 0,1629$ , ось симметрии которого совпадает с осью  $z$ . Внешний радиус трубы –  $R_1 = 5$  см.; внутренний радиус трубы –  $R_2 = 4,5$  см.

Прошедшее объект излучение складывается из двух составляющих: нерассеянного и рассеянного излучений. На детекторной плоскости можно выделить теньевую область, в которой регистрируется интенсивность нерассеянного излучения, прошедшего сквозь объект. На рис.6 приведены графики отношения интенсивностей нерассеянного и рассеянного излучений в теневой области на центральном срезе трубы ( $y = 0$ ) к интенсивности источника. Кривая, помеченная точками, относится к нерассеянному излучению. Интенсивность источника на плоскости  $z = 0$  описывается формулой:

$$I_0(x, y) = \frac{z_s}{r^3} \cdot \frac{dN}{d\Omega}, \quad r^2 = z_s^2 + x^2 + y^2,$$

где  $\frac{dN}{d\Omega} = const$ ,  $dN$  – количество фотонов, выпущенных источником в элемент телесного угла  $d\Omega$ . На рис.7 приведены аналогичные графики для меньшего внутреннего радиуса трубы  $R_2 = 4$  см. В этом случае объект имеет большую оптическую толщину, поскольку труба толще, и коэффициент ослабления железа на порядок больше коэффициента ослабления воды. Это обстоятельство приводит к тому, что значения интенсивностей на рис.7 на два порядка меньше, чем на рис.6.

На рис.8 приведены графики энергетического спектра источника и плотность распределения рассеянных фотонов, зарегистрированных в детекторе  $(x, y) = (0, 0)$ , по их начальным энергиям (энергиям, которые они имели на выходе из источника) для трубы с внутренним радиусом  $R_2 = 4,5$  см., а на рис.9 приведены аналогичные графики для трубы с внутренним радиусом  $R_2 = 4$  см. На обоих рисунках кривая энергетического спектра источника имеет один и тот же вид. Вторая кривая сильно

отличается от энергетического спектра источника и на рис.9 локализована в области высоких энергий сильнее, чем на рис.8.

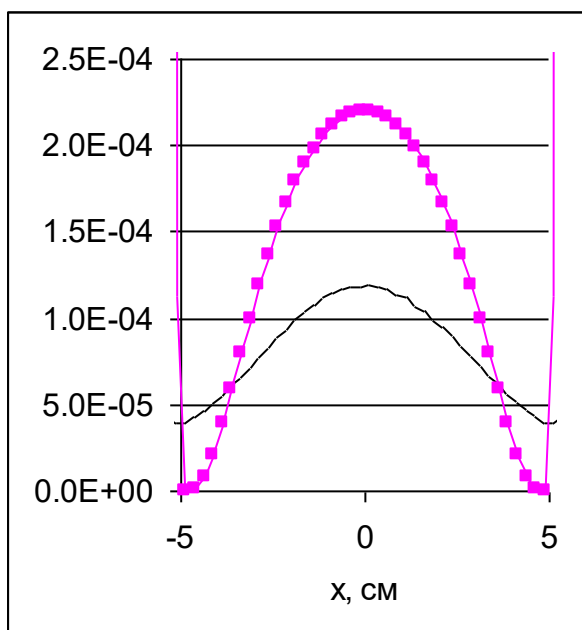


Рис.6

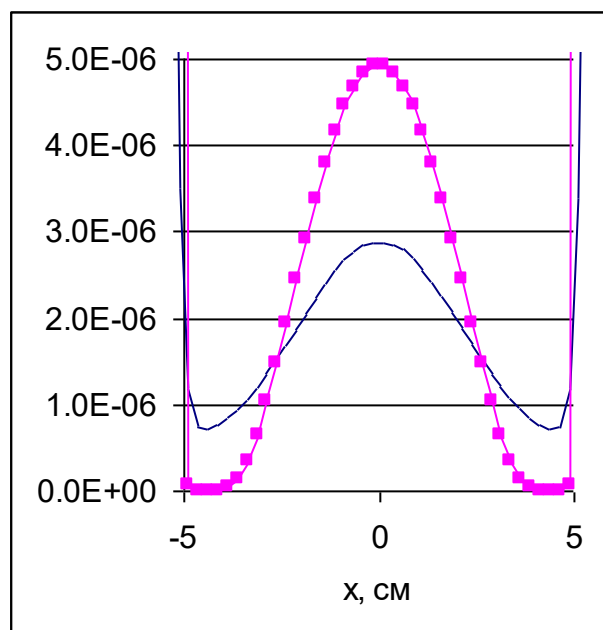


Рис.7

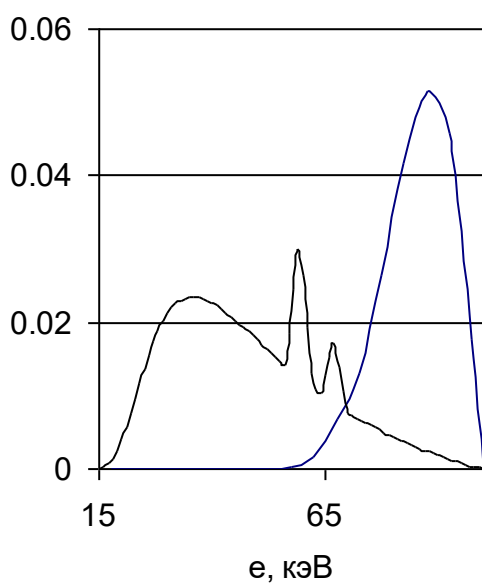


Рис.8

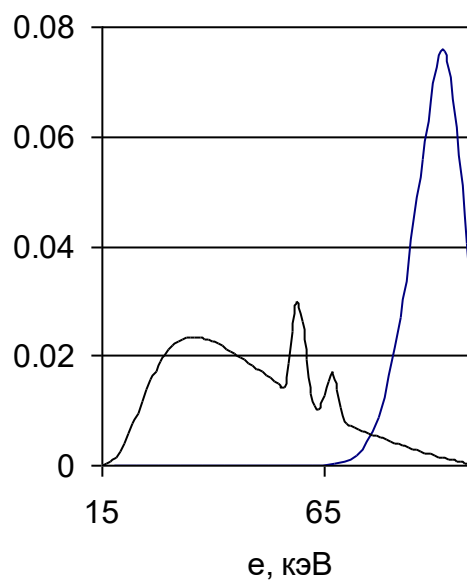


Рис.9

Априорную информацию об «ужесточении» энергетического спектра полиэнергетических источников целесообразно использовать для повышения эффективности расчётов методом Монте – Карло. В прямых испытаниях методом Монте – Карло моделируются траектории фотонов, имеющих

энергетическое распределение источника. На рис.8,9 видно, что основная доля этих фотонов имеет энергии от 20 кэВ в то время, как в детекторе регистрируются, в основном, фотоны с более высокими энергиями от 65 кэВ. Это обстоятельство наводит на мысль об изменении энергетического распределения фотонов, моделируемых методом Монте – Карло, путём введения их начальных весов

$$W_0 = \frac{dn_\gamma(E)}{dn(E)}. \quad (2)$$

Здесь  $dn_\gamma(E)$  – доля фотонов в источнике с энергией  $E$ ,  $dn(E)$  – доля фотонов с энергией  $E$ , моделируемых методом Монте – Карло. Таким образом, плотность распределения  $f(E) = dn/dE$  фотонов с весами (2) отличается от энергетического спектра источника  $f_\gamma(E) = dn_\gamma/dE$  и связана с ним соотношением

$$f_\gamma(E) = W_0 \cdot f(E). \quad (3)$$

Из формулы (3) следуют два простых частных случая.

1. Если  $f(E) = f_\gamma(E)$ , то  $W_0 \equiv 1$ .
2. Если  $f(E) = (E_{\max} - E_{\min})^{-1} = const$ , то  $W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$ .

В первом случае фотоны имеют единичные начальные веса и распределены по энергии с плотностью  $f_\gamma(E)$ . Во втором частном случае фотоны распределены равномерно по соответствующему энергетическому диапазону  $(E_{\min}, E_{\max})$  и имеют начальные веса, распределённые по энергии прямо пропорционально энергетическому спектру  $f_\gamma(E)$  используемого полиэнергетического источника.

В табл.1 приведено сравнение статистической погрешности расчётов в указанных частных случаях и при

$$f(E) = \frac{1}{E_{\max} - E_{\min}} \cdot \begin{cases} 0,1 & \text{при } E \in (15\text{кэВ}, 50\text{кэВ}) \\ 1 & \text{при } E \in (50\text{кэВ}, 65\text{кэВ}) \\ 1,9 & \text{при } E \in (65\text{кэВ}, 100\text{кэВ}) \end{cases}. \quad (4)$$

Первые три строчки таблицы соответствуют внутреннему радиусу трубы  $R_2 = 4,5$  см., последние три строчки –  $R_2 = 4$  см. Статистическая погрешность рассчитана по формуле:

$$d = \left[ \frac{\iint D \cdot dx \cdot dy}{\iint I^2 \cdot dx \cdot dy} \right]^{1/2} \cdot 100\%, \quad (5)$$

где  $I$  – интенсивность рассеянного излучения,  $D$  – оценка дисперсии интенсивности, интегрирование ведётся по теневой области на детекторной плоскости. Оценка дисперсии производится по следующей классической формуле:

$$D = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^N (I_k - I)^2, \quad I = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N I_k,$$

где  $N$  – количество вычислений,  $I_k$  – результат  $k$ -го вычисления интенсивности рассеянного излучения при фиксированном числе фотонов. Заметим, что детекторы на плоскости  $z=0$  имеют конечные размеры ( $\Delta x = 0,25$  см.,  $\Delta y = 0,25$  см.), поэтому интегрирование в формуле (5) заменяется суммированием по детекторам, расположенным в теневой области детекторной плоскости.

**Таблица 1**

Внутр. радиус	Начальный вес фотона	Время вычислений (мин.)	Погрешность d, %
$R_2 = 4,5$ см.	$W_0 \equiv 1$	257	1,49
$R_2 = 4,5$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$	257	0,69
$R_2 = 4,5$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) / f(E)$ .	257	0,50
$R_2 = 4$ см.	$W_0 \equiv 1$	260	8,22
$R_2 = 4$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$	260	3,43
$R_2 = 4$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) / f(E)$ .	260	2,28

Из результатов, приведённых в табл.1, следует, что наибольшая погрешность расчётов имеет место в первом частном случае ( $W_0 \equiv 1$ ). Во втором частном случае ( $W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$ ) погрешность в несколько раз меньше. Наименьшее значение погрешности получено в последнем случае (3-я и 6-я строчки таблицы).

Таким образом, для полиэнергетических источников имеет смысл использовать те модификации метода Монте – Карло, в которых фотоны имеют начальные веса, зависящие от энергии, и энергетическое распределение, отличающееся от энергетического спектра используемого источника. В простейшем случае целесообразно использовать равномерное распределение фотонов (второй частный случай). Если необходимо, то можно провести дополнительный расчёт с учётом энергетического спектра фотонов, регистрируемого на детекторной плоскости. Такой способ оптимизации метода Монте – Карло относится к классу методов, которые в литературе называют «выборкой по значимости». Выборка по значимости в данном случае означает, что количество фотонов, направляемых алгоритмом в тот или иной энергетический интервал, должно быть пропорционально некой функции важности (4) этого интервала в формировании изображения объекта на детекторной плоскости.

### **§3. Модификация метода Монте – Карло при большой оптической толщине объекта**

При работе с объектами, оптическая толщина которых больше нескольких пробегов фотона, подавляющее число фотонов застревает в слое, находящемся под облучаемой поверхностью объекта, и, рассеиваясь, покидает объект через ту же облучаемую поверхность. Однако вклад этих фотонов в изображение объекта на детекторной плоскости, расположенной с противоположной стороны объекта, не столь велик. В связи с этим представляется целесообразным изменить алгоритм Монте – Карло в том



месте, где разыгрывается длина звена траектории фотона до точки взаимодействия.

Рассмотрим движение фотонов в материале объекта в направлении оси  $z$  из заданной точки пространства  $z = 0$  (см. рис.1). Доля фотонов, рассеянных в интервале  $(z, z + dz)$  есть

$$dn_\gamma = \mu_s(z) \cdot \exp\left\{-\int_0^z \mu(z') dz'\right\} \cdot dz, \quad (6)$$

где  $\mu_s = \mu - \mu_{ph}$ ,  $\mu_{ph}$  – коэффициент ослабления за счёт фотоэлектрического поглощения. Доля фотонов, провзаимодействующих в интервале  $(z, z + dz)$  есть

$$dn = \mu(z) \cdot \exp\left\{-\int_0^z \mu(z') dz'\right\} \cdot dz. \quad (7)$$

В основном алгоритме Монте – Карло (§1) длина пути фотона до точки взаимодействия  $z$  разыгрывается в соответствии с плотностью распределения (7). При этом фотон рассеивается с весом

$$W_s = \frac{dn_\gamma}{dn} = \frac{\mu_s(z)}{\mu(z)}, \quad (8)$$

который трактуется как вероятность «выживания» фотона в акте взаимодействия.

Из (8) видно, что вес фотона равен, по определению, отношению двух величин  $dn_\gamma$  и  $dn$ . Первая величина определена физической моделью рассеяния (6). Вторая величина – плотность распределения фотонов, рассеиваемых в алгоритме Монте – Карло по длине пути, может выбираться произвольным образом. В частности, можно положить

$$dn = \mu_s(z) \cdot \exp\left\{-\int_0^z \mu_s(z') dz'\right\} \cdot dz. \quad (9)$$

Тогда фотон будет рассеиваться с весом

$$W_s = \frac{dn_\gamma}{dn} = \exp \left\{ - \int_0^z \mu_{ph}(z') dz' \right\}, \quad (10)$$

который можно трактовать как вероятность «выживания» фотона на длине пути  $(0, z)$ . При такой модификации метода Монте – Карло, при которой длина звена траектории фотона разыгрывается в соответствии с плотностью распределения (9), фотоны глубже проникают в объект, поскольку  $\mu_s / \mu < 1$  (для железа и энергии фотона меньше 100 кэВ выполнено неравенство  $(\mu_s / \mu) < (1/3)$ ).

Для сравнения основного алгоритма Монте – Карло с его модификацией на основе формул (9-10) рассмотрим эксперимент, описанный в предыдущем параграфе (см. рис.5). В табл.1 приведены погрешности вычислений, проведённых с помощью основного алгоритма (7-8). В табл.2 содержатся погрешности аналогичных вычислений, проведённых с помощью модифицированного алгоритма (9-10).

**Таблица 2**

Внутр. радиус	Начальный вес фотона	Время вычислений (мин.)	Погрешность d, %
$R_2 = 4,5$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$	188	0,32
$R_2 = 4,5$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) / f(E)$ .	188	0,23
$R_2 = 4$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) \cdot (E_{\max} - E_{\min})$	215	0,62
$R_2 = 4$ см.	$W_0 = f_\gamma(E) / f(E)$ .	215	0,44

Кроме погрешностей в таблицах указано время вычислений с использованием  $10^{10}$  фотонов и 200 процессоров многопроцессорной системы МВС-5000М. Преимущество модифицированного алгоритма (9-10) в рассматриваемом примере очевидно. Наряду с существенным уменьшением погрешности наблюдается небольшой выигрыш во времени вычислений, связанный с увеличением вероятности вылета фотона из объекта.

#### §4. Модификация метода Монте – Карло в задачах о формировании электронных потоков

В задачах, связанных с исследованием электромагнитного воздействия проникающего излучения, необходимо получать распределения потоков релятивистских электронов, возникающих в результате взаимодействия ионизирующего излучения с материалами объекта. Моделирование процесса рождения электронов и их регистрации на детекторной плоскости можно осуществить с использованием основного метода Монте – Карло, описанного в §1. Для этого достаточно процессы взаимодействия квантов излучения с веществом сопровождать рождением электронов, и для каждого рождённого электрона подсчитывать вероятность вылета из объекта согласно закону ослабления:

$$p = \exp \left\{ - \int_0^r \mu_e(E, r') dr' \right\},$$

где  $\mu_e(E, r)$  – коэффициент ослабления электронного потока в материале объекта,  $r$  – длина пути электрона в объекте,  $E$  – энергия электрона. Рождением электронов сопровождаются два типа рассматриваемых взаимодействий: фотоэлектрическое поглощение и комптоновское рассеяние фотона.

При комптоновском рассеянии фотона рождается электрон со следующими параметрами.

– кинетическая энергия электрона:  $E = E_\gamma - E'_\gamma$ , где  $E_\gamma$  и  $E'_\gamma$  – энергии фотона до и после рассеяния соответственно;

– полярный угол движения электрона в системе координат, связанной с первоначальным движением фотона:

$$\cos \theta'_e = \frac{E_\gamma - E'_\gamma \cdot \cos \theta'_\gamma}{p_E}, \quad p_E = \sqrt{E(2m_e c^2 + E)},$$

где  $\cos \theta'_\gamma$  – косинус угла рассеяния фотона;

- азимутальный угол движения электрона:  $\varphi'_e = \pi + \varphi'_\gamma$ , где  $\varphi'_\gamma$  – азимутальный угол рассеяния фотона;
- начальный вес электрона:  $q_e^{(c)} = W_\gamma \cdot p_c$ , где  $W_\gamma$  – вес фотона до рассеяния,  $p_c$  – вероятность комптоновского рассеяния в точке взаимодействия (см. стр.7).

При фотоэлектрическом поглощении фотона рождается электрон со следующими параметрами.

- кинетическая энергия электрона:  $E = E_\gamma - E_0$ , где  $E_\gamma$  – энергия фотона до поглощения,  $E_0$  – энергия связи К-оболочки в атоме вещества;
- полярный угол движения электрона в системе координат, связанной с первоначальным движением фотона, разыгрывается с использованием углового распределения:

$$f(x, v) = f_0(v) \cdot \frac{1 - x^2}{(1 - vx/c)^4}, \quad x = \cos \theta'_e, \quad f_0(v) = \left[ \int_{-1}^1 f(x, v) dx \right]^{-1},$$

где  $v$  – скорость электрона с энергией  $E$ ,  $c$  – скорость света;

- азимутальный угол движения электрона разыгрывается по формуле:

$$\varphi'_e = 2\pi\gamma;$$

- начальный вес электрона:  $q_e^{(ph)} = W_\gamma \cdot p_{ph}$ , где  $W_\gamma$  – вес фотона до поглощения,  $p_{ph}$  – вероятность фотоэлектрического поглощения в точке взаимодействия (см. стр.7).

Таким образом, в точке взаимодействия фотона с веществом объекта рождается два электрона: комптоновский электрон и фотоэлектрон.

Указанный способ моделирования процесса рождения электронов оказывается неработоспособным в случае, когда толщина объекта во много раз превышает величину пробега электрона в материале объекта. В этом случае лишь незначительная часть электронов, рождённых в тонком приповерхностном слое объекта, даст сколько-нибудь заметный вклад в формирование электронного потока на детекторной плоскости. Поэтому

необходимо модифицировать алгоритм Монте – Карло, изменив статистику рождения электронов.

Естественным шагом в этом направлении является выделение эффективного слоя у поверхности объекта (рис.10) толщиной  $d$ . При этом в алгоритме может понадобиться описать дополнительную поверхность, ограничивающую указанный слой. Далее все процессы, связанные с рождением электронов на каждом звене траектории фотона, можно моделировать отдельно от процессов, связанных с рассеянием фотона. В частности, точку рождения электрона можно разыгрывать на отрезке  $[h_1, h_2]$  (см. рис.10), соединяющем точки пересечения соответствующего луча с границами эффективного слоя. Для этого используется условная плотность распределения точек взаимодействия кванта на этом отрезке:

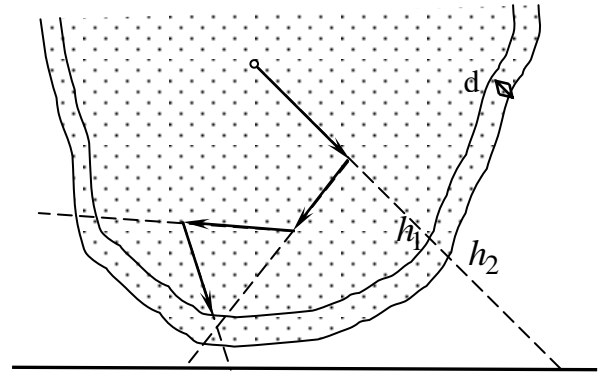


Рис.10

$$\frac{dn}{dz} = \mu \cdot \exp\left\{-\int_{h_1}^z \mu \cdot dz'\right\} \cdot \left(1 - \exp\left\{-\int_{h_1}^{h_2} \mu \cdot dz'\right\}\right)^{-1}, \quad z \in [h_1, h_2]. \quad (11)$$

В (11) предполагается, что  $0 \leq h_1 < h_2$ . Возможны другие ситуации. Если  $h_1 < 0 < h_2$ , то начало луча лежит внутри эффективного слоя, и в (11) следует положить  $h_1 = 0$ . Если  $h_2 \leq 0 < h_1$ , то луч пересекает только внутреннюю границу слоя, и в (11) следует  $h_2$  заменить на  $h_1$  и положить  $h_1 = 0$ . Если  $h_2 < h_1 \leq 0$ , то луч не пересекает эффективный слой, и тогда рождения электрона вообще не происходит. Возможно также, что луч несколько раз пересекает эффективный слой. Тогда под отрезком  $[h_1, h_2]$  следует понимать ту совокупность точек луча, которая принадлежит слою.

Заметим, что доля фотоэлектронов, образованных в элементе  $(z, z + dz)$  фотоном с весом  $W_\gamma$ , определяется формулой:

$$dn_e^{(ph)} = W_\gamma \cdot \mu_{ph}(z) \cdot \exp\left\{-\int_0^z \mu(z') dz'\right\} \cdot dz, \quad (12)$$

а доля комптоновских электронов, образованных в элементе  $(z, z + dz)$  фотоном с весом  $W_\gamma$ , - формулой:

$$dn_e^{(c)} = W_\gamma \cdot \mu_c(z) \cdot \exp\left\{-\int_0^z \mu(z') dz'\right\} \cdot dz. \quad (13)$$

Поэтому начальные веса рождённых электронов имеют вид:

$$q_e^{(ph)} = \frac{dn_e^{(ph)}}{dn} = W_\gamma \cdot p_{ph} \cdot \left( \exp\left\{-\int_0^{h_1} \mu \cdot dz'\right\} - \exp\left\{-\int_0^{h_2} \mu \cdot dz'\right\} \right). \quad (14)$$

$$q_e^{(c)} = \frac{dn_e^{(c)}}{dn} = W_\gamma \cdot p_c \cdot \left( \exp\left\{-\int_0^{h_1} \mu \cdot dz'\right\} - \exp\left\{-\int_0^{h_2} \mu \cdot dz'\right\} \right). \quad (15)$$

Разность экспоненциальных функций в (14), (15) можно трактовать как вероятность взаимодействия фотона в эффективном слое на отрезке  $[h_1, h_2]$ .

Для анализа эффективности предлагаемого алгоритма были проведены расчёты электронных потоков, образующихся при облучении квадратной железной ( $Fe$ ) пластины  $-2,5\text{см} < x, y < 2,5\text{см}$ ,  $0 < z < 1\text{см}$  (рис.11). В

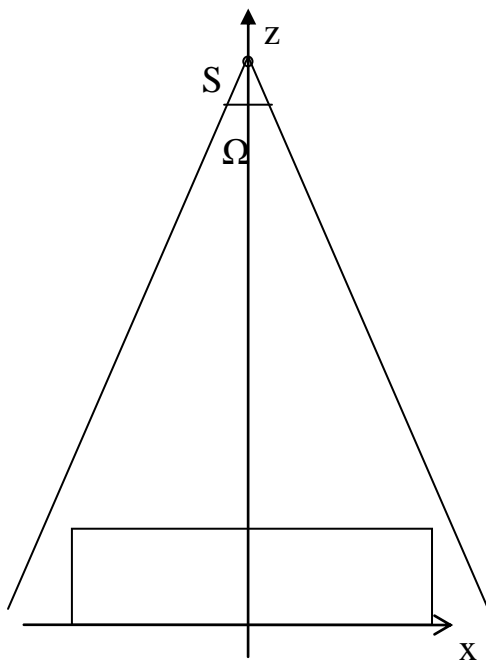


Рис.11

расчётах использовался точечный полиэнергетический источник с энергетическим спектром, описанным в §2 (см. рис.8,9). Источник был расположен в точке с координатой  $z_s = 5\text{см}$  и излучал в телесный угол  $\Omega = \pi/2$ . Вычислялись отношения декартовых компонент вектора плотности потока электронов к мощности источника (количеству излучаемых фотонов в единицу времени) в теневой области

$-2,5\text{см} < x, y < 2,5\text{см}$  на детекторной плоскости  $z = 0$ . Результаты расчётов в сечении  $y = 0$  приведены на рис.12.

Сплошная линия соответствует  $z$ -компоненте вектора плотности потока электронов, пунктирная линия –  $x$ -компоненте. Третья компонента равна 0 в

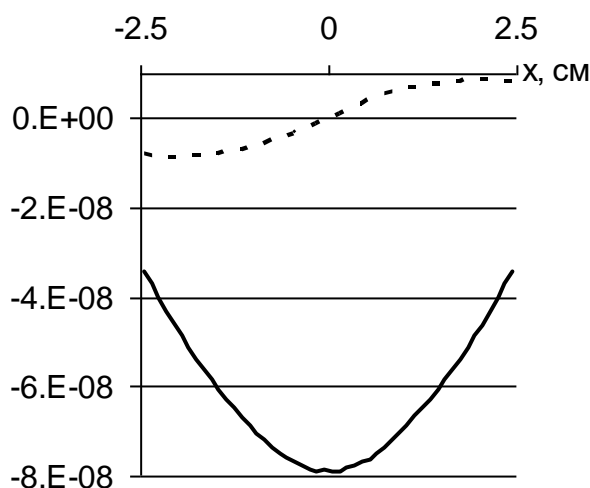


Рис.12

указанном сечении. Отметим, что свойства симметрии полученных результатов соответствуют свойствам симметрии задачи.

Простая геометрия численного эксперимента позволила аналитически указать в алгоритме толщину эффективного плоского слоя у поверхности объекта  $z = 0$  (рис.13) как функцию энергии и направления движения электрона:

лечения движения электрона:

$$|h_2 - h_1| = \frac{d(E)}{|\cos \theta_\gamma|}, \quad d(E) = \frac{k \cdot |\cos \theta_e|}{\mu_e(E)}, \quad k = 10, \quad (16)$$

$\mu_e$  – коэффициент ослабления электронного потока в железе. Таким образом,

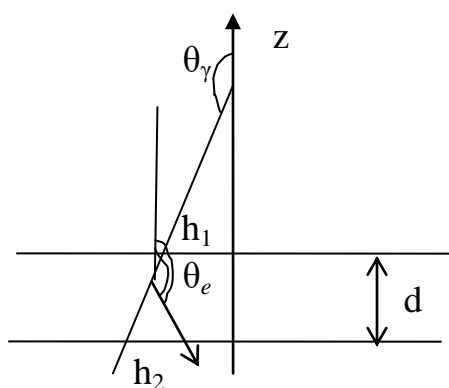


Рис.13

определение толщины  $d$  эффективного слоя и розыгрыш точки рождения производились для каждого электрона после определения его энергии  $E$  и направления движения (полярного  $\theta_e$  и азимутального  $\varphi_e$  углов).

Кроме плотности распределения (11) для розыгрыша точки рождения

электрона в алгоритме использовалось и другое распределение:

$$\frac{dn}{dz} = (1/\Delta h) \cdot \exp\{-r/\Delta h\} \cdot (1 - \exp\{-z_{\max}/\Delta h\})^{-1}, \quad r \in [0, z_{\max}], \quad (17)$$

где  $\Delta h = \frac{|\cos \theta_e|}{\mu_e(E) \cdot |\cos \theta_\gamma|}$ ;  $\cos \theta_e < 0$ ;  $r = z_{\max} - z$ , если  $\cos \theta_\gamma < 0$ ;  $r = z$ , если

$\cos \theta_\gamma > 0$ . В пределе при  $\cos \theta_\gamma \rightarrow 0$   $\frac{dn}{dz} = \frac{1}{z_{\max}}$ . Начальные веса рождённых

электронов имеют вид, вытекающий из их определения

$$q_e^{(ph)} = \frac{dn_e^{(ph)}}{dn}, \quad q_e^{(c)} = \frac{dn_e^{(c)}}{dn}$$

и соотношений (12), (13) и (17).

В следующей таблице указаны время вычислений с использованием  $2^{33}$  фотонов и 64 процессоров многопроцессорной системы МВС-5000М, а также погрешность расчёта  $z$ -компоненты вектора плотности потока электронов.

№	Время вычис- ий (мин.)	Погрешность d, %
1.	18	0,18
2.	18	0,14

Погрешность вычислялась по формуле, аналогичной (5). Первая строка таблицы соответствует использованию плотности распределения (11), (16) для розыгрыша точки рождения электрона, вторая строка таблицы соответствует использованию плотности распределения (17). Приведённые результаты позволяют сделать вывод о достаточно высокой эффективности предложенного алгоритма, позволяющего рассчитывать электронные потоки с достаточной точностью при приемлемых вычислительных затратах на современной многопроцессорной технике.

### Литература.

1. 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



2. В.П.Загонов и др. *Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации ионизирующего излучения в задачах вычислительной диагностики* // Матем. моделирование, т.16, №5, 2004, с.103-116
3. С. Cercignani: *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer, New York, 1988.
4. G.-R. Tillack, V. M. Artemiev, and A. O. Naumov: *Transport Equations for Photon Flow Exploiting the Theory of Markov Processes with Random Structure Part 1: Derivation of Basic Equations*. Journal of Nondestructive Evaluation **20** 4 (2001) 153-161
5. У.Фано, Л.Спенсер, М.Бергер. *Перенос гамма-излучения*. Госатомиздат, Москва, 1963.
6. G. Marsaglia and A. Zaman: *A new class of random number generators*. Annals of Applied Probability **1** (1991) 462-480.
7. И.М.Соболь, Ю.Л.Левитан. *Получение точек, равномерно расположенных в многомерном кубе*. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, 1976, №40.
8. И.А.Антонов, В.М.Салеев. *Экономичный способ вычисления  $ЛП_\tau$  - последовательностей*. ЖВМ и МФ, 1979, т.19, №1, с.243-245.