

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НЕОДНОРОДНОГО ТЕЛА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ

В.Г. Назаров

ИПМ ДВО РАН, ул. Радио, 7, 690041 Владивосток, Россия

E-mail: naz@iam.dvo.ru

Работа выполнена при государственной поддержке научных исследований, проводимых ведущими научными школами РФ (грант НШ-9004.2006.1) и в рамках гранта N 06-II-CY-01-001 конкурса интеграционных проектов ДВО РАН с научными учреждениями Сибирского и Уральского отделений РАН

Введение. Определение химического состава вещества радиографическим методом является интересной задачей с точки зрения теории и, кроме того, имеет ощутимую практическую значимость. Существуют патенты, связанные с практической реализацией различных радиографических методов нахождения химического состава [1,2]. В данной работе рассматривается следующая задача.

Определить химический состав неоднородного тела, состоящего из конечного числа однородных по составу частей и занимающего в R^3 ограниченную выпуклую область G по результатам просвечивания этого тела рентгеновским излучением на заданном промежутке энергии.

Такая постановка задачи представляется оправданной в случаях, когда, например, речь идет о нахождении химического состава однородных частей изделия, прямой доступ к которым невозможен.

Предполагается, что внутреннее строение тела известно. Границы неоднородностей в теле можно найти, например, с помощью индикатора неоднородностей. Подробное описание этого метода изложено в работах [3,4].

Для решения поставленной задачи на первом этапе производится энергетическое сканирование тела по конечному набору специально выбранных прямых. Затем, с учетом полученной информации, производится определение химических элементов, входящих в состав каждой неоднородности, находятся их массовые доли и плотности материалов, составляющих неоднородности. Полученные теоретические результаты иллюстрируются описанием одного из проведенных численных экспериментов.

Основные обозначения и предположения. Пусть неоднородная среда занимает некоторую ограниченную выпуклую область G в трехмерном пространстве, состоящую из конечного числа попарно непересекающихся подобластей, заполненных различными материалами и подвергается рентгеновскому облучению. Считается, что энергия фотонов сравнительно невелика и процесс переноса излучения хорошо описывается следующим стационарным интегро-дифференциальным уравнением переноса [3]:

$$\omega \cdot \nabla_r f(r, \omega, E) + \mu(r, E) f(r, \omega, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} k(r, \omega \cdot \omega', E) f(r, \omega', E) d\omega'. \quad (1)$$

Здесь r — точка трехмерного евклидова пространства R^3 с ортонормированным базисом e_1, e_2, e_3 , $\Omega = \{\omega \in R^3 : |\omega| = 1\}$; $\omega, \omega' \in \Omega$, E — энергия излучения, $f(r, \omega, E)$ — плотность потока фотонов в точке r , движущихся в направлении ω и имеющих энергию E , $\mu(r, E)$ — коэффициент полного взаимодействия фотонов с веществом, $k(r, \omega \cdot \omega', E)$ — индикатриса рассеяния. В записи $\omega \cdot \nabla_r$ и $\omega \cdot \omega'$ точка означает скалярное произведение векторов из R^3 . При упругом рассеянии фотонов их энергия не меняется, поэтому переменная E в этом уравнении присутствует в качестве параметра. В дальнейшем для нас будет важна зависимость коэффициента μ от энергии, поэтому эта переменная в уравнении сохранена.

Считаем, что на границах подобластей коэффициент μ уравнения (1) имеет разрыв первого рода по пространственной переменной. Далее эти подобласти будем также называть неоднородностями.

Пусть \mathcal{P} – подпространство в R^3 , порожденное векторами e_1, e_2 , пересечение $\mathcal{D} = G \cap \mathcal{P}$ не пусто и $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_q$ – совокупность всех плоских областей в \mathcal{D} , которые получаются при пересечении плоскости \mathcal{P} с неоднородностями из G , $q \geq 2$, причем,

$$\overline{\mathcal{D}} = \bigcup_{i=1}^q \overline{\mathcal{D}}_i, \quad \mathcal{D}_0 = \bigcup_{i=1}^q \mathcal{D}_i, \quad \text{и} \quad \mathcal{D}_i \cap \mathcal{D}_j = \emptyset, \quad \text{при} \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, q.$$

На границе \mathcal{D} известна плотность $H(\eta, \omega, E)$ выходящего из G потока излучения, $\eta \in \partial\mathcal{D}$, $\omega \in \Omega_1$, где $\Omega_1 = \Omega \cap \mathcal{P}$.

Особенности функции $\mu(E)$ для различных химических элементов. Предлагаемый способ определения химического состава основан на том, что для различных химических элементов коэффициенты их полного взаимодействия $\mu(E)$ имеют разрывы при различных значениях энергии E . Для подробного изучения этого вопроса использовались таблицы [5], которые содержат данные о зависимости $\mu(E)$ от E для 92 химических элементов от водорода до урана включительно и 48 веществ сложного химического состава, представляющих интерес для дозиметрии. Данные представлены в виде сеточных функций, определенных для ряда значений энергии из промежутка 1 кэВ – 20 МэВ. Для получения информации о элементах с атомными номерами от $Z=93$ до $Z=100$ нами использовалась база данных [6]. Эту и другую полезную информацию можно также найти на информационном ресурсе [7]. Была написана компьютерная программа, анализирующая данные о 100 химических элементах, основные результаты работы которой состоят в следующем.

1) На промежутке 1 кэВ – 20 МэВ функция $\mu(E)$ для каждого элемента непрерывна всюду кроме конечного числа точек, в которых она имеет разрыв первого рода. Такие значения энергии мы будем также называть скачками. Для химических элементов с номерами Z меньше 11 функция $\mu(E)$ непрерывна на этом промежутке.

2) Для разных элементов все точки разрыва E' функции $\mu(E)$ всегда различны. Общее число всех различных скачков (для всех элементов) составляет 566.

3) Для всех веществ в точках разрыва E' коэффициент $\mu(E)$ всегда возрастает.

Задача определения химического состава. Для определения химического состава тела, внутреннюю структуру которого считаем известной, используется наличие скачков у коэффициента $\mu(E)$ и индивидуальность набора таких скачков для каждого химического элемента. Далее будем считать, что выполняются следующие условия:

а) Область G подвергается внешнему облучению, плотность потока которого $h(\xi, \omega, E)$ на поверхности G непрерывна по всем переменным, но известной не предполагается.

б) Функция h имеет коллимированный характер по (ξ, ω) , так что $h(\xi, \omega, E)$ отлична от нуля лишь для (ξ, ω) мало отличающихся от некоторых заданных (ξ_0, ω_0) .

в) Рассеянием в G можно пренебречь.

Пусть $d(r, \omega)$ – расстояние от точки $r \in G$ до ∂G в направлении ω , $r_0 \in \mathcal{D}_0$, $\omega_0 \in \Omega_1$, $\xi_0 = r_0 - d(r_0, -\omega_0)\omega_0$, $\eta_0 = r_0 + d(r_0, \omega_0)\omega_0$. Пара (r_0, ω_0) определяет прямую \hat{l}_0 , лежащую в плоскости \mathcal{P} , которая проходит через точку r_0 в направлении ω_0 и пересекает $\partial\mathcal{D}$ в точках ξ_0 и η_0 . $H(\eta_0, \omega_0, E)$ есть плотность выходящего из G излучения в точке $\eta_0 \in \partial\mathcal{D}$, эта функция считается известной. Прямая \hat{l}_0 имеет непустые пересечения с некоторыми из плоских областей $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_q$.

Обозначим через A_1, \dots, A_q вещества, соответствующие областям $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_q$, так, что каждая область \mathcal{D}_i заполнена веществом A_i , $i = 1, \dots, q$, и пусть $\mu_1(E), \dots, \mu_q(E)$ – коэффициенты полного взаимодействия для веществ A_1, \dots, A_q . Если X_{i1}, \dots, X_{ir} – все химические элементы, входящие в состав вещества A_i , $\mu_{xi1}(E), \dots, \mu_{xir}(E)$ – соответствующие коэффициенты полного взаимодействия, $\rho_{xi1}, \dots, \rho_{xir}$ – плотности, w_{i1}, \dots, w_{ir} – массовые доли элементов X_{i1}, \dots, X_{ir} в составе A_i , и ρ_i – плотность вещества A_i , то, согласно [5], справедлива формула:

$$\mu_i(E) = \rho_i \sum_{k=1}^r w_{ik} \frac{\mu_{xik}(E)}{\rho_{xik}}. \quad (2)$$

Отсюда видно, что множество всех разрывов функции $\mu_i(E)$ совпадает с объединением множеств всех разрывов функций $\mu_{xi1}(E), \dots, \mu_{xir}(E)$. Функция $h(\xi_0, \omega_0, E)$ непрерывна по E , поэтому функция $H(\eta_0, \omega_0, E)$ будет иметь разрыв при некотором E' тогда и только тогда, когда на пути движения фотона, выходящего из G в точке η_0 и в направлении ω_0 , встречался химический элемент, коэффициент $\mu(E)$ которого имел разрыв при $E = E'$. Проведя измерения функции $H(\eta_0, \omega_0, E)$ на диапазоне энергии $[E_\alpha, E_\beta]$, содержащем скачки функций $\mu(E)$ для всех химических элементов ($Z = 1 - 100$) мы по разрывам $H(\eta_0, \omega_0, E)$ найдем все элементы, которые встречались на траектории движения фотона. Для краткости, множество всех таких химических элементов будем называть *спектром прямой* \hat{l}_0 . Проведем такие измерения по некоторым прямым, пересекающим \mathcal{D}_0 и попытаемся по результатам измерений указать для каждой области \mathcal{D}_i соответствующий ей набор химических элементов X_{i1}, \dots, X_{ir} .

Далее будем использовать следующие обозначения:

X_1, \dots, X_N — перечень всех химических элементов, присутствующих в \mathcal{D}_0 .

$\mu_{x1}(E), \dots, \mu_{xN}(E)$ — коэффициенты полного взаимодействия для X_1, \dots, X_N .

Для каждого X_i выберем какую-нибудь энергию E_i на которой функция $\mu_{xi}(E)$ имеет скачок, тогда, в силу ранее сказанного,

$$\begin{aligned} \mu_{xi}(E_j + 0) - \mu_{xi}(E_j - 0) &> 0 \quad \text{при } i = j, \\ \mu_{xi}(E_j + 0) - \mu_{xi}(E_j - 0) &= 0 \quad \text{при } i \neq j. \end{aligned} \quad (3)$$

Пусть $\rho_{x1}, \dots, \rho_{xN}$ — плотности X_1, \dots, X_N соответственно,

ρ_1, \dots, ρ_N — плотности (в общем случае сложных по составу) веществ из областей $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_q$,

$\mu_1(E), \dots, \mu_q(E)$ — коэффициенты полного взаимодействия в областях $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_q$,

w_{kj} — массовая доля химического элемента X_j в области \mathcal{D}_k ; $k = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, N$,

\mathcal{L} — множество всех прямых \hat{l} на \mathcal{P} , для которых $\hat{l} \cap \mathcal{D}_0 \neq \emptyset$,

\hat{l} — прямая из \mathcal{L} , l_k — линейная мера множества $\hat{l} \cap \mathcal{D}_k$; $k = 1, \dots, q$,

$h(E)$, $H(E)$ — плотности входящего в \mathcal{D} и выходящего из \mathcal{D} излучения в точках $\partial\mathcal{D}$ и для направления, определяемых прямой \hat{l} для энергии E .

В этом случае справедливы равенства для правых и левых предельных значений:

$$H(E_j \pm 0) = h(E_j \pm 0) \cdot \exp \left(- \sum_{k=1}^q l_k \mu_k(E_j \pm 0) \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (4)$$

С учетом формулы (2) при $r = N$ имеем:

$$\mu_k(E_j \pm 0) = \rho_k \sum_{i=1}^N w_{ki} \frac{\mu_{xi}(E_j \pm 0)}{\rho_{xi}}; \quad k = 1, \dots, q, \quad j = 1, \dots, N. \quad (5)$$

Введем обозначения: $H_j^\pm = H(E_j \pm 0)$, $h_j^\pm = h(E_j \pm 0)$, $\mu_{kj}^\pm = \mu_k(E_j \pm 0)$, $\mu_{xij}^\pm = \mu_{xi}(E_j \pm 0)$, $i, j = 1, \dots, N$; $k = 1, \dots, q$. Тогда, в силу непрерывности h по E , из (4) получим:

$$\sum_{k=1}^q l_k (\mu_{kj}^+ - \mu_{kj}^-) = \ln(H_j^- / H_j^+), \quad j = 1, \dots, N. \quad (6)$$

Из (5) и (3) имеем:

$$\mu_{kj}^+ - \mu_{kj}^- = \rho_k w_{kj} \frac{(\mu_{xjj}^+ - \mu_{xjj}^-)}{\rho_{xj}}, \quad j = 1, \dots, N. \quad (7)$$

Подставляя (7) в (6) получим:

$$\sum_{k=1}^q l_k \cdot \rho_k w_{kj} = \gamma_j, \quad \text{где} \quad \gamma_j = \frac{\rho_{xj} \cdot \ln(H_j^- / H_j^+)}{\mu_{xjj}^+ - \mu_{xjj}^-}, \quad j = 1, \dots, N, \quad (8)$$

Очевидны, также, следующие уравнения и неравенства:

$$\sum_{j=1}^N w_{kj} = 1, \quad w_{kj} \geq 0, \quad k = 1, \dots, q. \quad (9)$$

В формулах (8), (9) все величины, кроме ρ_k и w_{kj} , $k = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, N$, нам известны. В итоге мы имеем $N + q$ уравнений (8), (10) относительно $Nq + q$ неизвестных. В случае $q = 1$ система (8), (9) легко разрешима.

Для решения задачи при $q \geq 2$ сделаем следующее. Выберем из \mathcal{L} q различных прямых $\hat{l}_1, \dots, \hat{l}_q$ и обозначим через l_{tk} линейную меру множества $\hat{l}_t \cap \mathcal{D}_k$; $t, k = 1, \dots, q$. Проведем процедуру "просвечивания" тела вдоль каждой прямой \hat{l}_t для значений энергии $E_j \pm 0$, $j = 1, \dots, N$ и определим величины γ_{tj} ; $t = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, N$ так же, как мы это делали раньше для прямой \hat{l} (первый индекс у γ_{tj} есть номер прямой \hat{l}_t , а второй – номер энергии E_j). Рассмотрим возникающую при этом систему уравнений

$$\sum_{k=1}^q l_{tk} \cdot \rho_k w_{kj} = \gamma_{tj}, \quad \text{где} \quad \gamma_{tj} = \frac{\rho_{xj} \cdot \ln(H_{tj}^-/H_{tj}^+)}{\mu_{xjj}^+ - \mu_{xjj}^-}; \quad H_{tj}^\pm = H_t(E_j \pm 0), \quad t = 1, \dots, q, \quad j = 1, \dots, N, \quad (10)$$

относительно неизвестных ρ_k , w_{kj} . Совокупная система уравнений (9), (10) содержит $Nq + q$ уравнений относительно $Nq + q$ неизвестных. Было доказано следующее утверждение.

Теорема. Если $q \times q$ матрица $L = ||l_{tk}||$ невырождена, то система уравнений и условий (9), (10) разрешима относительно переменных ρ_k , w_{kj} и ее решение единственно.

Из доказанной теоремы следует, что при выполнении вышеперечисленных условий задача определения химического состава разрешима и ее решение единственно.

Численные эксперименты. Проиллюстрируем полученные результаты на примере одного из проведенных численных экспериментов. В этом эксперименте область G представляла из себя шар радиуса $R = 1$ мкм с центром в начале координат и содержала подобласти G_1 и G_2 . При этом G_2 была частью однополостного гиперболоида, задаваемого условиями:

$$\frac{(r_1/R)^2}{(0.2)^2} - \frac{(r_2/R - 0.5)^2}{(0.1)^2} + \frac{(r_3/R)^2}{(0.2)^2} - 1 < 0, \quad 0.3 < r_2/R < 0.7,$$

а $G_1 = G \setminus G_2$. Подобласть G_1 была заполнена фосфидом алюминия AlP , а G_2 – алюмоселенидом меди $CuAlSe_2$. Таким образом, области G_1 и G_2 соответствовали различным однородным веществам.

На первом этапе эксперимента решалась задача определения плотности H выходящего из G излучения при заданных коэффициентах уравнения (1) и плотности падающего на G внешнего потока излучения $h(E) = 1$. Энергия E при этом была фиксированной, значения коэффициентов μ и k в G_1 и G_2 вычислялись с помощью таблиц [5]. Для решения этой задачи на окружности $\mathcal{D} = G \cap \mathcal{P}$ задавалось некоторое семейство точек η_i , $i = 1, \dots, N_\rho$ и выходящих из G направлений $\omega_k \in \mathcal{P}$, $k = 1, \dots, N_\varphi$. Уравнение (1) решалось численно, при этом находились величины $f(\eta_i, \omega_k, E)$. Для решения уравнения (1) применялась одна из версий метода Монте-Карло.

На втором этапе эксперимента сначала производился выбор прямых \hat{l}_1 и \hat{l}_2 из \mathcal{L} . В качестве \hat{l}_1 была взята прямая, проходящая через точку $\eta_1 = (1, 0, 0)$ в направлении $\omega_1 = (1, 0, 0)$, а прямая \hat{l}_2 проходила через точку $\eta_2 = (\sqrt{3}/2, 1/2, 0)$ в том же направлении $\omega_2 = (1, 0, 0)$. При этом $l_{11} = 2$, $l_{12} = 0$, $l_{21} = \sqrt{3} - 0.4$, $l_{22} = 0.4$. Таким образом, матрица L была невырожденной. В диапазоне энергии $[E_\alpha, E_\beta]$, где $E_\alpha = 1$ кэВ, $E_\beta = 144$ кэВ, рассматривалось 566 точек $E_1 < E_2 < \dots < E_{566}$, соответствующих всем имеющимся скачкам коэффициента μ для всех химических элементов, и проводилось "просвечивание" области G вдоль прямых \hat{l}_1 и \hat{l}_2 на этих значениях энергии для получения спектров этих прямых.

Таким образом, было найдено, что спектр \hat{l}_1 состоит из алюминия и фосфора, а спектр \hat{l}_2 из алюминия, меди, селена и фосфора.

После этого, найденный перечень химических элементов упорядочивался: $X_1 = Al, X_2 = P, X_3 = Cu, X_4 = Se$ и каждому X_i ставилась в соответствие какая-нибудь одна энергия $E_{j(i)}$, на которой данный химический элемент X_i имел хорошо выраженный скачок. После выполнения очевидных переобозначений ($E_{j(i)}$ переобозначено как E_i) были выбраны следующие значения энергий: $E_1 = 1.5596$ кэВ (для Al), $E_2 = 2.1455$ кэВ (для P), $E_3 = 8.9789$ кэВ (для Cu) и $E_4 = 1.6539$ кэВ (для Se). После этого вычислялись величины γ_{ij} , входящие в правую часть системы уравнений (10).

На последнем, этапе эксперимента решалась система уравнений (9,10) и находились искомые неизвестные ρ_k, w_{kj} , $k = 1, 2$, $j = 1, 2, 3, 4$. Результаты этих расчетов приведены в таблице. Первые три строки таблицы относятся к подобласти G_1 , заполненной AlP , содержат точные и расчетные значения плотности материала ρ (г/см³) и массовые доли каждого химического элемента, присутствующего в G . Последние три строки таблицы относятся к подобласти G_2 , заполненной $CuAlSe_2$. Как видно из этой таблицы, расчетные и точные значения искомых величин хорошо согласуются.

	$\rho_1(AlP)$	$w_{11}(Al)$	$w_{12}(P)$	$w_{13}(Cu)$	$w_{14}(Se)$
Точное	2.420	0.4655578	0.5344423	0.0	0.0
Расчет	2.420	0.4655576	0.5344424	0.0	0.0
	$\rho_2(CuAlSe_2)$	$w_{21}(Al)$	$w_{22}(P)$	$w_{23}(Cu)$	$w_{24}(Se)$
Точное	4.700	0.1086005	0.0	0.2557723	0.6356272
Расчет	4.72137	0.1093943	0.002568157	0.2534516	0.6345859

Заключение. Полученные результаты позволяют утверждать, что предлагаемый метод может быть использован для нахождения химического состава неоднородных тел малого размера. Недостатком данного метода является то обстоятельство, что хорошая точность при нахождении искомых величин может быть достигнута только для тел, размеры которых не превышают нескольких микрон. Использование больших значений энергии зондирующего излучения, при которых коэффициенты полного взаимодействия для веществ быстро убывают, оказывается невозможным ввиду отсутствия скачков у коэффициентов для таких энергий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Найденев С.В., Рыжиков В.Д. Об определении химического состава методом мультиспектральной радиографии // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. Вып. 9. С. 6–13.
2. Федосеев В.М. Рентгеновский способ обнаружения вещества по значению его эффективного атомного номера. Патент РФ N 2095795. 1997.
3. Аниконов Д.С., Ковтанюк А.Е., Прохоров И.В. Использование уравнения переноса в томографии. М.: Логос, 2000. 224 С.
4. Anikonov D.S., Nazarov V.G., and Prokhorov I.V. Poorly Visible Media in X-ray Tomography. Utrecht. Boston. VSP. 2002. viii+294 p.
5. Hubbell J.H., Seltzer S.M. Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients 1 Kev to 20 Mev for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest. NISTIR 5632. 1995.
6. Berger M.J., Hubbell J.H., Seltzer S.M., Chang J., Coursey J.S., Sukumar R., and Zucker D.S. XCOM: Photon Cross Section Database // National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg. MD. 2005. (version 1.3. [Online] Available: <http://physics.nist.gov/xcom>).
7. <http://srxray.iam.dvo.ru/> Аниконов Д.С., Ковтанюк А.Е., Кольев Н.В., Кононенко А.А., Назаров В.Г., Прохоров И.В., Яровенко И.П. База данных радиационных характеристик веществ, представляющих интерес в рентгенодиагностике.