

УДК 517.958

MSC2010 45K05, 65C05, 78A15

© А. С. Жуплев, И. В. Прохоров, И. П. Яровенко¹

Статистическое моделирование транспорта электронов в задачах визуализации неоднородных сред

Работа посвящена проблемам математического моделирования переноса электронов в веществе. Предложен весовой метод Монте-Карло для решения уравнения переноса электронов. Проведены численные эксперименты применительно к задачам электронного одноракурсного зондирования неоднородных сред. Экспериментально исследовано влияние многократно рассеянных электронов на качество изображений.

Ключевые слова: *уравнение переноса электронов, сечение рассеяния, краевые задачи, метод Монте-Карло*

1. Введение

Развитие современных технологий микроэлектроники, связанных с использованием объектов сверхмалых размеров, приводит к необходимости разработки методов диагностики, позволяющих определять параметры объектов со сверхвысоким разрешением. Многие из методов основаны на использовании электронов в качестве регистрируемого сигнала. Это просвечивающая электронная микроскопия и томография, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, оже-спектроскопия и др. [1, 2]. Существенная часть проблем электронной томографии, связана с неполнотой данных и деструктивным влиянием многократного рассеяния электронов на качество реконструкции изображений среды. Одно из наиболее эффективных и экономичных решений этих проблем основано на теоретическом и численном анализе математических моделей, описывающих процесс переноса электронного излучения в неоднородных средах.

Рассеяние электронов на атомах вещества можно разделить на две группы: на упругое и неупругое [1, 3]. При упругом рассеянии направление движения электрона изменяется, а энергия — нет. Неупругое рассеяние сопровождается потерей

¹Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, Владивосток, ул. Радио, 7;
Дальневосточный федеральный университет, 690950, г. Владивосток, ул. Суханова, 8;. Электронная почта: zhuplev@gmail.com, prokhorov@iam.dvo.ru, yarovenko@iam.dvo.ru

энергии электроном и его отклонением на незначительные углы от первоначального направления. В методах светлопольной и темнопольной микроскопии, а также электронной микроскопии высокого разрешения используются упругорассеянные электроны [1]. Так как нас, главным образом, будут интересовать приложения методов решения уравнения переноса электронного излучения в упомянутых выше областях, то в работе будет рассмотрен случай упругих столкновений электронов с атомами среды. Неупругое рассеяние электронов может быть учтено в рамках возрастного приближения полихроматического уравнения переноса [4, 5].

В качестве математической модели, описывающей транспорт электронов, в работе используется стационарное уравнение переноса с граничным условием, задающим плотность потока входящего в среду излучения [6, 7, 8]. Для численного решения краевой задачи предложен весовой метод Монте-Карло. Его отличительной чертой является то, что при моделировании упругого рассеяния используются не традиционные дифференциальные сечения Мотта [3, 9, 10], а более сложные сечения рассеяния, которые точнее описывают процесс взаимодействия электронов с атомами вещества [2]. Алгоритм был апробирован на задаче визуализации внутренней структуры неоднородных сред при облучении объекта на просвет и в обратно рассеянном потоке излучения. Показано, что наибольшая относительная среднеквадратичная ошибка метода Монте-Карло наблюдается в случае, когда учитывается сравнительно небольшое число столкновений электронов в среде.

2. Математическая модель переноса электронов в веществе

Общеизвестно, что наиболее адекватной математической моделью для описания транспорта и упругого рассеяния электронов в веществе является интегродифференциальное монохроматическое уравнение переноса следующего вида [8]:

$$\omega \cdot \nabla_r I(r, \omega, \lambda) + \mu(r, \lambda) I(r, \omega, \lambda) = \int_{\Omega} \sigma(r, \omega \cdot \omega', \lambda) I(r, \omega', \lambda) d\omega' + J(r, \omega, \lambda), \quad (1)$$

где функция $I(r, \omega, \lambda)$ интерпретируется как плотность потока электронов с длиной волны $\lambda \in [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ в точке $r \in \mathbb{R}^3$, летящих в направлении $\omega \in \Omega = \{\omega \in \mathbb{R}^3 : |\omega| = 1\}$. Функция σ называется дифференциальным сечением рассеяния электронов, а μ — полным сечением взаимодействия электронного пучка со средой, или коэффициентом ослабления излучения. Функция J характеризует плотность внутренних источников.

Сечение σ связано с сечением рассеяния электрона на атоме вещества σ_e следующим соотношением [2]:

$$\sigma(r, \omega \cdot \omega', \lambda) = \frac{N_A \rho(r)}{A} \sigma_e(r, \omega \cdot \omega', \lambda), \quad r \in \mathbb{R}^3, \omega, \omega' \in \Omega, \lambda \in [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}], \quad (2)$$

где N_A — число Авогадро, ρ — плотность вещества и A — молярная масса. На практике наиболее распространенными приближениями функции σ_e являются сечения

Резерфорда для рассеяния электронов на атомном ядре и различные аппроксимации Мотта [3]. Однако, как отмечается в современной научной литературе [2], эти сечения не совсем адекватно описывают упругое рассеяние в области малых углов рассеяния.

Более точное описание рассеяния электронов на атоме дает приближение Хартри-Фока [2] для атомного форм-фактора f_e , который связан с σ_e простым соотношением

$$\sigma_e(r, \omega \cdot \omega', \lambda) = |f_e(r, q)|^2, \quad \text{где } q = \frac{\sqrt{1 - (\omega \cdot \omega')^2}}{\lambda}.$$

Функция f_e хорошо изучена и достаточно точно может быть аппроксимирована следующей суммой:

$$f_e(r, q) = \sum_{i=1}^3 \frac{a_i(r)}{q^2 + b_i(r)} + \sum_{i=1}^3 c_i(r) \exp(-d_i(r)q^2), \quad (3)$$

где коэффициенты $a_i, b_i, c_i, d_i, i = 1, 2, 3$ рассчитаны для большинства химических элементов [2]. Отметим, что приближение (3) не единственное используемое как альтернатива аппроксимации Мотта. Существует и ряд других приближений, хорошо описывающих процесс взаимодействия электронов с атомами вещества, но они имеют ряд ограничений, отсутствующих в аппроксимации (3) [9].

Если через μ_s обозначить полное сечение рассеяния

$$\mu_s(r, \lambda) = \int_{\Omega} \sigma(r, \omega \cdot \omega', \lambda) d\omega' = 2\pi \frac{N_A \rho(r)}{A} \int_{-1}^1 |f_e(r, q(\nu, \lambda))|^2 d\nu,$$

а через S — индикатрису рассеяния

$$S(r, \omega \cdot \omega', \lambda) = \frac{\sigma(r, \omega \cdot \omega', \lambda)}{\mu_s(r, \lambda)} = |f_e(r, q(\nu, \lambda))|^2 \left(2\pi \int_{-1}^1 |f_e(r, q(\nu, \lambda))|^2 d\nu \right)^{-1},$$

то уравнение (1) можно переписать в виде

$$\omega \cdot \nabla_r I(r, \omega, \lambda) + \mu(r, \lambda) I(r, \omega, \lambda) = \mu_s(r, \lambda) \int_{\Omega} S(r, \omega \cdot \omega', \lambda) I(r, \omega', \lambda) d\omega' + J(r, \omega, \lambda). \quad (4)$$

Процесс излучения происходит в ограниченной выпуклой области G . Для характеристики неоднородности среды, в которой изучается процесс переноса излучения, введем в рассмотрение некоторое разбиение G_0 области G [8]. Множество G_0 является объединением конечного числа областей

$$G_0 = \bigcup_{i=1}^p G_i, \quad G_i \cap G_j = \emptyset, \quad i \neq j,$$

таких, что $\overline{G_0} = \overline{G}$, где через $\overline{G_0}$ и \overline{G} обозначены замыкания областей G_0 и G , соответственно. Области G_i можно интерпретировать как некоторые части неоднородной среды G , заполненные i -м веществом.

3. Основные ограничения. Постановка задачи

Геометрия множества G_0 традиционно подчиняется условию обобщенной выпуклости [7, 8], согласно которому любой луч $L_{r,\omega} = \{r + t\omega, t \geq 0\}$, исходящий из точки $r \in G_0$ в направлении $\omega \in \Omega$ пересекает ∂G_0 в конечном числе точек. Кроме того, будем полагать, что границы областей G_i — кусочно-гладкие поверхности класса C^1 .

Относительно функций μ, μ_s, S, J предполагается следующее. Функции μ, J неотрицательные и для любого λ справедливо $\mu \in C_b(G_0), J \in C_b(G_0 \times \Omega)$, где через $C_b(Y), Y \in \mathbb{R}^m$ обозначено банахово пространство функций, ограниченных и непрерывных на Y , с нормой $\|f\| = \sup_{y \in Y} |f(y)|$.

Функции $\rho \geq 0, a_i, b_i, c_i, d_i \geq \text{const} > 0, i = 1, 2, 3$, принадлежат пространству $C_b(G_0)$. Из этих ограничений вытекает, что $f_e > 0, S > 0, \mu_s \geq 0$ и $\mu_s \in C_b(G_0), f_e, S \in C_b(G_0 \times [-1, 1])$ для любого $\lambda > 0$. Обратим также внимание на то, что для функции S справедливо условие нормировки

$$\int_{\Omega} S(r, \omega \cdot \omega', \lambda) d\omega' = 1.$$

Обозначим

$$\Gamma^{\pm} = \{(z, \omega) \in \partial G \times \Omega : L_{z, \mp \omega} \cap G_0 \neq \emptyset\}$$

и присоединим к уравнению (4) граничное условие

$$I(\xi, \omega, \lambda) = h(\xi, \omega, \lambda), \quad (\xi, \omega) \in \Gamma^-, \quad (5)$$

где неотрицательная функция $h(\xi, \omega, \lambda)$, описывающая входящий в среду G поток излучения, при любом $\lambda \in [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ принадлежит $C_b(\Gamma^-)$.

Пусть $d(r, \omega)$ — расстояние от точки $r \in \bar{G}$ до границы $\partial G = \bar{G} \setminus G$ в направлении ω . Согласно [8], функция $d(r, \omega) \in C_b(G \times \Omega)$.

К пространству $D(G_0 \times \Omega)$ будем относить функции $I(r, \omega, \lambda)$ такие, что при любом $\lambda \in [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ функции $I(r, \omega, \lambda), \omega \cdot \nabla_r I(r, \omega, \lambda)$ принадлежат пространству $C_b(G_0 \times \Omega)$ и для любых точек $(r, \omega) \in G_0 \times \Omega$ функция $I(r + t\omega, \omega, \lambda)$ абсолютно непрерывна по переменной $t \in [-d(r, -\omega), d(r, \omega)]$.

Определим операторы $\mathcal{L} : D(G_0 \times \Omega) \rightarrow C_b(G_0 \times \Omega)$ и $\mathcal{S} : C_b(G_0 \times \Omega) \rightarrow C_b(G_0 \times \Omega)$ следующими выражениями:

$$\mathcal{L}I(r, \omega, \lambda) = \omega \cdot \nabla_r I(r, \omega, \lambda) + \mu(r, \lambda)I(r, \omega, \lambda), \quad (6)$$

$$\mathcal{S}I(r, \omega, \lambda) = \mu_s(r, \lambda) \int_{\Omega} S(r, \omega \cdot \omega', \lambda) I(r, \omega', \lambda) d\omega'. \quad (7)$$

Таким образом, задача заключается в определении функции $I \in D(G_0 \times \Omega)$, удовлетворяющей соотношениям

$$\mathcal{L}I = \mathcal{S}I + J, \quad \text{на } G_0 \times \Omega \times [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}], \quad I = h(\xi, \omega, \lambda), \quad \text{на } \Gamma^- \times [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]. \quad (8)$$

4. Решение интегрального уравнения

Заметим, что из ограниченности и непрерывности функций S, μ_s вытекает, что при любом λ оператор \mathcal{S} действует из $C_b(G_0 \times \Omega)$ в $C_b(G_0 \times \Omega)$. Таким образом, определение оператора \mathcal{S} корректно.

Определим оператор $\mathcal{A} : C_b(G_0 \times \Omega) \rightarrow D(G_0 \times \Omega)$, который является правым обратным к оператору \mathcal{L} [6, 7], следующим соотношением:

$$(\mathcal{A}\phi)(r, \omega, \lambda) = \int_0^{d(r, -\omega)} \exp(-\tau(r, \omega, t, \lambda)) \phi(r - t\omega, \omega, \lambda) dt,$$

где через

$$\tau(r, \omega, \lambda) = \int_0^{d(r, -\omega)} \mu(r - t\omega, \lambda) dt, \quad \tau(r, \omega, t, \lambda) = \int_0^t \mu(r - t'\omega, \lambda) dt',$$

обозначены функции, иногда называемые оптическими расстояниями [7, 8].

Известно, что решение краевой задачи (8) эквивалентно решению уравнения [8]

$$I = I_0 + \mathcal{A}SI \quad (9)$$

в $C_b(G_0 \times \Omega)$, где

$$I_0(r, \omega, \lambda) = h(r - d(r, -\omega)\omega, \omega, \lambda) \exp(-\tau(r, -\omega, \lambda)) + (\mathcal{A}J)(r, \omega, \lambda).$$

Согласно определению коэффициента полного ослабления, $\mu = \mu_s + \mu_a$ [7, 8], где $\mu_a \geq 0$ – коэффициент поглощения. Поэтому справедливо $\mu_s \leq \mu$, и решение уравнения (9) может быть найдено в виде ряда Неймана [7, 8]

$$I = \sum_{m=0}^{\infty} (\mathcal{A}S)^m I_0, \quad (10)$$

который равномерно сходится в пространстве $C_b(G_0 \times \Omega)$ как геометрическая прогрессия со знаменателем $\beta(\lambda)$, где

$$\beta(\lambda) = \sup_{(r, \omega) \in G_0 \times \Omega} (\Lambda(r, \lambda) (1 - \exp(-\tau(r, -\omega, \lambda)))),$$

$$\Lambda(r, \lambda) = \begin{cases} \frac{\mu_s(r, \lambda)}{\mu(r, \lambda)}, & \text{если } \mu(r, \lambda) \neq 0, \\ 0, & \text{если } \mu(r, \lambda) = 0. \end{cases}$$

5. Метод Монте-Карло

Из результатов предыдущего параграфа следует, что решение краевой задачи (8) может быть найдено путем суммирования ряда Неймана (10). Рассмотрим более

подробно структуру данного ряда. Известно, что m -й член ряда описывает вклад в поток излучения, который дают частицы, испытавшие ровно m актов взаимодействия со средой. При этом каждый член ряда (10) представляет собой многомерный интеграл от известной функции. В связи с этим при численном суммировании ряда Неймана возникают достаточно серьезные проблемы с вычислением многомерных интегралов. Естественным подходом, применяемым при решении подобных задач, является метод Монте-Карло [11, 12]. Это обусловлено тем, что скорость его сходимости не зависит от кратности вычисляемых интегралов, а зависит лишь от количества испытаний и дисперсии распределения случайных величин. В настоящей работе для решения уравнения переноса излучения мы применим одну из версий метода Монте-Карло, называемую методом сопряженных блужданий [11].

Отметим, что в применяемом нами подходе к решению уравнения переноса задача метода Монте-Карло фактически сводится к простому вычислению кратных интегралов. Теория методов Монте-Карло в этом направлении достаточно хорошо разработана, и имеются известные теоремы относительно сходимости метода [11, 12]. Поэтому в данной работе при описании метода Монте-Карло мы остановимся лишь на некоторых технических деталях.

Как правило, сечения рассеяния электронов для различных химических элементов сильно отличаются друг от друга [2]. Следовательно, алгоритмы максимального сечения [13], эффективные для расчетов, когда коэффициенты $\mu(r)$, $\mu_s(r)$ области G слабо меняются, в нашем случае непригодны. Поэтому в описываемом ниже алгоритме Монте-Карло, мы будем предполагать, что μ , μ_s — кусочно-постоянные функции и использовать традиционную процедуру розыгрыша длины свободного пробега [12].

Перейдем к описанию метода Монте-Карло для решения уравнения (9). Пусть M — число членов усеченного ряда Неймана (10), а N — число моделируемых траекторий, тогда для решения I можно использовать оценку [13]:

$$I(r, \omega, \lambda) \approx I_N(r, \omega, \lambda; M) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N I_n(r, \omega, \lambda; M), \quad (11)$$

$$I_n(r, \omega, \lambda; M) = I_0(r, \omega, \lambda) + \sum_{m=1}^M \prod_{i=1}^m (1 - \exp(-\tau(\lambda, r^{n,i-1}, \omega^{n,i-1}))) \times I_0(\lambda, r^{n,i-1}, \omega^{n,i-1}), \quad (12)$$

где точка $r^{n,i}$ определяется следующим образом:

$$r^{n,i} = r^{n,i-1} - \omega^{n,i-1} t_{n,i}, \quad r^{n,0} = r, \quad \omega^{n,0} = \omega, \quad (13)$$

а $t_{n,i}$ — является решением уравнения

$$\frac{1 - \exp(-\tau(r^{n,i-1}, \omega^{n,i-1}, t_{n,i}, \lambda))}{1 - \exp(-\tau(r^{n,i-1}, \omega^{n,i-1}, \lambda))} = \alpha_{n,i}, \quad (14)$$

в котором $\alpha_{n,i}$ — независимая реализация случайной величины, равномерно распределенной на отрезке $[0, 1]$.

Так как $\mu(r, \lambda)$ — кусочно-постоянная функция, то уравнение (14) может быть решено аналитически. Основная проблема здесь заключается в трудоемкой процедуре нахождения всех точек пересечения луча $\{r + t\omega : t > 0\}$ с поверхностью ∂G_0 . Остановимся более подробно на решении уравнения (14). Преобразуем данное уравнение к виду

$$\int_0^{t_{n,i}} \mu(r^{n,i-1} - \omega^{n,i-1}t, \lambda) dt = a_{n,i}, \tag{15}$$

где

$$a_{n,i} = -\ln(1 - \alpha_{n,i}(1 - \exp(-\tau(r^{n,i-1}, \omega^{n,i-1}, \lambda)))) .$$

Пусть луч $L_{r^{n,i-1}, -\omega^{n,i-1}}$ пересекает множество ∂G_0 в точках $r_1^{n,i-1}, r_2^{n,i-1}, \dots, r_{l_{n,i-1}}^{n,i-1}$. Введем обозначения: $r_0^{n,i-1} = r^{n,i-1}$, $\tilde{r}_j^{n,i-1} = (r_j^{n,i-1} - r_{j-1}^{n,i-1})/2$, $j = 1, 2, \dots, l$ и

$$\tau(r_k^{n,i-1}, \omega, \lambda) = \sum_{j=1}^k \mu(\tilde{r}_j^{n,i-1}, \lambda) |r_j^{n,i-1} - r_{j-1}^{n,i-1}|. \tag{16}$$

Для заданного числа $a_{n,i}$ находим такой номер k , для которого справедливы неравенства

$$\tau(r_k^{n,i-1}, \omega, \lambda) \leq a_{n,i} < \tau(r_{k+1}^{n,i-1}, \omega, \lambda).$$

Далее, решая уравнение $a_{n,i} = \tau(r_k^{n,i-1}, \omega, \lambda) + \mu(\tilde{r}_{k+1}^{n,i-1}, \lambda)(t_{n,i} - |r_k^{n,i-1} - r_0^{n,i-1}|)$ относительно $t_{n,i}$, получаем искомую величину свободного пробега

$$t_{n,i} = |r_k^{n,i-1} - r_0^{n,i-1}| + \frac{a_{n,i} - \tau(r_k^{n,i-1}, \omega, \lambda)}{\mu(\tilde{r}_{k+1}^{n,i-1}, \lambda)}. \tag{17}$$

Для определения векторов $\omega^{n,i}$ используется следующая расчетная формула:

$$\omega^{n,i} = Q^{n,i-1} v^{n,i}, \tag{18}$$

где

$$v^{n,i} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_{n,i}) \sqrt{1 - \nu_{n,i}^2} \\ \sin(\varphi_{n,i}) \sqrt{1 - \nu_{n,i}^2} \\ \nu_{n,i} \end{pmatrix}, \tag{19}$$

$$Q^{n,i-1} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{\omega_1^{n,i-1} \omega_3^{n,i-1}}{\sqrt{1 - \omega_3^{n,i-1}}} & -\frac{\omega_2^{n,i-1}}{\sqrt{1 - \omega_3^{n,i-1}}} & \omega_1^{n,i-1} \\ \frac{\omega_2^{n,i-1} \omega_3^{n,i-1}}{\sqrt{1 - \omega_3^{n,i-1}}} & \frac{\omega_1^{n,i-1}}{\sqrt{1 - \omega_3^{n,i-1}}} & \omega_2^{n,i-1} \\ -\sqrt{1 - \omega_3^{n,i-1}} & 0 & \omega_3^{n,i-1} \end{pmatrix}, & \omega_3^{n,i-1} \neq 1, \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \omega_3^{n,i-1} = 1. \end{cases} \tag{20}$$

При определении матрицы $Q^{n,i-1}$ в (20) величины $\omega_1^{n,i-1}, \omega_2^{n,i-1}, \omega_3^{n,i-1}$ обозначают компоненты вектора $\omega^{n,i-1}$.

В соотношении (19) угол $\varphi_{n,i}$ — независимая реализация случайной величины, равномерно распределенной на промежутке $[0, 2\pi)$, а $\nu_{n,i}$ является решением уравнения

$$\int_{-1}^{\nu_{n,i}} S(r^{n,i-1}, \nu, \lambda) d\nu = \alpha_{n,i}. \quad (21)$$

Так как $S(r, \omega \cdot \omega', \lambda) = S_j(\omega \cdot \omega', \lambda)$ при $r \in G_j$, то уравнение (21) переписывается в виде

$$F_j(\nu_{n,i}, \lambda) = \int_{-1}^{\nu_{n,i}} S_j(\nu, \lambda) d\nu = \alpha_{n,i}. \quad (22)$$

Для оптимизации расчетов строится обратная функция $F_j^{-1}(\alpha, \lambda)$

$$F_j^{-1}(F_j(\nu, \lambda), \lambda) = F_j^{-1}\left(\int_{-1}^{\nu} S_j(\nu', \lambda) d\nu', \lambda\right) = \nu$$

и для каждого j функции $F_j(\nu, \lambda)$ и $F_j^{-1}(\alpha, \lambda)$ табулированы на равномерных сетках из $K + 1$ узлов: $\nu_i = -1 + \frac{2i}{K}$ и $\alpha_i = \frac{i}{K}$, $i = \overline{0, K}$. Для любого $\alpha \in (0; 1)$ функция $F_j^{-1}(\alpha, \lambda)$ вычисляется с помощью линейной интерполяции по формуле

$$F_j^{-1}(\alpha, \lambda) = K \left(F_j\left(\frac{[\alpha K]}{K}, \lambda\right) \left(\frac{[\alpha K] + 1}{K} - \alpha\right) + F_j\left(\frac{[\alpha K] + 1}{K}, \lambda\right) \left(\alpha - \frac{[\alpha K]}{K}\right) \right),$$

где через $[\alpha K]$ обозначена целая часть числа αK .

Приведенный здесь метод решения уравнения (9) был реализован в виде компьютерной программы, которая далее использовалась в численных экспериментах.

6. Численные эксперименты

Оценка работоспособности и точности работы предложенного метода проводилась на ряде численных экспериментов, имеющих отношение к визуализации структуры неоднородной среды. Результаты расчетов позволили не только оценить работоспособность метода, но и сделать ряд важных выводов о качестве визуализации структуры среды в зависимости от входных параметров задачи.

Во всех экспериментах область G представляет собой шар. Решение уравнения переноса $I(r, \omega, \lambda)$ находится в плоскости, параллельной $r_1 = 0$, и в направлении ω , перпендикулярном этой плоскости. Разбиение G_0 области G состоит из объединения конечного числа шаров (включений) $G_i = \{r : |r - r^i| < R_i\}$, $i = 2, \dots, p$, $G_1 = G \setminus \bigcup_{i=2}^p G_i$. Коэффициенты μ и μ_s внутри зон G_i , $i = 1, \dots, p$, постоянны и равны между собой. Их конкретные значения $\mu_i(E)$, $\mu_{i,s}(E)$ внутри областей G_i

соответствует материалу с атомным номером Z_i на некотором уровне энергии E . Отметим, что в электронной микроскопии обычно принято оперировать уровнем энергии, а не длиной волны излучения. Эти два параметра определяются взаимнооднозначно следующим соотношением [2]:

$$\lambda = \frac{\hbar c}{\sqrt{E(2m_0c^2 + E)}} = \frac{12.398}{\sqrt{E(1022 + E)}}, \quad (23)$$

где m_0 — масса покоя электрона, \hbar — постоянная Планка, c — скорость света в вакууме и E — энергия электрона, выраженная в килоэлектронвольтах.

Везде далее все линейные размеры указаны в нанометрах. В численных экспериментах область G представляет собой шар с центром в начале координат с радиусом 100 из материала с атомным номером $Z_1 = 14$ (Кремний). Среда содержит четыре шаровых включения G_i , $i = 2, 3, 4, 5$, одинакового радиуса $R_2 = R_3 = R_4 = R_5 = 10$ с центрами в точках с координатами $r^2 = (0, -10, -10)$, $r^3 = (0, 10, -10)$, $r^4 = (0, -10, 10)$, $r^5 = (0, 10, 10)$, которые заполнены материалами с атомными номерами $Z_2 = 16$ (Сера), $Z_3 = 23$ (Ванадий), $Z_4 = 57$ (Лантан), $Z_5 = 74$ (Вольфрам), соответственно. Коэффициенты рассеяния в областях G_i для этих элементов брались из [14] при энергии облучения $E = 200$ кэВ.

Функция h , описывающая входящее в среду излучение, задавалась следующей формулой:

$$h(\xi, \omega, E) = \begin{cases} ((1.0, 0, 0) \cdot \omega)^8, & \xi_1 < 0, (\xi_2; \xi_3) \in [-20; 20] \times [-20; 20]; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (24)$$

В первом эксперименте сканирование происходит в окне $W_1 = \{r = (r_1, r_2, r_3) : r_1 = 13, r_2, r_3 \in [-20; 20]\}$ и направлении $\omega = (1, 0, 0)$, что соответствует облучению среды «на просвет». Во втором эксперименте сканирование происходит в окне $W_2 = \{r = (r_1, r_2, r_3) : r_1 = -13, r_2 = r_3 \in [-20; 20]\}$ и в направлении $\omega = (-1, 0, 0)$, что соответствует измерению отраженного сигнала.

В обоих экспериментах вычисления проводились для кратности рассеяния $M = 0, 1, 2, 4, 10, 50$ и при $N = 10000$ траекторий.

Результаты экспериментов представлены в графическом виде на рисунках 1 и 2. Максимальное значение функции I соответствует белому цвету, минимальное — черному цвету.

Анализ рисунков 1 и 2 показывает, что визуально наибольший вклад шума можно наблюдать на изображениях при однократном, двукратном и четырехкратном рассеянии ($M = 1, 2, 4$). Так как случай $M = 0$ соответствует не рассеянному излучению, прошедшему сквозь среду, то функция $I_0(r, \omega, E)$ находится аналитически (без применения метода Монте-Карло). Поэтому изображение на рисунке 1 при $M = 0$ отчетливое, без видимых признаков присутствия случайного шума. На рисунке 2 при $M = 0$ наблюдается абсолютно черное изображение. Это обусловлено тем, что источник электронов сосредоточен в направлении, противоположном направлению сканирования отраженного сигнала, и обратно рассеянные частицы в приближении $M = 0$ не учитываются.

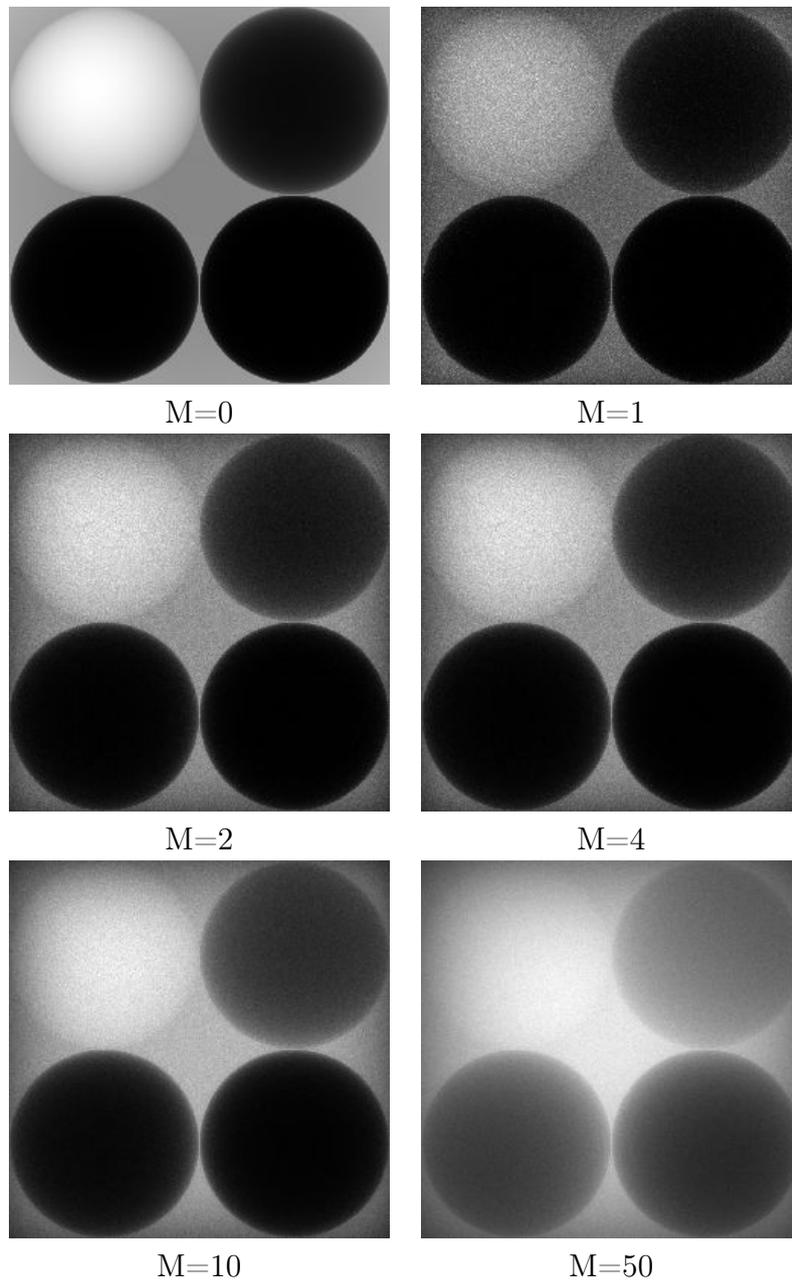


Рис. 1. Визуализация внутренней структуры среды при облучении на просвет для различных значений параметра M

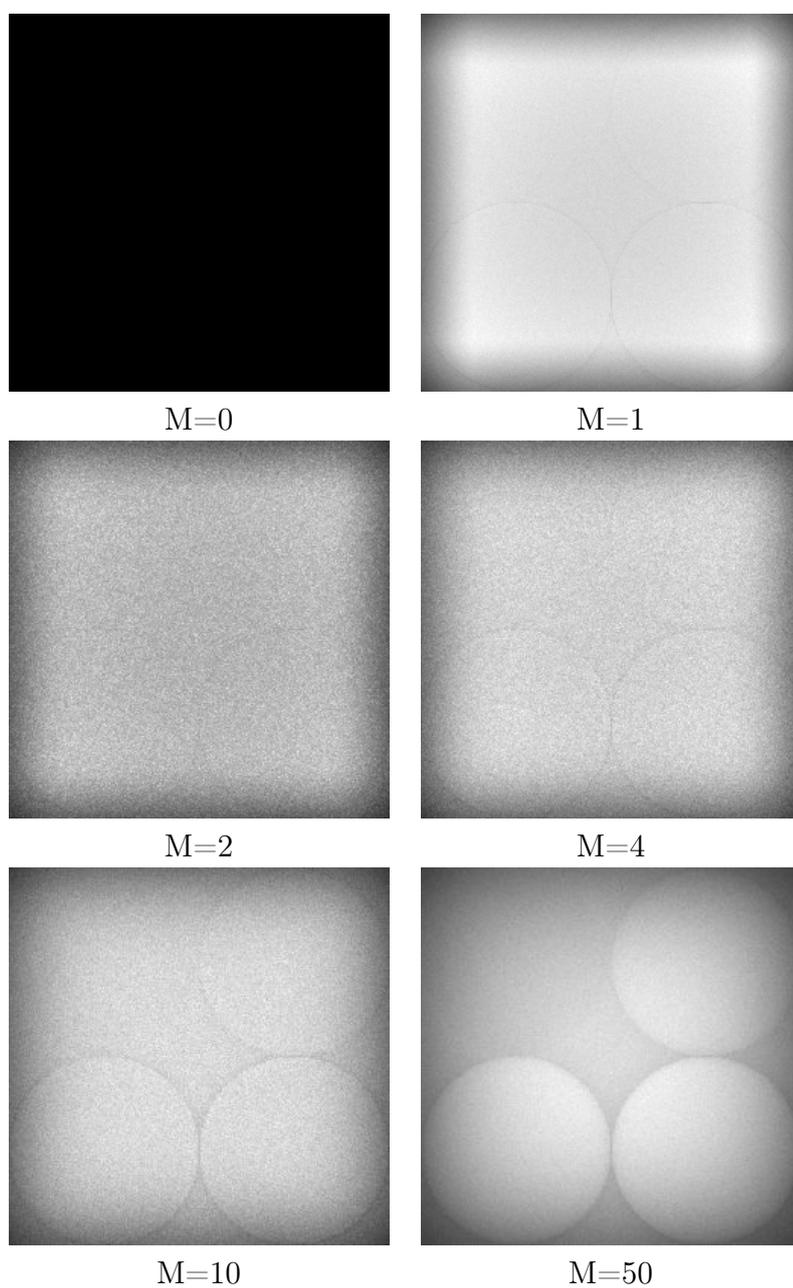


Рис. 2. Визуализация внутренней структуры среды в обратно рассеянном излучении для различных значений параметра M

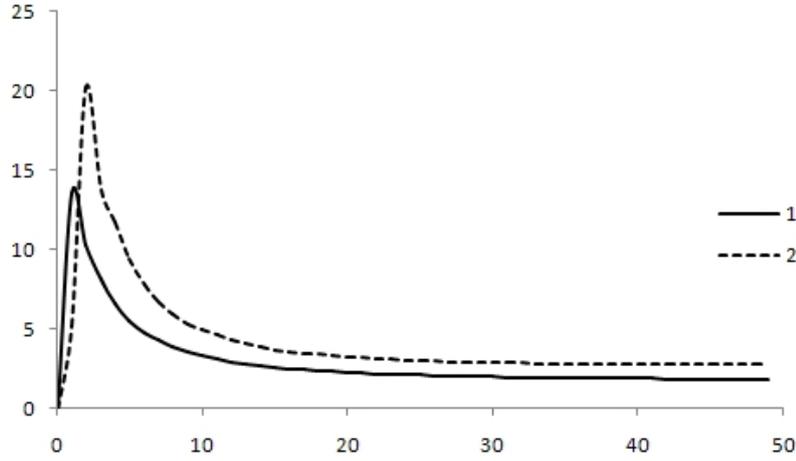


Рис. 3. Графики относительной среднеквадратичной ошибки δ_N в процентах при $N = 10000$ для прошедшего через среду излучения (1) и обратно рассеянного излучения (2)

Для оценки точности определения $I_N(r, \omega, E; M)$ мы нашли относительную среднеквадратичную ошибку

$$\delta_N(r, \omega, E; M) = \frac{\widehat{s}_N(r, \omega, E; M)}{\sqrt{N\widehat{I}_N(r, \omega, E; M)}} 100\%, \quad (25)$$

где функция $\widehat{s}_N(r, \omega, E; M)$ есть усреднение оценки выборочной дисперсии $s_N^2(r, \omega, E; M)$ в некоторой окрестности $V(r)$ точки r :

$$\widehat{s}_N(r, \omega, E; M) = \left(\frac{1}{\text{mes}_2 V(r)} \int_{V(r)} s_N^2((r'_1, r'_2, r'_3), \omega, E; M) dr'_2 dr'_3 \right)^{1/2}, \quad (26)$$

$$s_N^2(r, \omega, E; M) = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (I_k(r, \omega, E; M) - I_N(r, \omega, E; M))^2. \quad (27)$$

В формуле (25) величина $\widehat{I}_N(r, \omega, E; M)$ есть усреднение функции $I_N(r, \omega, E; M)$ в окрестности $V(r)$. В проведенных экспериментах окрестность $V(r)$ представляла собой квадрат в окне W_1 или W_2 со стороной $a = 8$, центр симметрии которого находился в точке $r = (13, 0, 0)$ или $r = (-13, 0, 0)$. Выражение $\text{mes}_2 V(r)$ в (26) обозначает площадь $V(r)$.

На рисунке 3 приведены графики функции $\delta_N(r, \omega, E; M)$ в зависимости от параметра M , характеризующего кратность учитываемых столкновений электрона с атомами среды. Поведение функций $\delta_N(r, \omega, E; M)$ согласуется с качеством изображений на рисунках 1 и 2. Наибольшее значение $\delta_N(r, \omega, E; M)$ наблюдается именно при небольших кратностях рассеяния $M = 1, 2, 3, 4, 5$. Это обусловлено тем, что функция $I_N(r, \omega, E; M)$ при небольших M мала и сравнительно медленно возрастает с увеличением M .

Согласно [16], произведение дисперсии случайной величины на среднее время расчета одного выборочного значения называется трудоемкостью и является критерием качества алгоритма. Сравнение этой величины для предложенного алгоритма с трудоемкостью алгоритмов, рассмотренных в работе [13], показало следующее. Несмотря на достаточно времязатратную в нашем случае операцию, связанную с вычислением нового направления в каждом акте рассеяния, трудоемкость предложенного в работе метода всего лишь в 2-3 раза превосходит трудоемкость аналогичного алгоритма Монте-Карло с изотропным рассеянием [13].

Как в первом, так и во втором экспериментах включение G_4 практически на всех изображениях невидимо или плохо видимо (см. рис. 1 и 2, верхний левый шар). Это объясняется близостью коэффициентов рассеяния для Лантана (G_4) и Кремния (G_1) [15]. Отметим, что проблема визуализации внутреннего строения среды близка к задаче одноракурсного зондирования, рассмотренной в работах [17, 18, 19]. В работах [17, 18, 19] предлагаются различные способы, позволяющие улучшить качество изображений неизвестной среды по имеющейся информации о сигнале только в одном направлении. В дальнейшем мы планируем применить эти методы для улучшения одноракурсных изображений электронного зондирования неоднородных сред.

Список литературы

- [1] Д. М. Синдо, Т. Оикава, *Аналитическая электронная просвечивающая микроскопия*, Техносфера, М., 2006.
- [2] E. J. Kirkland, *Advanced Computing in Electron Microscopy*, Springer, New York Dordrecht Heidelberg, 2010.
- [3] N. F. Mott, "The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei", *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A124** (1929), 425-442.
- [4] В. А. Кузюк, А. Х. Рахматулина, "Некоторые асимптотические задачи теории переноса электронов", *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **15:5** (1975), 1248-1261.
- [5] М. Е. Жуковский, С. В. Подоляко, Р. В. Усков, "Модель индивидуальных соударений для описания переноса электронов в веществе", *Математическое моделирование*, **23:6** (2011), 147-160.
- [6] В. С. Владимиров, "Математические задачи односкоростной теории переноса частиц", *Тр. МИАН СССР*, **61** (1961), 3-158.
- [7] Т. А. Гермогенова, *Локальные свойства решений уравнения переноса*, Наука, М., 1986.
- [8] Д. С. Аниконов, А. Е. Ковтанюк, И. В. Прохоров, *Использование уравнения переноса в томографии*, Логос, М., 2000.
- [9] Е. Г. Шейкин, "Модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов на атомах для моделирования прохождения электронов в веществе методом Монте-Карло", *Журнал технической физики*, **80:1** (2010), 3-11.
- [10] А. Г. Масловская, А. В. Сивунов, "Компьютерное моделирование методом монте-карло электронных траекторий в полярных диэлектриках при воздействии электронными пучками средних энергий", *Вестник Саратовского государственного технического университета*, **2:1** (2012), 53-58.
- [11] Г. И. Марчук, Г. А. Михайлов, М. А. Назаралиев и др., *Метод Монте-Карло в атмосферной оптике*, Наука, Новосибирск, 1976.

- [12] С. М. Ермаков, *Метод Монте-Карло в вычислительной математике*, Бином. Лаборатория знаний, Санкт-Петербург, 2009.
- [13] И. В. Прохоров, А. С. Жуплев, “Об эффективности методов максимального сечения в теории переноса излучения”, *Компьютерные исследования и моделирование*, **5:4** (2013), 573-582.
- [14] А. С. Жуплев, И. В. Прохоров, “Расчет коэффициентов ослабления электронного излучения в заданном диапазоне энергий”, *Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ 2014612192. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ*, 20.02.2014.
- [15] А. С. Жуплев, В. Г. Назаров, И. В. Прохоров, Е. В. Пустовалов, “База данных пар химических элементов, неразличимых на некотором уровне энергии при электронном просвечивании”, *Свидетельство о государственной регистрации базы данных ЭВМ 2014620106. Зарегистрировано в Реестре баз данных*, 15.01.2014.
- [16] И. М. Соболев, *Численные методы Монте-Карло*, М., Наука, 1973.
- [17] D. S. Anikonov, V. G. Nazarov, I. V. Prokhorov, “Algorithm of finding a body projection within an absorbing and scattering medium”, *Inverse and Ill-Posed Problems*, **18:8** (2011), 885-893.
- [18] Д. С. Аниконов, В. Г. Назаров, И. В. Прохоров, “Задача одноракурсного зондирования неизвестной среды”, *Сибирский журнал индустриальной математики*, **14:2** (2011), 21-27.
- [19] Д. С. Аниконов, В. Г. Назаров, И. В. Прохоров, “Интегродифференциальный индикатор для задачи одноракурсной томографии”, *Сиб. журн. индустр. матем.*, **17:2** (2014), 3-10.

Представлено в Дальневосточный математический журнал 10 июля 2014 г.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 13-01-00275, 14-01-31131) и программы «Дальний Восток».

Zhuplev A. S., Prokhorov I. V., Yarovenko I. P. Statistical modeling of the electron transport in visualization problems of inhomogeneous media. Far Eastern Mathematical Journal. 2014. V. 14. № 2. P. 217–230.

ABSTRACT

The work is devoted to the problems of mathematical modeling electron transport in matter. We propose new weighted Monte Carlo method for solving the electron transfer equation. The numerical experiments with application to the problems of electronic single-beam probing inhomogeneous media are carried out. The influence of multiple scattered electrons on the image quality is experimentally studied.

Key words: *transfer equation of electrons, scattering cross-section, boundary-value problems, Monte-Carlo methods.*