На правах рукописи

Яровенко Иван Петрович

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ С ПРИЛОЖЕНИЯМИ К ЗАДАЧАМ ОПТИЧЕСКОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Владивосток
2007

Работа выполнена в лаборатории Вычислительных методов математической физики Института прикладной математики Дальневосточного отделения Российской Академии Наук

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, с.н.с.
Прохоров Игорь Васильевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Нурминский Евгений Алексеевич

доктор физико-математических наук, с.н.с
Ярощук Игорь Олегович

Ведущая организация: Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН

Защита состоится " 16 " февраля 2007г. в 12^{00} часов на заседании диссертационного совета Д 005.007.01 в Институте автоматики и процессов управления ДВО РАН по адресу: 690041, г.Владивосток, ул.Радио, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института автоматики и процессов управления ДВО РАН.

Автореферат разослан " 15 " января 2007 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 005.007.01 А.В. Лебедев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Томографические методы исследования приобрели широкую известность благодаря появлению и совершенствованию медицинских томографов. В настоящее время математическая теория компьютерной томографии является быстро развивающейся и актуальной областью математической физики. В связи с растущей популярностью применения томографических методов исследования в медицине и технике, в последние годы возрос интерес к восстановлению внутренней структуры сильно рассеивающих сред. При этом, под внутренней структурой обычно понимается пространственное распределение макроскопических характеристик среды, таких как показатель преломления, коэффициенты полного взаимодействия и рассеяния излучения и т.д. Такой интерес обусловлен как практической значимостью рентгеновской и оптической томографии сильнорассеивающих сред, так и научной сложностью самой задачи. Это связано с тем, что хорошо разработанный математический аппарат традиционной вычислительной томографии, опирающийся на преобразование Радона, в случае рассеивающих сред не работает. Поэтому при разработке томографических подходов приходится начинать с описания прохождения излучения через рассеивающие среды.

Общепризнанной и наиболее полной моделью для описания взаимодействия излучения с веществом является система уравнений Максвелла. Учет рассеяния на частицах в рамках теории Максвелла, как правило, влечет необходимость рассмотрения одного из приближений теории многократного рассеяния, что в свою очередь, приводит к достаточно громоздкой (чрезмерно детализированной) модели и существенно усложняет ее исследование. Альтернативой данному подходу является модель, основанная на кинетическом уравнении переноса излучения, которая также достаточно известна и широко применяется при моделировании процесса распространения излучения в веществе. При этом переход от математической модели к задачам томографии осуществляется естественным образом, так как искомые характеристики входят в уравнение переноса в виде коэффициентов, имеющих очевидный физический смысл.

В связи с этим, представляет интерес исследование качественных свойств решений краевых задач для уравнения переноса излучения с целью поиска новых математических эффектов, с последующим переходом к задачам томографии. Кроме того, актуальной остается проблема проверки работоспособности ранее разработанных алгоритмов, при условии учета в модели новых физических эффектов. Этому и посвящена данная работа.

В диссертации рассматриваются краевые задачи для уравнения переноса излучения при различных значениях энергии распространяющегося излучения. При этом, основное внимание уделяется наименее изученным вариантам уравнения переноса излучения.

В первую очередь – это краевая задача для моноэнергетического уравнения переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на границах раздела материалов, которые моделируют преломление и отражение (A. Ishimaru, В.С. Потапов, И.В. Прохоров). Интерес к изучению данной модели связан не только с рассматривавшимися ранее задачами атмосферной оптики (Г.И. Марчук, Г.А. Михайлов, М.А. Назарлиев, Р.А. Дробинян) и фотометрии (Л.А. Апресян, Ю.А. Кравцов), но также, обусловлен бурным развитием методов исследования биологических тканей (F. Duck, В.В. Тучин). В последнее время интерес к уравнению переноса также возрос в связи с разработкой более совершенных алгоритмов визуализации трехмерных объектов (J. Arvo, H. Wann Jensen).

Во вторую очередь — это полихроматическое уравнение переноса, описывающее процесс распространения фотонов в области сильного комптоновского рассеяния. Не смотря на то, что Комптон-эффект известен достаточно давно, существует довольно мало теоретических работ посвященных свойствам решения уравнения переноса с учетом данного эффекта. Из существующих работ выделим работы Д.С. Аниконова и Д.С. Коноваловой.

Цель работы. Теоретическое и численное исследование краевых задач для уравнения переноса излучения с целью поиска новых математических эффектов, с последующим переходом к задачам томографии.

В рамках поставленной цели рассматривались следующие задачи:

1) Теоретическое и численное исследование краевых задач для уравнения переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на границах разрыва коэффициентов, применительно к моделированию распространения излучения видимого диапазона в рассеивающих средах, а также к задачам оптической диагностики и визуализации трехмерных объектов.

2) Численная проверка работоспособности метода, основанного на вычис-

лении интегро-дифференциального индикатора неоднородности для решения задачи определения поверхностей разрыва коэффициентов полихроматического уравнения переноса излучения, моделирующего распространение фотонов в случае преобладания в среде комптоновского рассеяния.

Методы исследования. При изучении свойств решения краевых задач для уравнения переноса применяются некоторые разделы теории интеграла Лебега, а также предельные свойства непрерывных и ограниченных функций. При построении алгоритмов решения краевых задач применяются некоторые разделы теории методов Монте-Карло.

Научная новизна результатов диссертации заключается в следующем:

1) Доказана разрешимость краевой задачи для уравнения переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на границах раздела материалов в плоскопараллельном случае. Проверено выполнение условий теорем существования и единственности решения для оператора сопряжения, моделирующего преломление и отражение по законам Френеля.

2) Получено представление для производной по угловой переменной от решения уравнения переноса излучения с условиями сопряжения моделирующими преломление и отражение по законам Френеля. Показано, что производная от решения по угловой переменной может иметь особенности при приближении аргумента к косинусу угла полного внутреннего отражения.

3) Предложен метод нахождения показателей преломления компонент мнгослойной системы по известному потоку выходящего из среды излучения.

4) Разработаны и реализованы в виде компьютерных программ алгоритмы решения прямой задачи для уравнения переноса в плоскопараллельном и трехмерном случаях, когда оператор сопряжения определяется формулами Френеля.

Теоретическая и практическая ценность работы. Теоретическое значение полученных результатов заключается в исследовании разрешимости новых краевых задач для уравнения переноса излучения, и изучении качественных свойств их решений.

Практическая ценность работы заключается в исследовании математических моделей оптической и рентгеновской томографии. Предложенные в диссертации вычислительные алгоритмы и их реализация в виде компьютерных программ допускают практическое применение результатов в медицине и технике.

Созданная база данных пар веществ, плоховидимых при их рентгенодиагностике может быть использована специалистами в теории переноса излучения и рентгеновской томографии при интерпретации результатов, полученных экспериментальным путем.

Достоверность полученных результатов обеспечивается классическими подходами теории переноса излучения и строгими математическими доказательствами.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на Научной конференции студентов и аспирантов ДВГУ, Владивосток, 2001, Дальневосточных математических школах-семинарах им. академика Е.В. Золотова (Владивосток, 2000—2004, 2006 ; Хабаровск, 2005) и Дальневосточных конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых по математическому моделированию (Владивосток, 2002–2004).

Диссертация докладывалась автором на расширенном семинаре Лаборатории управления надежностью сложных систем ИАПУ ДВО РАН и общеинститутском семинаре ИПМ ДВО РАН.

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в 18 работах.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и списка литературы. Работа изложена на 144 страницах машинописного текста, содержит 21 рисунок и 9 таблиц. Список литературы включает 105 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** излагается предмет исследования диссертации, дается обоснование его актуальности, ставятся основные цели и пути их достижения. Дается краткое содержание разделов диссертации и обзор работ по теме диссертации.

Первая глава посвящена исследованию свойств краевой задачи для стационарного моноэнергетического уравнения переноса в слоистой среде имеющей плоскопараллельное строение

$$\nu f'_z(z,\nu) + \mu(z) f(z,\nu) = \\ = \mu_s(z) \int\limits_{-1}^{1} g(z,\nu,\nu') f(z,\nu') d\nu' + J(z,\nu), \quad (z,\nu) \in G \times (-1,1). \quad (1)$$

Здесь $f(z,\nu)$ — плотность потока излучения в точке z, в направлении составляющем с положительным направлением оси z угол, косинус которого равен ν, далее величину ν, также будем называть направлением; $\mu(z)$— коэффициент полного взаимодействия; $\mu_s(z)$ — коэффициент рассеяния; $g(z,\nu,\nu')$ — фазовая функция рассеяния, характеризующая вероятность того, что в точке z фотон, летящий в направлении ν' сменит его на ν; $J(z,\nu)$ – плотность внутренних источников излучения.

Предполагается, что плоскости $z = z_k$ являются границами раздела слоев $G_i = (z_{i-1}, z_i)$, $(z_i < z_{i+1},\ i = 1,..,p)$ многослойной системы $G_0 = \bigcup\limits_{i=1}^{p} G_i,\ (G_i \cap G_j,\ i \neq j)$. Множество G_0 представляет собой разбиение среды $G = (z_0, z_p)$, $(\overline{G_0} = \overline{G})$, в которой изучается процесс распространения излучения.

Рассмотрим следующие множества

$$\Gamma_{int} = \bigcup_{i=1}^{p-1} \{z_i \times \{[-1,0) \cup (0,1]\}\}, \quad \Gamma^{\pm}_{ext} = \{\{z_0 \times [\mp 1, 0)\} \cup \{z_p \times (\pm 1, 0]\}\},$$

$$\Gamma^{\pm} = \Gamma_{int} \cup \Gamma^{\pm}_{ext}, \quad \Gamma = \Gamma^{+} \cup \Gamma^{-}.$$

На граничных плоскостях ставятся условия сопряжения имеющие вид

$$f|_{\Gamma^-}(z,\nu) = (\widehat{B} f|_{\Gamma^+})(z,\nu) + h(z,\nu), \quad (z,\nu) \in \Gamma^-, \quad (2)$$

где

$$f|_{\Gamma^{\pm}}(z,\nu) = \begin{cases} f(z \pm 0, \nu), & \nu < 0, \\ f(z \mp 0, \nu), & \nu > 0, \end{cases}$$

$$f(z \pm 0, \nu) = \lim_{\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0} f(z \pm \varepsilon, \nu),$$

$\widehat{B}$ – некоторый оператор сопряжения, позволяющий моделировать преломление, отражение и другие эффекты, связанные с переходом потока излучения через границу раздела материалов. Функцию h можно интерпретировать как плотность поверхностных источников излучения.

Считается, что на внешней границе области эффектами преломления и отражения можно пренебречь, так что $(\widehat{B}f|_{\Gamma^+})(z,\nu) = 0$ при $(z,\nu) \in \Gamma^-_{ext}$. В результате на внешней границе области условия (2) примут вид

$$f|_{\Gamma^-}(z,\nu) = h(z,\nu), \quad (z,\nu) \in \Gamma^-_{ext}. \tag{3}$$

Таким образом, можно считать, что внешняя граница области является фиктивной границей раздела сред, служащей только для задания плотности потока входящего излучения.

Стоит отметить, что хотя плоско-параллельный случай и считается упрощенной моделью переноса излучения, его рассмотрение представляет большой интерес так как, с одной стороны, он очень широко используется на практике, с другой стороны, плоско-параллельная симметрия — это пример неограниченной в трехмерном пространстве области. Неограниченность области вносит ряд отличий от случая трехмерной ограниченной области, который изучался в работах И.В. Прохорова. В частности, удается показать единственность решения краевой задачи для более широкого широкого класса операторов сопряжения $\widehat{B}$.

В первом параграфе приводятся основные предположения и ограничения, наиболее существенные из которых следующие. Считается, что функции μ, μ_s, g неотрицательны и $\mu,\mu_s \in L_\infty(G)$, $\mu \geq \underline{\mu} > 0$, $\underline{\mu} = \text{const}$, $J \in L_\infty(G \times (-1,1))$. Относительно функции g предполагается, что g измерима и ограничена на $G \times (-1,1) \times (-1,1)$, и при почти всех $(z,\nu) \in G \times (-1,1)$ выполняется условие нормировки

$$\int_{-1}^{1} g(z,\nu,\nu')d\nu' = 1.$$

Функция $h \in L_\infty(\Gamma^-)$. Относительно оператора сопряжения на границах раздела сред будем полагать, что $\widehat{B} : L_\infty(\Gamma^+) \to L_\infty(\Gamma^-)$ — линейный, ограниченный и неотрицательный.

Далее, вводится класс D, в котором ищется решение задачи. К классу D относятся функции $f(z,\nu)$, которые обладают следующими свойствами:

1) $f(z,\nu)$— абсолютно непрерывна по $z \in (z_k, z_{k+1}]$, при почти всех $\nu > 0$ и абсолютно непрерывна по $z \in [z_k, z_{k+1})$, при почти всех $\nu < 0$, $\quad k = \overline{0, p-1}$;

2) при почти всех $(z,\nu) \in G \times (-1,1)$ существует величина $lf \equiv \nu f'_z + \mu f \in L_\infty(G \times (-1,1))$;

3) $f|_{\Gamma^-} \in L_\infty(\Gamma^-)$.

Показывается, что линейное множество D с нормой

$$\|f\|_D = \max\left\{ \|f|_{\Gamma^-}\|_{L_\infty(\Gamma^-)}, \left\|\frac{lf}{\mu}\right\|_{L_\infty(G\times(-1,1))} \right\},$$

будет банаховым пространством.

Во втором параграфе приводится постановка прямой задачи, заключающейся в нахождении неизвестной функции f, когда $\mu, \mu_s, g, h, J, \widehat{B}$ заданы. Изучается ее разрешимость. Основным результатом параграфа является следующее утверждение.

Теорема. *Пусть выполняются условия* $\overline{\lambda} = \|\mu_s/\mu\|_{L_\infty(G)} < 1$, $\|\widehat{B}\| \leq 1$, $\widehat{B}1 = 1$, $h = 0$ *на* Γ_{int} *и* $\widehat{B}\phi_n \to \widehat{B}\phi$ *почти всюду на* Γ^-, *если* $\phi_n \to \phi$ *почти всюду на* Γ^+, *тогда существует единственное решение краевой задачи (1)-(3) и при почти всех* $(z,\nu) \in G \times (-1,1)$ *для него справедлива оценка*

$$|f(z,\nu)| \leq \frac{1}{1-\overline{\lambda}} \max\left\{ \|h\|_{L_\infty(\Gamma^-)}, \left\|\frac{J}{\mu}\right\|_{L_\infty(G\times(-1,1))} \right\}.$$

Параграф 3 посвящен исследованию непрерывности решения краевой задачи (1)-(3). Предполагается, что выполняются следующие условия на коэффициенты уравнения переноса: Пусть функции μ, μ_s, g, J, h неотрицательны и μ,$\mu_s \in C_b(G_0)$, $\mu \geq \underline{\mu} > 0$, $J \in C_b(G_0 \times [-1,1])$, $h \in C_b(\Gamma^-)$. Относительно функции g будем предполагать, что $g \in C_b(G_0 \times [-1,1]\backslash\{0\} \times [-1,1]\backslash\{0\})$ и для любых $(z,\nu) \in G \times [-1,1]$ выполняется условие нормировки

$$\int_{-1}^{1} g(z,\nu,\nu')d\nu' = 1.$$

Относительно оператора сопряжения будем полагать, что $\widehat{B} : C_b(\Gamma^+) \to C_b(\Gamma^-)$— линейный, ограниченный, неотрицательный и $\|\widehat{B}\| \leq 1$. Здесь $C_b(Q)$ – пространство функций ограниченных и непрерывных на Q с нормой $\|f\|_{C_b(Q)} = \sup\limits_{x\in Q} |f(x)|$.

Основным результатом параграфа является следующее утверждение.

Теорема. *Пусть выполняются условия*

$$\|\widehat{B}\| \leq 1, \quad \overline{\lambda} = \|\mu_s/\mu\|_{C_b(G_0)} < 1,$$

тогда существует единственное решение задачи (1),(3) в классе DC.

К классу DC относятся функции $f(z,\nu)$, обладающие следующими свойствами:

1) $f(z,\nu)-$ абсолютно непрерывна по $z \in (z_i, z_{i+1}]$, при всех $\nu > 0$ и абсолютно непрерывна по $z \in [z_i, z_{i+1})$, при всех $\nu < 0$, $\quad i = \overline{0, p-1}$;

2) $(lf)(z,\nu) = \nu f'_z(z,\nu) + \mu(z) f(z,\nu) \in C_b(X_0)$;

3) $f|_{\Gamma^-}(z,\nu) \in C_b(\Gamma^-)$.

В §4 рассматривается пример условий сопряжения, позволяющих моделировать эффекты преломления и отражения по законам Френеля. Обозначим через $k(z)$ показатель преломления среды в точке z. Будем считать, что функция k кусочно-постоянная, так что

$$k(z) = \sum_{i=1}^{p} \chi_i(z) k_i.$$

Здесь $\chi_i(z)$ – суть характеристическая функция интервала (z_{i-1}, z_i), $k_i = \mathrm{const} > 0$. Определим величины $\widetilde{k}_i(\nu), \psi_i(\nu)$, $i = 1, ..., p-1$ с помощью следующих соотношений:

$$\widetilde{k}_i(\nu) = \begin{cases} k_{i+1}/k_i, & 0 < \nu \le 1; \\ k_i/k_{i+1}, & -1 \le \nu < 0; \end{cases}$$

$$\psi_i(\nu) = \begin{cases} \mathrm{sign}(\nu)\sqrt{1 - \widetilde{k}_i^2(\nu)(1-\nu^2)}, & 1 - \widetilde{k}_i^2(\nu)(1-\nu^2) \ge 0; \\ 0, & 1 - \widetilde{k}_i^2(\nu)(1-\nu^2) < 0. \end{cases}$$

Введем в рассмотрение оператор сопряжения, действующий по правилу:

$$(\widehat{B} f|_{\Gamma^+})(z_i,\nu) = R(z_i,\nu) f|_{\Gamma^+}(z_i,\nu_R) + T(z_i,\nu) f|_{\Gamma^+}(z_i,\nu_T), \quad i = 1, ..., p-1, \tag{4}$$

$$(\widehat{B} f|_{\Gamma^+})(z_i,\nu) = 0, \quad i = 0,\ i = p. \tag{5}$$

Здесь

$$\nu_R = -\nu, \quad \nu_T = \nu_T(z_i,\nu) = \psi_i(\nu),\ i = 1, ..., p-1$$

— направления распространения излучения падающего на поверхность $z = z_i$, и в результате зеркального отражения и преломления по закону Снелиуса изменившее его на ν. Коэффициенты R и T называются, соответственно, коэффициентом отражения и прохождения. Они характеризуют свойства границы отражать и пропускать излучение и определяются следующими формулами

$$R(z_i,\nu) = \frac{1}{2}(R_{\parallel}^2 + R_{\perp}^2), \quad T(z_i,\nu) = \frac{1}{2}(T_{\parallel}^2 + T_{\perp}^2)\frac{\widetilde{k}_i(\nu)\nu}{\psi_i(\nu)}, \tag{6}$$

$$R_{\parallel}(z_i,\nu) = \frac{\nu - \widetilde{k}_i(\nu)\psi_i(\nu)}{\nu + \widetilde{k}_i(\nu)\psi_i(\nu)}, \quad R_{\perp}(z_i,\nu) = \frac{\widetilde{k}_i(\nu)\nu - \psi_i(\nu)}{\widetilde{k}_i(\nu)\nu + \psi_i(\nu)}, \tag{7}$$

$$T_{\parallel}(z_i,\nu) = \frac{2\psi_i(\nu)}{\widetilde{k}_i(\nu)\psi_i(\nu) + \nu}, \quad T_{\perp}(z_i,\nu) = \frac{2\psi_i(\nu)}{\psi_i(\nu) + \widetilde{k}_i(\nu)\nu}. \tag{8}$$

Далее, показывается, что оператор сопряжения определяемый формулами (4),(5) удовлетворяет ограничениям теорем о разрешимости прямой задачи.

Пятый параграф посвящен описанию численного метода решения прямой задачи, в случае, когда оператор сопряжения моделирует преломление и отражение по законам Френеля. При этом используется одна из модификаций метода Монте-Карло, называемая методом сопряженных блужданий с использованием ветвления траекторий.

Вторая глава посвящена рассмотрению следующей обратной задачи:

Пусть оператор сопряжения определяется формулами (4),(5). Из уравнения (1) и условий (2),(3) определить относительные показатели преломления $\widetilde{k}_i$ *веществ, входящих в состав многокомпонентной среды* G*, если известна плотность потока выходящего из среды излучения* $H(z,\nu) = f|_{\Gamma^+}(z,\nu), \quad (z,\nu) \in \Gamma^+_{ext}$.

Суть задачи заключается в нахождении относительных показателей преломления веществ, входящих в многослойную систему, по известному потоку выходящего из среды излучения. Данная глава содержит четыре параграфа.

В первом параграфе приводится общая постановка задачи и обсуждается ее физический смысл.

Второй параграф посвящен рассмотрению некоторых свойств решения прямой задачи в плоском слое, в случае, когда оператор сопряжения моделирует преломление и отражение по законам Френеля. Выводятся представления для производной решения по угловой переменной. Показывается, что производная решения по угловой переменной может иметь особенности при приближении угловой переменной ν к косинусам углов полного внутреннего отражения на какой либо из границ. Важным является то обстоятельств, что наличие дополнительных особенностей у уравнения переноса излучения, вносимых условиями преломления и отражения Френеля — это новый математический эффект, и его исследование приводит к появлению неизвестных ранее результатов.

В § 3 изучается частный случай задачи определения показателей преломления. Предполагается, что процесс распространения излучения рассматривается в трехслойной системе, причем известен абсолютный показатель преломления первого слоя k_1. Задача состоит в том, чтобы определить абсолютные показатели преломления второго и третьего слоев. При этом, известным считается лишь часть выходящего из среды излучения, а именно — отраженный поток $f|_{\Gamma^+}(z_0,\nu)$, $\nu < 0$. Для решения задачи вводится специальная функция, вид

$$Ind(k) = \left| \int\limits_{-1}^{\nu_0(k)} \frac{\partial H}{\partial \nu}(\nu)\alpha(k,\nu)d\nu \right|, \quad k > k_1, \tag{9}$$

где

$$\nu_0(k) = -\sqrt{1 - \left(\frac{k}{k_1}\right)^2}, \tag{10}$$

$$\alpha(k,\nu) = \begin{cases} \nu \Big/ \sqrt{1 - \left(\frac{k_1}{k}\right)^2 (1-\nu^2)}\,, & \nu < \nu_0(k) \\ 0, & \nu \geq \nu_0(k). \end{cases} . \tag{11}$$

Показывается, что функция $Ind(k)$ неограниченно возрастает с приближением аргумента k к коэффициентам k_2 и k_3 и конечна для всех остальных значений k.

Четвертый параграф содержит результаты численных экспериментов по решению задачи определения показателей преломления. Алгоритм тестируется на модельной системе, коэффициенты, которой, соответствуют реальным веществам. В качестве облучаемого материала использовался поверхностный слой человеческой кожи толщиной 300 мкм (он включает в себя роговой слой кожи, эпидермис и верхний слой дермы). На численных примерах показывается, как меняется качество восстановления показателя преломления в зависимости от точности измерений выходящего излучения.

В **третьей главе** диссертации изучается задача для уравнения переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на поверхностях разрыва коэффициентов в ограниченной области G трехмерного Евклидового пространства E^3. Уравнение переноса излучения в этом случае имеет вид

$$\omega \cdot \nabla_r f(r,\omega) + \mu(r) f(r,\omega) =$$
$$= \mu_s(r) \int\limits_{\Omega} g(r, \omega \cdot \omega') f(r,\omega') d\omega' + J(r,\omega), \quad (r,\omega) \in G \times \Omega. \quad (12)$$

Здесь функция $f(r,\omega)$ имеет смысл плотности потока излучения в точке $r \in G$ и направлении $\omega \in \Omega = \{\omega \in E^3 : |\omega| = 1\}$. Величины μ, μ_s, g, J описывают среду G и называются, соответственно, коэффициентом полного взаимодействия, коэффициентом рассеяния, фазовой функцией рассеяния и плотностью внутренних источников.

Будем считать, что G допускает следующее представление

$$G = \bigcup_{i=1}^{p} G_i, \quad p < \infty, \quad (13)$$

где G_i — открытые области, такие, что $G_i \cap G_j = \emptyset$, при $i \neq j$. Области G_i будем интерпретировать как неоднородности, входящие в состав многокомпонентной среды G, считая что $i-$ая компонента области G заполнена веществом с номером "i". Пусть $\partial G = \bigcup\limits_{i=1}^{p} \partial G_i$. Будем называть множество $\partial\overline{G}(\partial\overline{G} \subset \partial G)$ внешней границей множества G, а $\gamma = \partial G \backslash \partial\overline{G}$ — внутренней границей.

Относительно границ областей ∂G_i будем предполагать, что они кусочно - гладкие из класса C^1. В силу предполагаемой гладкости границ, при почти всех $z \in \partial G_i$, существует вектор нормали $n(z)$.

Для определенности, будем считать, что в точке $z \in \partial G_i \subset \partial G$, нормаль выбирается внешней к ∂G_i. Если же z является точкой контакта двух смежных областей G_i и G_j, $1 \leq i < j \leq p$, на участках гладкости ∂G_i и ∂G_j, то $n(z)$ выбирается внешней к поверхности с большим индексом, то есть к ∂G_j. Введем в рассмотрение множества

$$\Gamma^{\pm} = (\gamma \times \Omega) \cup (\partial\overline{G} \times \{\omega \in \Omega,\ \mathrm{sign}(n(z) \cdot \omega) = \pm 1\}). \quad (14)$$

На границах раздела материалов ставятся условия сопряжения вида

$$f|_{\Gamma^-}(z,\omega) = (\widehat{B} f|_{\Gamma^+})(z,\omega) + h(z,\omega), \quad (z,\omega) \in \Gamma^-, \quad (15)$$

где

$$f|_{\Gamma^\pm}(z,\omega) = f(z \mp 0\omega, \omega), \quad (z,\omega) \in \Gamma^\pm,$$
$$f(z \mp 0\omega, \omega) = \lim_{\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0} f(z \mp \varepsilon\omega, \omega).$$

Символом $\widehat{B}$ обозначен некоторый оператор сопряжения, позволяющий моделировать эффекты возникающие при переходе потока излучения через границу раздела материалов. Функцию h можно интерпретировать, как плотность поверхностных источников излучения.

В §1 приводятся некоторые известные факты о решении краевой задачи (12),(15). Также, приводится пример неединственности решения задачи.

В §2 рассматривается пример условий сопряжения, позволяющих моделировать эффекты преломления и отражения по законам Френеля. Данный оператор имеет вид

$$(\widehat{B}f|_{\Gamma^+})(z,\omega) = R(z,\nu) f|_{\Gamma^+}(z,\omega_R) + \\ + T(z,\nu) f|_{\Gamma^+}(z,\omega_T), \quad (z,\omega) \in \Gamma^- \cap (\gamma \times \Omega), \quad (16)$$

$$(\widehat{B}f|_{\Gamma^+})(z,\omega) = 0, \quad (z,\omega) \in \Gamma^- \cap (\partial\overline{G} \times \Omega), \quad (17)$$

где

$$\omega_R = \omega - 2\nu n, \quad (18)$$

$$\omega_T = \psi(\nu) n + \widetilde{k}(\nu)(\omega - \nu n), \quad (19)$$

Здесь $n = n(z)$ - единичный вектор нормали в точке z, величина $\nu = \omega \cdot n$. Коэффициенты $R(z,\nu), T(z,\nu)$ имеют вид аналогичный (6).

Третий параграф посвящен описанию численного метода решения прямой задачи. Приведенный метод является некоторой модификацией метода Монте-Карло, называемого методом сопряженных блужданий.

Изучение рассматриваемого метода продолжается далее в §4, где приводится одно из приложений краевой задачи. Этот параграф посвящен визуализации трехмерных объектов методами теории переноса излучения. Сама задача при этом состоит в следующем: зафиксируем некоторое направление $\omega_0 \in \Omega$ и пусть Π некоторая плоскость, такая что $\Pi_G = \Pi \cap G \neq \emptyset$.

Задачу нахождения $f(r,\omega_0)$ для всех $r \in \Pi_G$ из уравнения (12) и условий (15), при известных μ, μ_s, g, J, h, k назовем задачей визуализации.

Рассматриваемый подход отличается от большинства работ по визуализации трехмерных объектов тем, что позволяет, естественным образом, учитывать, как эффекты преломления-отражения, так и эффекты многократного рассеяния.

Пятый параграф посвящен рассмотрению задач о маскирующих покрытиях. Суть этих задач состоит в следующем. Пусть среда G содержит некоторое включение G_1. Это включение покрывается некоторой пленкой, коэффициент преломления, которой выбирается из условия минимизации влияния включения G_1 на выходящее из среды G излучение. Для решения подобных задач используется численный метод. Предлагаемый метод не претендует на оригинальность и вряд ли является экономичным. Основная цель данного параграфа показать принципиальную возможность решения новой оптимизационной задачи.

В **четвертой главе** диссертации рассматривается уравнение переноса с энергетической зависимостью. Предполагается, что среди видов взаимодействия излучения с веществом преобладает некогерентное Комптоновское рассеяние.

Пусть процесс переноса излучения рассматривается внутри некоторой выпуклой ограниченной области G в трехмерном евклидовом пространстве E^3. Введем следующие обозначения: $r \in G$ – точка в E^3, ω', ω – направление движения фотона до и после рассеяния, $\omega',\ \omega \in \Omega = \{\omega \in E^3 : |\omega| = 1\}$. α', α – энергия фотона до и после рассеяния. $\alpha',\ \alpha \in I = [\underline{\alpha}, \overline{\alpha}];\ 0 < \underline{\alpha} < \overline{\alpha} < \infty$. Будем считать, что в процессе взаимодействия излучения с веществом, фотоны могут рассеиваться только по закону Комптона. Это предположение приводит к тому, что при переходе, в результате рассеяния, фотона с характеристиками (ω, α) в фотон с характеристиками (ω', α') эти переменные связаны соотношением Комптона:

$$\alpha' = g(\omega, \omega', \alpha),\ g(\omega, \omega', \alpha) = \frac{\alpha}{1 + \alpha(\omega \cdot \omega' - 1)}, \tag{20}$$

где $\omega \cdot \omega'$ означает скалярное произведение векторов ω и ω', а переменная ω' принадлежит подмножеству единичной сферы $\Omega_{\omega,\alpha} = \{\omega' : \omega' \in \Omega,\ \omega \cdot \omega' \geq 1 - 1/\alpha + 1/\overline{\alpha}\}$ и верны неравенства: $\alpha \leq g(\omega, \omega', \alpha) \leq \overline{\alpha}$. В качестве математической модели указанного процесса выбирается стационарное уравнение переноса, имеющее вид

$$\omega \cdot \nabla_r f(r,\omega,\alpha) + \mu(r,\alpha) f(r,\omega,\alpha) = \\ = \int\limits_{\Omega_{\omega,\alpha}} k(r,\omega,\omega',\alpha) f(r,\omega',g(\omega,\omega',\alpha))d\omega' + J(r,\omega,\alpha), \quad (21)$$

Здесь $f(r,\omega,\alpha)$ — плотность излучения в точке $r \in G$, распространяющегося в направлении $\omega \in \Omega$ и имеющего энергию $\alpha \in I$; $\mu(r,\alpha)$ — коэффициент полного взаимодействия излучения со средой в точке r при энергии α; $k(r,\omega,\omega',\alpha)$ — индикатриса рассеяния; $J(r,\omega,\alpha)$ — плотность внутренних источников излучения.

Введем, также, ряд дополнительных обозначений, которые потребуются нам в дальнейшем при формулировке рассматриваемых задач. Обозначим через $L_{r,w} = \{r + \omega t, t \geq 0\}$ луч, исходящий из точки r в направлении ω, $d(r,\omega) = mes_1\{L_{r,\omega} \cap G\}-$ расстояние от точки r до границы области G в направлении ω. Здесь символом mes_1 обозначена мера Лебега на прямой. Введем в рассмотрение множества $\Gamma^{\pm}_{\omega} = \{r \in \partial G : L_{r,\mp\omega} \cap G \neq \emptyset\}$. В точках множества Γ^{-}_{ω} (Γ^{+}_{ω}) излучение в направлении ω входит в G (выходит из G). Обозначим через $\Gamma^{\pm} = \{(r,\omega,\alpha) \in \partial G \times \Omega \times I : r \in \Gamma^{\pm}_{\omega}\}$. Добавим к уравнению (21) следующее граничное условие

$$f(\xi,\omega,\alpha) = h(\xi,\omega,\alpha), \quad (\xi,\omega,\alpha) \in \Gamma^{-}. \quad (22)$$

Функция h интерпретируется как плотность потока излучения входящего в G.

В первом параграфе приводятся основные сведения о комптоновском рассеянии и дается обзор физических понятий.

Второй параграф содержит некоторые известные факты об уравнении переноса излучения в случае чисто комптоновского рассеяния. Рассматриваются вопросы существования и единственности решения прямой задачи (21),(22), заключающейся в нахождении неизвестной функции $f(r,\omega,\alpha)$, при известных h, μ, k, J.

В третьем параграфе рассматривается метод решения прямой задачи, когда основная зависимость в индикатрисе рассеяния определяет дифференциальным (по угловой переменной) сечением Кляйна-Нишины-Тамма. Проводятся численные эксперименты отражающие специфику комптоновского рассеяния, а также, приводится некоторое обоснование того, что в рассматриваемой задаче учитывается только комптоновское рассеяние.

Четвертый параграф посвящен вопросу применимости индикатора неоднородности, который был введен в работах Д.С. Аниконова, в задаче нахождения внутренний структуры неизвестной среды, для случая комптоновского рассеяния. Индикатор неоднородности представляет собой интегро-дифференциальный оператор, который переводит функцию заданную на множестве Γ^+ в функцию определенную на множестве G. Итоговая функция, при этом, имеет особенности при приближении переменной r к поверхностям разрыва коэффициентов уравнения переноса. Данные поверхности трактуются как границы раздела материалов входящих в состав многокомпонентной среды G. Строгого обоснования применимости индикатора в случае присутствия в среде комптоновского рассеяния пока что нет. Теоретическое обоснование проведено лишь для моноэнергетического уравнения переноса. Численно проверяется следующая гипотеза.

Гипотеза. *Индикатор неоднородности может быть использован при нахождении внутренней структуры неоднородной среды для достаточно широкого диапазона энергий, включающего в себя область сильного комптоновского рассеяния.*

Для проверки этого предположения проведен ряд численных экспериментов. Некоторые из полученных при этом результатов приводятся в диссертации в графической форме. Результаты соответствующих численных расчетов являются обнадеживающими и указывают на целесообразность дальнейших теоретических исследований в этом направлении.

При тестировании индикатора неоднородности, рассматривается условие "плохой видимости", заключающееся в совпадении двойственных коэффициентов поглощения на границе контакта соседних материалов. Данное условие является прямым обобщением условия введенного в работах Д.С.Аниконова. Изучается влияние условия "плохой видимости" на качество реконструкции внутренний структуры неизвестной среды.

В пятом параграфе продолжается исследование условия "плохой видимости". Показывается, что значения двойственного коэффициента поглощения сильно зависят не только от материалов среды, но и от распределения внешних источников излучения. В то же время, хотелось бы иметь условие, которое в меньшей степени зависело бы от источника, и давало некоторую информацию о различимости границы контакта основываясь лишь на характеристиках облучаемых материалов. В качестве такой характеристики предлагается использовать коэффициент поглощения и аппроксимировать условие "плохой видимости", заключающееся в совпадении двойственных коэффициентов поглощения на границе контакта соседних материалов, условием совпадения коэффициентов поглощения. С этой целью производится сравнение указанных величин, для выяснения на сколько такая аппроксимация обоснована. Результатом параграфа является вывод о том, что для диапазона энергий от 1 кэВ до 50 кэВ такая аппроксимация дает хорошие результаты. Подробно разбирается структура двойственного коэффициента поглощения, в случае преобладания в среде трех основных эффектов — фотоэлектрического поглощения, Рэлеевского рассеяния и Комптон-эффекта. Данный вопрос изучался Д.С. Коноваловой, В.Г. Назаровым в случае, когда электроны в среде считались свободными. Однако, в реальных веществах данное условие, как правило, не выполняется из-за связи электронов в атомах. В диссертации, влияние связи электронов в атоме вещества учитывается при помощи введения специальной поправочной функции — $S(x, Z)$, называемой функцией некогерентного рассеяния . Физический смысл функции $S(x, Z)$ можно объяснить следующим образом: она описывает количество электронов в атоме, которые могут рассматриваться, как свободные, при заданной энергии и рассеянии на заданный угол. Полученные результаты сравниваются с результатами, полученными ранее.

Шестой параграф посвящен описанию базы данных пар веществ, плохо-видимых при их рентгенодиагностике. Математическая идея создания базы данных основывается на результатах предыдущего параграфа. База данных содержит информацию об уровнях энергии, на которых различимость границы контакта, для двух заданных веществ, будет проблематичной. Основной целевой аудиторией базы данных являются специалисты в области теории переноса излучения и рентгеновской томографии. Отличием настоящей базы данных от ранее созданных является то, что приведенная здесь информация касается в первую очередь не столько отдельно взятых веществ самих по себе, сколько пар веществ, находящихся в непосредственном контакте. Подобная постановка вопроса вызвана проблемой определения внутренней структуры неоднородных сред методами рентгеновской томографии. В промышленности эта проблема связана с необходимостью проведения неразрушающего контроля качества ответственных узлов и агрегатов машин, в медицине – с изучением пораженных органов и тканей. База данных содержит данные о плоховидимых парах для 100 химических элементов и 219 сложных веществ, представляющих интерес в рентгенодиагностике. База данных ориентирована на использование в сети Интернет и доступна по адресу $\underline{http://sxray.iam.dvo.ru/}$.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Исследована разрешимость краевой задачи для уравнения переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на границах раздела материалов в плоскопараллельном случае. Проверено выполнение условий теорем существования и единственности решения для оператора сопряжения, моделирующего преломление и отражение по законам Френеля.

2. Предложен метод нахождения показателей преломления компонент многослойной системы по известному потоку выходящего из среды излучения.

3.Разработан алгоритм решения прямой задачи для уравнения переноса с обобщенными условиями сопряжения в трехмерном случае. С помощью этого алгоритма решена экстремальная задача.

4. Численно подтверждена гипотеза о работоспособности метода определения поверхностей разрыва коэффициентов переноса излучения, основанного на индикаторе неоднородности в области сильного Комптоновского рассеяния.

5. Создана база данных пар веществ, плоховидимых при их рентгенодиагностике.

ОПУБЛИКОВАННЫЕ РАБОТЫ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Прохоров И.В., Яровенко И.П.* О комптоновском рассеянии в теории переноса. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2000. С. 94-95.

2. *Яровенко И.П.* Уравнение переноса с сечением Клайна-Нишины в интеграле столкновений. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2001. С. 73-74.

3. *Яровенко И.П.* О разрешимости краевой задачи для уравнения переноса гамма-квантов // Материалы научной конференции студентов и аспирантов ДВГУ. Россия, Владивосток 2001. С. 100-102

4. *Яровенко И.П.* Уравнение переноса в слоистой среде с обобщенными условиями сопряжения на границах раздела материалов. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2002. С. 67-68.

5. *Яровенко И.П.* О моделировании распространения электромагнитного излучения в слоистой среде. // 6-я дальневосточная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по математическому моделированию. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2002 С. 51-53.

6. *Прохоров И.В., Яровенко И.П.* Краевая задача теории переноса в многослойной среде с обобщенными условиями сопряжения. // Сибирский журнал индустриальной математики. 2003. Т. 6. № 1. С. 93-107.

7. *Яровенко И.П.* О непрерывности решения уравнения переноса с обобщенными условиями сопряжения в плоском слое. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2003. С. 103-105.

8. *Яровенко И.П.* Метод Монте-Карло для уравнения переноса с обобщенными условиями сопряжения. // 7-я дальневосточная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по математическому моделированию. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2003. С. 34-35.

9. *Яровенко И.П.* Экстремальная задача для уравнения переноса с обобщенными условиями сопряжения в центрально-симметричной области. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 2004. С. 93-94.

10. *Яровенко И.П.* Численные эксперименты в теории переноса гамма-квантов // 8-я дальневосточная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по математическому моделированию. Тезисы докладов. Россия, Владивосток, 22-24 ноября 2004. С. 25-26.

11. *Яровенко И.П.* Создание базы данных пар веществ трудно различимых в рентгеновской томографии // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Хабаровск 2005г. С. 126-127.

12. *Красникова Т.В., Яровенко И.П.* Непрерывные свойства решения уравнения переноса излучения в слоистой среде // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Хабаровск 2005г. С. 87-88.

13. *Prokhorov I.V., Krashikova T.V., Yarovenko I.P.* An extremum problem for the radiation transfer equation. // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 2005. Vol. 13. № 4. pp. 365-382.

14. *Назаров В.Г., Солнышко Н.В., Яровенко И.П.* Численные эксперименты в теории переноса излучения с учетом комптоновского рассеяния.// Сибирский журнал индустриальной математики. 2005. Т. 8. № 2 (22) С. 135-143.

15. *Прохоров И.В, Яровенко И.П.* Численное решение дифракционных задач для уравнения переноса излучения // Сиб. электронные мат. известия. 2005. Т. 2. С. 88-101.

16. *Яровенко И.П.* Численное решение краевых задач для уравнения переноса излучения в оптическом диапазоне. // Вычислительные методы и программирование. 2006. Т. 7. С. 93-104.

17. *Яровенко И.П.* Задача оптической диагностики в слоистой среде. // ДВ мат. школа-семинар имени академика Е.В. Золотова. Тезисы докладов. Россия, Владивосток 2006г. С. 105-106.

18. *Прохоров И.В, Яровенко И.П.* Исследование задач оптической томографии методами теории переноса излучения. // Оптика и спектроскопия, 2006, Т. 101, № 5, С. 817-824.

Личный вклад автора. Результаты, составляющие основное содержание диссертации, получены автором самостоятельно. В работах, выполненных в соавторстве, автору принадлежат следующие результаты: в работе [6] получена основная оценка обеспечивающая единственность решения краевой задачи и проверено выполнение условий теорем существования и единственности решения для оператора сопряжения, моделирующего преломление и отражение по законам Френеля. В работах [12,13] исследована разрешимость прямой задачи для уравнения переноса с обобщенными условиями сопряжения в классе кусочно-непрерывных функция. В работе [14] разработан метод решения прямой задачи для уравнения переноса излучения с учетом комптоновского рассеяния и проведены численные эксперименты, в работе [15] разработан алгоритм решения прямой задачи для уравнения переноса излучения с учетом преломления и отражения по законам Френеля, проведены численные эксперименты по визуализации трехмерных объектов. В работе [18] автором исследована задача определения показателей преломления по данным о выходящем из среды излучении и проведено тестирование алгоритма на модельных данных.

Яровенко Иван Петрович

Математическое моделирование
процесса переноса излучения в широком диапазоне
энергий с приложениями к задачам оптической и рентгеновской томографии

Автореферат

Подписано к печати 09.01.2007 г.	Усл. п. л. 1.2.	Уч-изд. л. 1.0.
Формат 60x84/16.	Тираж 100.	Заказ 1.

Издано ИПМ ДВО РАН. г. Владивосток, Радио 7.

Отпечатано участком оперативной печати ИАПУ ДВО РАН.

г. Владивосток, Радио, 5