

Численное решение нестандартного интегрального уравнения коллимационной задачи рентгеновского изотропного рассеяния излучения

В.С. Сизиков*

* СПбГУ ИТМО,
 Кронверкский пр., 49,
 197101 Санкт-Петербург, Россия
 E-mail: sizikov2000@mail.ru

Работа автора была поддержана РФФИ (грант 05-08-01304),

1. Для повышения светосилы установки для изучения рассеяния рентгеновских лучей на образце часто используют щелевые коллиматоры и детекторы (см. рисунок), что в отличие от точечных источников и приемников приводит к искажению ("размытию") кривой рассеяния [1–5]. Чтобы восстановить истинное угловое распределение интенсивности рентгеновского рассеяния J , которое было бы при точечном источнике и приемнике, нужно произвести коллимационный пересчет экспериментальной ("размытой") интенсивности I [1, 3, 5, 6]. Рассмотрим одномерную постановку данной задачи, когда образец обладает изотропными свойствами. В этом случае обозначим через $J(\theta)$ "истинную", неискаженную интенсивность (индикатрису) рассеяния рентгеновских лучей. Здесь θ — угол рассеяния. Полагаем, что $\theta \ll 1$ (рассматривается малоугловое рентгеновское рассеяние).

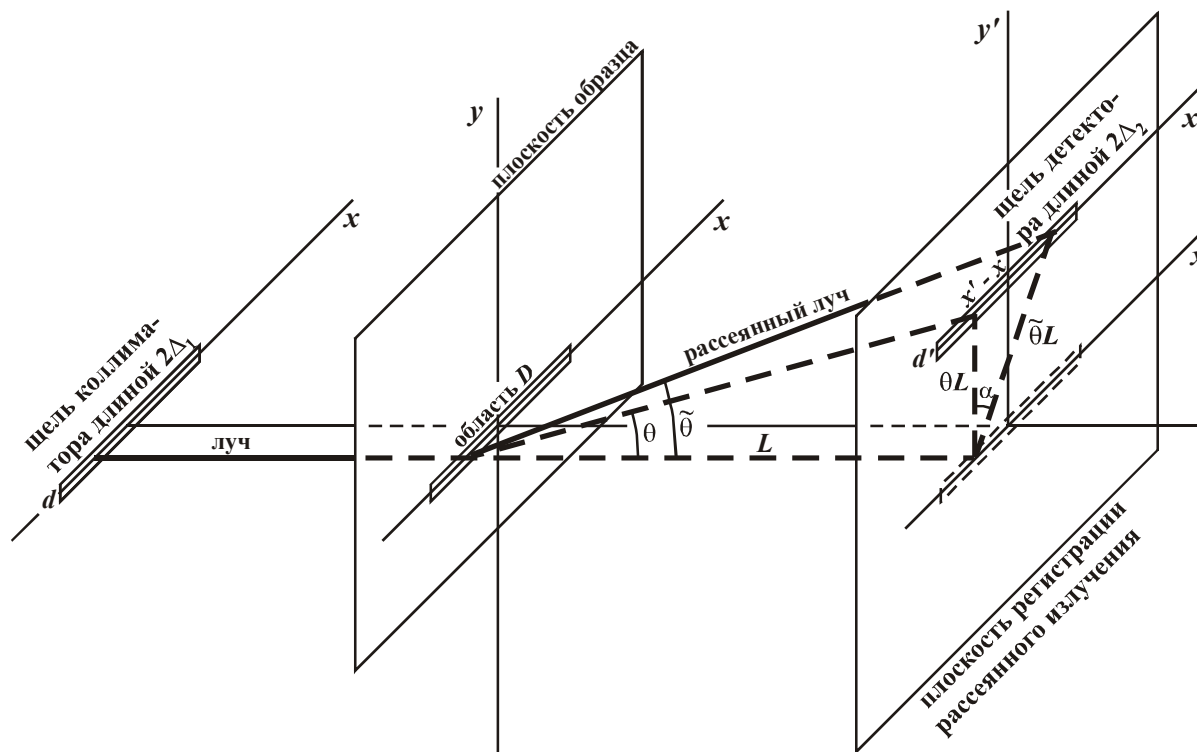


Рисунок. Схема хода лучей в рентгеновской камере

Пусть D — область (прямоугольник) рассеяния на образце, L — расстояние от образца до плоскости регистрации, d — ширина щели коллиматора, d' — ширина щели детектора, $g(x)$ — распределение интенсивности вдоль щели коллиматора, $u(x')$ — распределение чувствительности вдоль щели детектора. Тогда суммарная интенсивность, регистрируемая всей щелью детектора при некотором угле θ при $d = d'$, равна

$$I(\theta) = \left(\frac{d}{L} \right) \int_{-\Delta_1}^{\Delta_1} \left[\int_{-\Delta_2}^{\Delta_2} J(\tilde{\theta}) u(x') dx' \right] g(x) dx, \quad (1)$$

где $\tilde{\theta}$ — угол рассеяния от элемента dx области D в элемент dx' щели детектора.

Если распределения $g(x)$ и $u(x')$ равномерные, т.е. $g(x) = \text{const}$ и $u(x') = \text{const}$, то соотношение (1) можно преобразовать к виду [5, 6]:

$$2 \int_a^b \frac{\tilde{\theta}}{\sqrt{\tilde{\theta}^2 - \theta^2}} J(\tilde{\theta}) d\tilde{\theta} = I(\theta), \quad a \leq \theta \leq b, \quad (2)$$

где $a = \theta_{\min} = \tilde{\theta}_{\min} \geq 0$, $b = \theta_{\max} = \tilde{\theta}_{\max} > a$.

2. Уравнение (2) — сингулярное интегральное уравнение Абеля [7, с. 107], [8, с. 97]. Оно, как известно, имеет аналитическое решение [5, 6], [8, с. 98], [9]:

$$J(\tilde{\theta}) = -\frac{1}{\pi} \int_a^b \frac{I'(\theta)}{\sqrt{\theta^2 - \tilde{\theta}^2}} d\theta, \quad a \leq \tilde{\theta} \leq b. \quad (3)$$

Однако в (3) входит производная $I'(\theta)$ от экспериментальной, а значит, зашумленной функции $I(\theta)$, а интеграл в (3) является сингулярным, что создает определенные трудности при решении. Сингулярности в (3) можно избежать, если выполнить интегрирование по частям. В этом случае [5], [6], [8, с. 99]

$$J(\tilde{\theta}) = \frac{1}{\pi} \int_a^b \sqrt{\theta^2 - \tilde{\theta}^2} \frac{d}{d\theta} \left[\frac{1}{\theta} \frac{dI(\theta)}{d\theta} \right] d\theta, \quad a \leq \tilde{\theta} \leq b. \quad (4)$$

Однако решение (4) требует двукратного численного дифференцирования функции $I(\theta)$. В работе [9] предложен метод численного решения уравнения (2) и метод численного вычисления сингулярного интеграла в (3) на основе использования обобщенных квадратурных формул.

В настоящей работе (как и в работе [5]) предлагается решать не уравнение (2), а другое, преобразованное, уравнение.

3. Введем новую переменную интегрирования $\alpha = \sqrt{\tilde{\theta}^2 - \theta^2}$. Тогда (2) преобразуется в уравнение:

$$2 \int_0^{\sqrt{b^2 - \theta^2}} J(\sqrt{\theta^2 + \alpha^2}) d\alpha = I(\theta), \quad a \leq \theta \leq b. \quad (5)$$

Соотношение (5) является *интегральным уравнением I рода типа Вольтерра, записанным в нестандартной форме*, поскольку в нем нет ядра в явном виде, искомая функция J зависит не от одного аргумента, а от комбинации аргументов $\sqrt{\theta^2 + \alpha^2}$ и верхний предел интегрирования является некоторой функцией θ . Теория и методы решения подобных уравнений разработаны недостаточно подробно. Можно лишь отметить работы физического характера [1, 3] и работы [5, 6] математической направленности.

4. Предлагается для решения уравнения (5) *метод итераций* [5, 6]. Подынтегральная функция в (5) симметрична по θ и α . Интегральный оператор как вольтерровский оператор является положительно определенным [7]. Поэтому в качестве итерационной схемы можно выбрать *метод итеративной регуляризации Фридмана* (ср. [5, 6], [7, с. 272]):

$$\left. \begin{aligned} J_0(\theta) &= 0, \\ J_k(\theta) &= J_{k-1}(\theta) + v \left[I(\theta) - 2 \int_0^{\sqrt{b^2 - \theta^2}} J_{k-1}(\sqrt{\theta^2 + \alpha^2}) d\alpha \right], \quad a \leq \theta \leq b, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где $k = 1, 2, 3, \dots$ — номер итерации, а множитель v определяется неравенством: $0 < v < 2/\|A\|$. Здесь $\|A\|$ — норма интегрального оператора в (5). Оценим $\|A\|$ следующим образом:

$$\|A\| = \left\{ \int_a^b \left[\int_a^b 2 \left| \frac{\tilde{\theta}}{\sqrt{\tilde{\theta}^2 - \theta^2}} \right| d\tilde{\theta} \right] d\theta \right\}^{1/2} = \left\{ 2 \int_a^b \sqrt{b^2 - \theta^2} d\theta \right\}^{1/2} = \left\{ b^2 \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{a}{b} \right) - a \sqrt{b^2 - a^2} \right\}^{1/2}. \quad (7)$$

Обычно $a \ll b$ или даже $a = 0$. В этом случае $\|A\| = b\sqrt{\pi/2} > b$. Поэтому

$$0 < v < 2/b. \quad (8)$$

Доказано [7, с. 272], что процесс итераций (6) сходится к точному решению в случае измерения интенсивности $I(\theta)$ без погрешности. Если же функция $I(\theta)$ имеет погрешности, то процесс (6), хотя и незначительно, но расходится из-за слабой некорректности задачи решения уравнений (2), (5). В этом случае для выбора числа итераций можно воспользоваться *правилом останова по невязке* [7, с. 273], в котором число итераций согласуется с погрешностью измерений функции I . Однако для уравнений типа (5) эффект расходимости невелик (как показало решение численных примеров [5]), а именно, лишь при числе итераций порядка 10^2 начинает наблюдаться процесс расходимости. Поэтому практически достаточно выполнить 50—100 итераций, не используя правило останова по невязке. Можно для выбора числа итераций использовать также *правило останова по поправке* [7, с. 274].

5. Для построения численного алгоритма реализации схемы (6) введем равномерную сетку узлов по θ :

$$\theta_i = a + h \cdot i, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (8)$$

где $h = \Delta\theta = \text{const} = (b - a)/n$ — шаг дискретизации, n — число шагов. Интеграл в (6) заменяем конечной суммой по формуле трапеций на сетке узлов по α : $\alpha_j = h \cdot j$, $j = 0, \dots, \lfloor \sqrt{b^2 - \theta_i^2} / h \rfloor$. При этом значение $\sqrt{\theta^2 + \alpha^2}$, не попадающее в узел дискретизации, заменяем на $\lceil \sqrt{\theta^2 + \alpha^2} \rceil$ — значение ближайшего узла сетки (8). В результате схема (6) в дискретном виде запишется как

$$\left. \begin{aligned} J_0(\theta_i) &= 0; \\ J_k(\theta_i) &= J_{k-1}(\theta_i) + v \left\{ I(\theta_i) - 2h \sum_{j=0}^{\lfloor \sqrt{b^2 - \theta_i^2} / h \rfloor} p_j J_{k-1}(\lceil \sqrt{\theta_i^2 + \alpha_j^2} \rceil) \right\}; \\ k &= 1, 2, 3, \dots; \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad p_j = \begin{cases} 0.5, & \text{если } j = 0 \text{ или } j = \lfloor \sqrt{b^2 - \theta_i^2} / h \rfloor, \\ 1, & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

6. Выполнено решение ряда численных примеров (модельных и натуральных).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Guinier A., Fournet G.** Small-angle scattering of X-rays. NY: Wiley, 1955.
2. **Федоров Б.А.** Учет коллимационных искажений при малоугловом рассеянии рентгеновых лучей. Поправка на высоту щелей // Кристаллография. 1968. Т. 13, № 5. С. 763–769.
3. **Schelten J., Hossfeld F.** Application of spline functions to the correction of resolution errors in small-angle scattering // J. Appl. Cryst. 1971. Vol. 4. P. 210–223.
4. **Мельничук А.П., Прищепенко О.Б., Смирнов А.В., Федоров Б.А.** Прецизионная юстировка камеры Краткого и программа первичной обработки данных рентгеновского малоуглового рассеяния // Изв. вузов. Приборостроение. 2002. Т. 45, № 7. С. 48–54.
5. **Сизиков В.С., Смирнов А.В., Федоров Б.А.** Решение одномерной коллимационной задачи оценки рентгеновского изотропного рассеяния излучения методом итераций // Изв. вузов. Приборостроение. 2005. Т. 48, № 10. С. 44–52.
6. **Захаров Д.Д., Сизиков В.С., Смирнов А.В., Федоров Б.А.** Решение двухмерной коллимационной задачи рассеяния рентгеновских лучей с использованием нестандартных интегральных уравнений // Научно-техн. Вестник ИТМО. 2006. Вып. 32. С. 144–153.
7. **Верлань А.Ф., Сизиков В.С.** Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наук. думка, 1986.
8. **Сизиков В.С.** Математические методы обработки результатов измерений. СПб: Политехника, 2001.
9. **Сизиков В.С., Смирнов А.В., Федоров Б.А.** Численное решение сингулярного интегрального уравнения Абеля обобщенным методом квадратур // Изв. вузов. Математика. 2004. № 8(507). С. 62–70.