

# ВЕСОВЫЕ ОЦЕНКИ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ОПТИКИ МУТНЫХ СРЕД

А. В. Лаппа, А. Е. Анчугова

*Челябинский государственный университет, 454001, Челябинск*

УДК 519.245

В рамках кинетической модели в работе записаны прямое и сопряженное интегральные представления для линейных характеристик поля оптического излучения в гетерогенной мутной среде, корректно учитывающие особенности распространения света в веществе, в частности его отражение и преломление на поверхностях разрыва показателя преломления. Эти представления имеют существенные отличия от их аналогов в задачах переноса ионизирующих излучений, что не позволяет напрямую применять разработанные для этих задач методы. На основе записанных представлений в работе получен ряд новых Монте — Карловских оценок весового типа для вычисления указанных линейных характеристик, и сформулированы условия несмещенности оценок. Разработаны алгоритмы для решения обратных задач оптики мутных сред, и эти алгоритмы применены к одной из центральных задач биомедицинской оптики: неразрушающему определению оптических параметров биологических тканей, исходя из измерений характеристик отраженного излучения. Алгоритмы, в частности, позволяют с высокой точностью, одновременно для большого набора сред с различными оптическими параметрами рассчитывать радиационные характеристики и их производные по этим параметрам.

**Ключевые слова:** метод Монте — Карло, весовые оценки, перенос излучения, мутная среда, оптическое излучение, свет, оптические параметры, обратная задача, кинетическая модель.

## Введение

Настоящая работа стимулирована задачами биомедицинской оптики [1], и именно их мы, прежде всего, имели в виду при разработке алгоритмов. Но область приложений результатов работы — шире. Кратко, объект приложений можно определить как свет в мутных средах в кинетической модели. Свет здесь и далее трактуется расширительно, как оптическое излучение, включающее излучения ультрафиолетового, видимого и инфракрасного диапазонов. Мутная среда может быть конденсированной (биологические ткани, эмульсии, суспензии, порошки, непрозрачные диэлектрики) и газообразной (турбулентная атмосфера, дым, пыль, туман, аэрозоль), но, в первую очередь, работа ориентирована на более сложный случай: конденсированные и гетерогенные мутные среды. Кинетическую модель мы трактуем в духе физической кинетики: как описание систем частиц и излучений в веществе посредством одночастичных функций распределения в фазовом пространстве и кинетических уравнений переноса излучений для этих функций. Модель, как известно, с большим успехом применяется для нейтронов и других ионизирующих излучений. Достаточно широко и успешно она применяется и для света в мутной среде, хотя ее адекватность здесь, вообще говоря, меньше.

Благодаря известной вероятностной интерпретации модели, в оптических приложениях, как и в «ионизирующих», получил распространение метод Монте — Карло. В основном, используются аналоговые алгоритмы, т.е. простая статистическая реализация исходной (физической) вероятностной модели. Предложены и неаналоговые алгоритмы (неплохой их обзор представлен в [2]), но все они (по крайней мере для конденсированных сред) получены (физиками) эвристически, посредством физических рассуждений «на пальцах» (точнее, на частицах) без существенного использования формул и уравнений. Как следствие, алгоритмы слабо обоснованы, условия их применимости не ясны, и они составляют лишь малую (не самую лучшую) часть из возможных неаналоговых алгоритмов.

Главная причина этому — недостаточная развитость математического описания кинетической модели для света в конденсированных средах. В этой работе мы, на основе сопряженного интегрального уравнения



переноса излучений, формулируем замкнутую математическую модель для разнообразных линейных характеристик световых полей в гетерогенных мутных средах, облучаемых произвольными источниками. Предлагаем ряд новых Монте — Карловских оценок весового типа для вычисления этих характеристик. Применяем оценки для решения обратных задач оптики мутных сред, в частности для неразрушающего определения оптических параметров биологических тканей, исходя из измерений характеристик отраженного излучения.

## 1 Модель

Мы ограничиваемся приложениями, в которых свет в среде можно считать некогерентным и неполяризованным. Первое допущение необходимо для применения кинетической модели, второе — позволяет обойтись скалярной функцией распределения для описания поля излучения. В качестве таковой в оптике используется лучевая (дифференциальная) интенсивность  $I = I(x, t)$  с фазовыми координатами  $x = (\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega})$ , описывающими положение точки в пространстве  $\mathbb{R}^3$ , направление лучей на единичной сфере  $O \subset \mathbb{R}^3$  и частоту света (или его длину волны в вакууме) в рассматриваемом спектральном диапазоне  $\Lambda \subset (0, \infty)$ .

Область приложений данной работы составляют задачи о вычислении различных линейных характеристик стационарного светового поля в заданной мутной среде (далее просто среде). Условимся о следующем. Область  $\bar{G} \subset \mathbb{R}^3$ , занимаемая средой, — ограничена, замкнута, односвязна и невогнута. Среда погружена в другую мутную среду (окружение), занимающую все остальное пространство. Среда может быть гетерогенной, т.е. область  $\bar{G}$  состоит из одной или нескольких попарно непересекающихся открытых зон  $G_1, G_2, \dots, G_m$  и кусочно-гладкой границы  $\Gamma$ , состоящей из внутренней границы  $\gamma$  (между зонами) и внешней границы  $\Gamma_0$  между средой и окружением. Внутри окружения границ нет. В каждой из зон оптические характеристики (введены ниже) непрерывны по  $\mathbf{r}$  и могут иметь конечные скачки на границах. Показатель преломления внутри зоны — постоянен (чтобы свободные пробеги были прямолинейными, и уравнение переноса имело обычный вид).

Скачки показателя преломления вызывают отражение и преломление света, что приводит к разрывам поля на границе, т.е. неравенству правого и левого пределов интенсивности на  $\Gamma$ :

$$I_{\pm}(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega}) = I(\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{0}, \nu, \mathbf{\Omega}) \equiv \lim_{\varepsilon \downarrow 0} I(\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega}\varepsilon, \nu, \mathbf{\Omega}).$$

Естественно назвать  $I_-$  входной, а  $I_+$  — выходной интенсивностями, поскольку первая описывает падающий на границу свет, а вторая — покидающий ее.  $I_{\pm}$  определены для всех  $\mathbf{r} \in \Gamma, \nu \in \Lambda$  и для  $\mathbf{\Omega} \in O_{\mathbf{r}}^{\pm} \equiv \{\mathbf{\Omega} : \mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{0} \notin \Gamma\}$ , т.е. для  $\mathbf{\Omega}$  таких, что лучи, выходящие из  $\mathbf{r}$  в направлении  $\pm \mathbf{\Omega}$  сразу же покидают  $\Gamma$ . Более строго:  $O_{\mathbf{r}}^{\pm} = \{\mathbf{\Omega} : \exists \varepsilon_{\mathbf{\Omega}} > 0 \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_{\mathbf{\Omega}}) (\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega}\varepsilon \notin \Gamma)\}$ . Если граница в точке  $\mathbf{r}$  криволинейна по всем направлениям, то  $O_{\mathbf{r}}^{\pm} = O$ .

Далее используются обозначения:  $x = (\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega}) = (y, \mathbf{\Omega}), y = (\mathbf{r}, \nu), dx = d\mathbf{r} d\nu d\mathbf{\Omega} = dy d\mathbf{\Omega}, G = G_1 + \dots + G_m, Y = (G + G_0) \times \Lambda, X = Y \times O, X_G = G \times \Lambda \times O, X_0 = G_0 \times \Lambda \times O, X_{\pm} = \{x : \mathbf{r} \in \Gamma, \nu \in \Lambda, \mathbf{\Omega} \in O_{\mathbf{r}}^{\pm}\}, \mathbf{n}_{\mathbf{r}}$  — (кусочно-непрерывная) нормаль, определенная в каждой точке  $\mathbf{r} \in \Gamma$ , направленная в сторону зоны с меньшим номером (т.е. на  $\Gamma_0$  нормаль — внешняя),

$$(a, b) \equiv \int_{X_G} a(x)b(x)dx, \quad [a, b]_{\pm} \equiv \int_{\Gamma} d\Gamma \int_{O_{\mathbf{r}}^{\pm}} d\mathbf{\Omega} |\mathbf{\Omega} \mathbf{n}_{\mathbf{r}}| \int_{\Lambda} d\nu a(x)b(x).$$

Практически все интересные для приложений линейные характеристики поля в среде могут быть представлены в виде следующего линейного функционала от интенсивности:

$$Q = (I, q) + [I_-, g_-]_- + [I_+, g_+]_+, \quad (1)$$

где  $q, g_-, g_+$  — заданные функции на  $X_G, X_-, X_+$ , соответственно, определяющие вид характеристики. В этом виде могут быть представлены показания многих (линейных) детекторов излучения, и поэтому, следуя терминологии теории переноса излучений, будем интерпретировать функционал (1) как показание некоторого, не обязательно реального, детектора с заданными функциями отклика. Этот детектор состоит из трех компонентов: объемного и двух граничных, входного и выходного. Показание первого формируются светом внутри среды, второго и третьего — светом, падающим на границу и покидающим ее. Если часть границы  $\Gamma$ , где действуют граничные детекторы, свободна от поверхностных источников (детектирующая граница не излучает), то трехкомпонентный детектор сводится к двухкомпонентному с показанием:



$$Q = (I, q) + [I_-, g]_-, \quad (2)$$

которое мы будем рассматривать далее как исходное. «Эффективная» граничная функция отклика  $g$  выражается через заданные посредством (определенного ниже в (8)) сопряженного оператора «отражения-преломления»:  $g = g_- + \mathbf{P}_+ g_+$ .

Будем считать, что поле излучения в системе может создаваться объемными источниками внутри среды, с заданной фазовой плотностью мощности  $s = s(x)$ ,  $x \in X_G$ , и поверхностными источниками, с заданными входной и выходной интенсивностями:  $i_- = i_-(x)$ ,  $x \in X_-$ ,  $i_+ = i_+(x)$ ,  $x \in X_+$ . Последние, как и отражение и преломление, вызывает скачок поля на границе. Согласно геометрической оптике, связь между интенсивностями на границе линейна, и ее можно задать с помощью линейных операторов отражения и преломления. Мы объединяем их в одном операторе «отражения — преломления»:

$$I_+ = \mathbf{P}_- I_- + i, \quad (3)$$

где  $i = i_+ + \mathbf{P}_- i_-$ . Область определения этого оператора — функции в  $X_-$ , область значений — в  $X_+$ . Его явное выражение записывать не будем, поскольку в дальнейшем оно не понадобится.

Сопряженное представление искомого функционала (2) имеет вид:

$$Q = (s, J) + [i, J_+]_+, \quad (4)$$

где  $J = J(x)$  — функция ценности (далее — просто ценность), равная показанию детектора, создаваемого лучом света единичной мощности, испускаемым из фазовой точки  $x$ ;  $J_{\pm}(\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega}) = J(\mathbf{r} \pm \boldsymbol{\Omega} \cdot 0, \nu, \boldsymbol{\Omega})$ ,  $\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega} \in X_{\pm}$  — выходная и входная ценности на границе. Они связаны граничным условием:

$$J_- = \mathbf{P}_+ J_+ + g, \quad (5)$$

Сопряженный оператор отражения — преломления  $\mathbf{P}_+$  (определенный в (8)) переводит функции в  $X_+$  в функции в  $X_-$  посредством дифференциального коэффициента «отражения-преломления»  $p(x; d\boldsymbol{\Omega}')$ . Произведение  $p(x; d\boldsymbol{\Omega}') |\boldsymbol{\Omega}' \mathbf{n}_x|$  есть распределение по направлениям мощности выходящего с границы света, отраженного или преломленного, от луча единичной мощности падающего на границу в фазовой точке  $x$ . Взаимодействие с границей — локально и упруго: не изменяет координату и частоту луча света.

Вне границ (т.е. на  $X$ ) интенсивность и ценность удовлетворяют, соответственно, прямому и сопряженному интегро-дифференциальным уравнениям переноса излучений, из которых, используя граничные условия (3) и (5), нетрудно вывести двойственное представление (эквивалентность (2) и (4)) и получить интегральные уравнения. Они оказываются справедливыми и на границах: для интенсивности — на  $X_-$ , для ценности — на  $X_+$ . Естественно, поэтому, принять на границах  $I = I_-$  и  $J = J_+$ , распространив тем самым область определения этих функций до  $\bar{X}_-$  и  $\bar{X}_+$ , соответственно ( $\bar{X}_{\pm} \equiv X_0 + X_{\pm}$ ).

Ценность определяют функции отклика детектора  $q, g$  и (оптические) характеристики среды и окружения: коэффициенты (макроскопические сечения) взаимодействия и рассеяния  $\mu(y), \mu_s(y)$ , индикатриса (фазовая функция) рассеяния  $w(x; d\nu' d\boldsymbol{\Omega}')$  (распределение по направлениям и частотам мощности света после рассеяния луча единичной мощности в фазовой точке  $x$ ) и введенный коэффициент отражения-преломления  $p(x; d\boldsymbol{\Omega}')$ . Чтобы формализовать требования к этим (и другим) величинам, введем 2 банаховых пространства:  $B(Z)$ , состоящее из ограниченных борелевских числовых функций  $f(z)$  на множестве  $Z$  с нормой  $\|f\| = \sup_{z \in Z} |f(z)|$ , и  $V(Z)$ , состоящее из конечных мер (со знаком)  $\phi(A)$ , определенных на борелевских множествах в  $Z$  с нормой, равной полной вариации меры на  $Z$ :  $\|\phi\| = |\phi|(Z)$ . Эти пространства сопряжены (точнее  $V$  изоморфна части  $B^*$  [3]), и потому каждый элемент  $V(Z)$  задает линейный функционал на  $B(Z)$ :  $\langle \phi, f \rangle = \int_Z \phi(dz) f(z)$ .

Следующие ограничения на характеристики системы вытекают из их физического смысла:

$$g \in B(X_-); \quad q \in B(X); \quad q(x) = 0, x \in X_0. \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mu_s, \mu &\in B(Y), \quad 0 < \mu_s \leq \mu; \\ w(x; \cdot) &\in V(\Lambda \times O), x \in X; \quad w \geq 0; \quad w(x; \Lambda \times O) = 1; \\ \mathbf{W}f(x) &\equiv \int_{\Lambda \times O} w(x; d\nu' d\boldsymbol{\Omega}') f(\mathbf{r}, \nu', \boldsymbol{\Omega}') \in B(X), \quad f \in B(X). \end{aligned} \quad (7)$$



$$\begin{aligned} p(x; \cdot) \in V(O_{\mathbf{r}}^+), x \in X_-; p \geq 0; \mathbf{P}_+ \chi_{X_+}(x) = 1; \\ \mathbf{P}_+ f(x) \equiv \int_{O_{\mathbf{r}}^+} p(x; d\boldsymbol{\Omega}') |\boldsymbol{\Omega}' \mathbf{n}_{\mathbf{r}}| f(y, \boldsymbol{\Omega}') \in B(X_-), f \in B(X_+). \end{aligned} \quad (8)$$

Будем считать их выполненными. Тогда можно ввести 4 оператора:

рассеяния:  $\mathbf{S}f = \mu_s \mathbf{W}f|_X \quad (B(\bar{X}_+) \rightarrow B(X))$ ,

пробега:  $\mathbf{L}f(x) = \int_0^{|\mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}} - \mathbf{r}|} \exp\{-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega}l, \nu)\} f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega}l, \nu, \boldsymbol{\Omega}) dl \quad (B(X) \rightarrow B(\bar{X}_+))$ ,

достижения границы:  $\boldsymbol{\Theta}f(x) = \begin{cases} \exp\{-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}}, \nu)\} f(\mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}}, \nu, \boldsymbol{\Omega}), & \mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}} \in \Gamma \\ 0, & \mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}} \notin \Gamma \end{cases} \quad (B(X_-) \rightarrow B(\bar{X}_+))$ ,

отражения-преломления, «расширенный»:  $\mathbf{P}f = \mathbf{P}_+ f|_{X_+} \quad (B(\bar{X}_+) \rightarrow B(X_-))$ .

Здесь  $\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \nu) = \int_0^{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \mu(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} l, \nu) dl$  — оптическое расстояние между точками  $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$  для света с частотой  $\nu$ ;  $\mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}}$  — точка первого достижения границы лучом, выходящим из точки  $\mathbf{r}$  в направлении  $\boldsymbol{\Omega}$ . Если достижений нет, то  $\mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}} = \infty$  и  $|\mathbf{r}_{\boldsymbol{\Omega}} - \mathbf{r}| = \infty$ .

Из этих операторов построим еще один:  $\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{S} + \boldsymbol{\Theta}\mathbf{P}$ , и запишем интегральное уравнение для ценности на всем фазовом пространстве  $\bar{X}_+$ :

$$J = \mathbf{K}J + \mathbf{L}q + \boldsymbol{\Theta}g. \quad (9)$$

Поскольку оператор  $\mathbf{K}$  действует в пространстве  $B(\bar{X}_+)$ , решение уравнения следует искать в этом же пространстве, что вполне соответствует физическому смыслу ценности.

Любой источник излучения может быть охарактеризован фазовым распределением мощности источников: мерой  $\sigma(A)$  на  $\bar{X}_+$ , имеющей смысл мощности света, излучаемого источниками внутри фазовой области  $A \subset \bar{X}_+$ . Поэтому, всякое распределение  $\sigma \in V(\bar{X}_+)$  задает линейный функционал от ценности  $J \in B(\bar{X}_+)$ :

$$\mathbb{Q} = \langle \sigma, J \rangle = \int_{\bar{X}_+} \sigma(dx) J(x) \quad (10)$$

В частном, до сих пор рассматриваемом случае, когда источники сосредоточены только в среде и имеют плотности  $s, i$ , имеет место:  $\sigma(A) = (s, \chi_A) + [i, \chi_A]_+$ ,  $A \subset \bar{X}_+$ , где  $\chi_A(x)$  — индикатор множества  $A$  (равный 1 при  $x \in A$  и 0 при  $x \notin A$ ). Тогда (10) переходит в (4) и, следовательно,  $\mathbb{Q}$  совпадает с исходным функционалом (2). Иными словами, представление (10) есть обобщение сопряженной формы (4), позволяющее включить в рассмотрение произвольные источники, в том числе точечные, мононаправленные, монохромные. Разумеется, по-прежнему, они должны быть конечными и сосредоточенными в среде:

$$\sigma \in V(\bar{X}_+), \sigma \geq 0, \sigma(X_0) = 0. \quad (11)$$

Условия (6)–(8), (11) задают естественные ограничения на все исходные характеристики системы (детектора, среды и источника). Всякий набор, характеристик, удовлетворяющих этим ограничениям, условимся называть *физическим*.

Заметим, что обобщенное прямое представление, отвечающее (10), можно записать в прежней форме (2), но в обобщенных функциях для интенсивности. Более последовательный подход требует введения мер для описания поля излучения вместо интенсивности. Желание избежать этих усложнений, явилось важной причиной выбора сопряженного подхода.

Формула (10), уравнение (9) и условия физичности (6)–(8), (11) задают замкнутую математическую модель для разнообразных линейных характеристик световых полей в гетерогенных мутных средах, облучаемых произвольными источниками. Следующий раздел статьи посвящен вычислению этих характеристик в рамках данной модели.

## 2 Оценки

Свет в вероятностной интерпретации кинетической модели представляет собой поток невзаимодействующих друг с другом частиц, движущихся в среде по случайным траекториям, составленным из чередующихся прямолинейных свободных пробега (изменяющих положение частицы) и точечных мгновенных событий



(изменяющих направление и частоту). Событие может быть либо столкновением с двумя несовместными исходами: рассеянием или поглощением, либо достижением границы с несовместными отражением или преломлением.

Обозначим как  $x_0, \dots, x_n$  последовательность (фазовых координат) событий на траектории одной частицы в  $\bar{X}_+$ . Нулевое событие отвечает испусканию частицы источником,  $n$ -е — последнему событию — поглощению. Значения  $\Omega_i, \nu_i$  — выходные, т.е. относятся к моменту после события. Для поглощения (для определенности) полагаем:  $\Omega_n = \Omega_{n-1}, \nu_n = \nu_{n-1}$ .

Введенная последовательность есть однородная обрывающаяся марковская цепь в  $\bar{X}_+$  с переходной вероятностью, целиком определяющей введенными выше оптическими характеристиками. Будем называть такую цепь *физической* (или *физического типа*), *обусловленной* указанным набором характеристик. Понятие включает выполнение физических ограничений (7), (8) на этот набор. Ядро оператора уравнения (9)  $k(x, A) = \mathbf{K}\chi_A(x)$ ,  $x \in \bar{X}_+$ ,  $A \subset \bar{X}_+$ , совпадает с физической цепью, обусловленной набором  $\mu, \mu_s, w, k$  (точнее с цепью,  $x_0, \dots, x_{n-1}$ , не включающей поглощение).

Если существует итерационное решение уравнения (9) в  $B(\bar{X}_+)$  (например, при  $\|\mathbf{K}\| = \sup_{x \in \bar{X}_+} k(x, \bar{X}_+) < 1$ ), то оно совпадает с математическим ожиданием аддитивного функционала от этой цепи, выходящей из фиксированной точки  $x_0 = x$ :

$$J(x) = \mathbf{M}_x \phi, \quad \phi = \phi_G + \phi_\Gamma = \sum_{i=1}^n (h_i + \gamma_i).$$

Функционал состоит из объемной и граничной частей, вклады от событий в которые  $(h_i, \gamma_i)$ , определяются уравнением неоднозначно. Для граничной части наиболее «физично» выглядит вклад  $\gamma_i = \chi_i g(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \Omega_{i-1})$ , для объемной — два следующих:

$$h_i^{tr} = \int_0^{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|} q(\mathbf{r}_{i-1} + \Omega_{i-1} l, \nu_{i-1}, \Omega_{i-1}) dl, \quad h_i^c = \bar{\chi}_i q(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \Omega_{i-1}) / \mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}).$$

Здесь  $\chi_i = \chi_\Gamma(\mathbf{r}_i)$  — признак достижения границы, равный 1, если  $i$ -е событие — достижение и 0, если столкновение;  $\bar{\chi}_i = 1 - \chi_i$  — признак столкновения.

Искомая величина — интеграл (10), очевидно, пропорциональна математическому ожиданию этого же функционала:  $\mathbb{Q} = \bar{\sigma} \mathbf{M} \phi$  ( $\bar{\sigma} = \sigma(\bar{X}_+)$ ), но от цепи со случайным входом  $x_0$ , распределенным по нормированной мере  $\sigma/\bar{\sigma}$ . Отсюда следуют аналоговые (имитационные) алгоритмы метода Монте — Карло, широко используемые в приложениях. Функционал  $\phi$  — Монте — Карловская оценка величины  $\mathbb{Q}/\bar{\sigma}$ . Выбор  $h_i = h_i^{tr}$  дает оценку «по — пробегам»,  $h_i = h_i^c$  — «по — столкновениям».

Интегральное представление (9), (10) для линейного функционала  $\mathbb{Q}$  позволяет разрабатывать для него эффективные неаналоговые (неимитационные) алгоритмы, используя классический «весовой» подход (схему Неймана — Улама) [4]. В соответствии с ним, неаналоговые оценки будем строить на траекториях цепи, отличной от аналоговой, т.е. обусловленной заданными характеристиками среды  $\mu, \mu_s, w, k$ . Но произвол выбора этой неаналоговой цепи ограничим классом физических цепей.

Потребуем, чтобы характеристики  $\tilde{\mu}, \tilde{\mu}_s, \tilde{w}, \tilde{p}$ , обуславливающие выбранную неаналоговую цепь и ее начальное распределение  $\tilde{\sigma}$ , удовлетворяли условиям регулярности:

$$\begin{aligned} &(\tilde{\mu}_s(y) = 0) \Rightarrow (\mu_s(y) = 0), \quad y \in Y; \\ &\exists w'(x; \Omega', \nu') : w(x; A \times B) = \int_{A \times B} \tilde{w}(x; d\Omega' d\nu') w'(x; \Omega', \nu'), \quad x \in X, A \subset O, B \subset \Lambda; \\ &\exists p'(x; \Omega') : p(x; A) = \int_A \tilde{p}(x; d\Omega') p'(x; \Omega'), \quad x \in X_-, A \subset O_\Gamma^+; \\ &\exists \sigma'(x) : \sigma(A) = \int_A \tilde{\sigma}(dx) \sigma'(x), \quad x \in \bar{X}_{+-}, A \subset \bar{X}_+. \end{aligned} \tag{12}$$

На ней определим функционал:

$$\psi_1 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \left( \chi_i g(y_i, \Omega_{i-1}) + \bar{\chi}_i \frac{q(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \Omega_{i-1})}{\mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1})} \right), \tag{13}$$



где вес  $\alpha_i = \sigma'(x_0) \exp\{\tilde{\tau}_i - \tau_i\} \prod_{m=1}^i \beta_m$ ,  $\beta_m = \chi_m p'(y_m, \Omega_{m-1}; \Omega_m) + \bar{\chi}_m \frac{\mu_s(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1})}{\bar{\mu}_s(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1})} w'(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1}, \Omega_{m-1}; \nu_m, \Omega_m)$ ,  
 $\tau_i = \sum_{j=1}^i \tau(\mathbf{r}_{j-1}, \mathbf{r}_j; \nu_{j-1})$ ;  $\tilde{\tau}_i = \sum_{j=1}^i \tilde{\tau}(\mathbf{r}_{j-1}, \mathbf{r}_j; \nu_{j-1})$  — оптические пути до  $i$ -го события для коэффициентов взаимодействия  $\mu$  и  $\tilde{\mu}$ .

**Теорема 1.** Пусть функции отклика  $q, g$ , оптические характеристики  $\mu, \mu_s, w, k$  и распределение источников  $\sigma$  — физичны (удовлетворяют условиям (6)–(8), (11)), и  $\sup_{y \in Y} \mu_s(y)/\mu(y) < 1$ .

Пусть  $x_0, \dots, x_n$  — неаналоговая марковская цепь физического типа в  $\bar{X}_+$ , обусловленная характеристиками  $\tilde{\mu}, \tilde{\mu}_s, \tilde{w}, \tilde{p}$ , с начальным распределением  $\tilde{\sigma}$ , удовлетворяющими условиям регулярности (12).

Тогда функционал (13) от этой цепи является несмещенной оценкой линейного функционала (10) от решения уравнения (9):  $\mathbb{Q} = \tilde{\mathbf{M}}\psi_1$ .

Отметим, что утверждение теоремы включает существование и единственность решения уравнения и существование математического ожидания.

Большинство реальных линейных детекторов — граничные; для них  $q = 0$ , и оценка (13) суммирует вклады только от достижений границ, которых, обычно, мало (особенно, когда среда однозонна). При этом фазовый объем детектора (область в  $X_-$ , где  $g \neq 0$ ) часто очень мал, и вероятность попадания в него (аналоговой траекторией) может быть совершенно ничтожной. Увеличить эту вероятность и, тем самым, уменьшить дисперсию оценки можно за счет надлежащего выбора неаналоговой цепи. Но этот путь неэффективен в типичной ситуации, когда необходимо одновременно рассчитывать показания нескольких детекторов («улучшили одно — ухудшили другое»). В таких случаях лучше использовать другую оценку.

Перепишем уравнение (9) при  $q = 0$  в виде  $J = J_1 + \Theta g$ ,  $J_1 = \mathbf{K}J_1 + \mathbf{L}\mathbf{S}\Theta g + \Theta \mathbf{P}\Theta g$ . Отсюда следует:  $\mathbb{Q} = \langle \sigma, J_1 \rangle + \langle \sigma, \Theta g \rangle$ . Применяя к первому слагаемому оценку (13) и рандомизируя вторую, приходим к новой оценке:

$$\psi_2 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \left( \chi_i (\delta_{i,1} + \mathbf{P}\Theta) g(y_i, \Omega_{i-1}) + \bar{\chi}_i \frac{\mathbf{S}\Theta g(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \Omega_{i-1})}{\mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1})} \right), \quad (14)$$

где вес  $\alpha_i$  — тот же, что и в (13),  $\delta_{i,1}$  — символ Кронекера.

**Теорема 2.** В условиях теоремы 1 при  $q = 0$  функционал (14) от неаналоговой марковской цепи является несмещенной оценкой линейного функционала (10) от решения уравнения (9):  $\mathbb{Q} = \tilde{\mathbf{M}}\psi_2$ .

В отличие от  $\psi_1$  оценка  $\psi_2$  содержит вклады от столкновений, которых, как правило, значительно больше, чем достижений. К тому же, и вероятность иметь таким вкладом ненулевые значения существенно выше, чем вкладам в  $\psi_1$ . Поэтому, дисперсия оценки  $\psi_2$  значительно меньше, чем  $\psi_1$ . Но  $\psi_2$  значительно сложнее, и ее вычисление, связанное с вычислением интегралов, требует большего времени. Поэтому по трудоемкости, простая оценка  $\psi_1$  может оказаться предпочтительней «навороченной»  $\psi_2$ , особенно, когда фазовый объем детектора не мал.

Сложность вычисления вкладов в  $\psi_2$  можно существенно уменьшить за счет их рандомизации: вычисления интегралов методом Монте — Карло. Тут возможны различные варианты, но рассматривать их здесь мы не имеем возможности. Также опустим рассмотрение частных случаев, приводящих к полезным модификациям оценок.

### 3 Обратная задача

Главной обратной задачей оптики мутных сред, в частности биомедицинской оптики, является задача определения оптических параметров среды, исходя из измерений определенных характеристик излучения от заданного источника. Для ее решения необходима предварительная априорная оценка измеряемых характеристик для множества наборов оптических параметров, покрывающего с достаточно мелким шагом область возможных значений искомого набора. При этом, оценка должна иметь высокую дифференциальную точность, т.е. малую погрешность расчета, как самих характеристик, так и их разностей при близких значениях параметров.

Аналоговый метод Монте — Карло плохо приспособлен к решению этой задачи. Во-первых, он требует проведения отдельных самостоятельных расчетов для каждого набора параметров, что многократно увеличивает общее время счета. Во-вторых, и это главное (хотя не отмечаемое авторами), аналоговый метод



имеет низкую дифференциальную точность вследствие низкой коррелированности результатов разных аналоговых расчетов (даже при использовании одной исходной последовательности случайных чисел во всех расчетах).

Построенные неаналоговые оценки (13), (14) решают проблему. Схема проста. Пусть требуется рассчитать показания нескольких детекторов в заданном множестве сред с различными характеристиками. Геометрия среды и источники — одинаковы. Выбираем цепь для моделирования так, чтобы ее характеристики удовлетворяли условиям регулярности по отношению к характеристикам каждой из заданных сред. Выбираем тип оценки:  $\psi_1$  или  $\psi_2$ . Применяем ее к каждой среде и детектору. На одном ансамбле траекторий рассчитываем показания всех детекторов для всех сред.

Для извлечения оптических свойств среды из интегральных измерений приходится упрощать геометрию среды и модель переноса. В неразрушающих методах рассматривают полубесконечную однородную среду. Оптимальной моделью, на наш взгляд, является модель с фиксированной индикатрисой (например, Хенли — Гринштейна с заданным фактором анизотропии). В большинстве случаев можно пренебречь неупругим рассеянием и использовать односкоростное приближение (частоту можно исключить из фазовых переменных). В перечисленных условиях среда характеризуется тремя оптическими параметрами: коэффициентами  $\mu$ ,  $\mu_s$  и показателем преломления (входящим в коэффициент отражения-преломления). Удобно в качестве моделируемой цепи выбрать цепь в этой простой модели с параметрами, отвечающим одной из заданных сред. Тогда гарантировано выполнение условий регулярности, и оценки выглядят намного проще.

Вариант оценки (13) был успешно применен нами в «двухшаговом» методе неинвазивного определения оптических параметров биологических тканей по измерениям отраженного света [5], [6]. На основе оценки (14) разработан более мощный, «одношаговый» метод, в котором наряду с показаниями детекторов рассчитываются их производные по оптическим параметрам. Его практическая реализация близка к завершению.

## Заключение

Предложенная формализация разнородных вычислительных задач оптики мутных сред в виде одной общей задачи позволяет применить строгие подходы к разработке методов их решения. Полученные на этом пути две общие весовые оценки метода Монте — Карло намного расширяют область применимости метода. Особо следует выделить обратные задачи оптики мутных сред, где эти оценки позволяют с высокой дифференциальной точностью одновременно для большого набора сред с различными оптическими параметрами рассчитывать радиационные характеристики и даже их производные по этим параметрам.

## Список литературы

- [1] Тучин В.В. Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. Монография. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013.
- [2] Zhu C. Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues/ C.Zhu, Q.Liu // J. Biomed. Opt. — 2013. — Vol. 18(5) — 050902.
- [3] Данфорд Н., Шварц Дж. Линейные операторы. Том 1. Общая теория. М.: ИЛ, 1962.
- [4] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование (2-е изд.). М.: ФИЗМАТЛИТ, 1982.
- [5] A non-destructive diffuse reflectance calibration-free method for determine optical parameters of biological tissues/ A.V.Lappa, Ar.N.Kulikovskiy, An.N.Kulikovskiy, T.A.Makarova // Proc. SPIE.- 2013. — Vol. 8579, 857912.
- [6] Lappa A.V. A non-invasive diffuse reflectance calibration-free method for absolute determination of exogenous biochemicals concentration in biological tissues/ A.V.Lappa, Ar.N.Kulikovskiy, O.G.Busarov // Proc. SPIE.— 2014. — Vol. 8952, 895216.

*Лаппа Александр Владимирович — проф., д.ф.-м.н., проф. кафедры теоретической физики  
Челябинского государственного университета  
e-mail: lappa@csu.ru;*

*Анчугова Анастасия Евгеньевна — аспирант кафедры теоретической физики ЧелГУ  
e-mail: anchugova.ae@gmail.com.*

*Дата поступления — 31 мая 2017 г.*