ANGEWANDTE MATHEMATIK

UND

INFORMATIK

Das inverse Transportproblem in der Lasertomographie

Oliver Dorn

7/97 - N

UNIVERSITÄT MÜNSTER

Angewandte Mathematik

Das inverse Transportproblem in der Lasertomographie

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Mathematik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms–Universität Münster

vorgelegt von

Oliver Dorn
aus Bad Oeynhausen

1997

Dekan:	Prof. Dr. F.-K. Holtmeier
Erster Gutachter:	Prof. Dr. F. Natterer
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. G. Bengel
Tag der mündlichen Prüfungen:	
Tag der Promotion:	

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Wir wollen in dieser Arbeit das inverse Problem der Transportgleichung untersuchen. Seitdem A. Schuster 1905 in [171] erstmals die lineare Strahlungstransportgleichung vorstellte, haben sich dieser aufgrund ihrer recht allgemeinen Struktur eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten eröffnet. Die beiden bekanntesten davon sind sicherlich zum einen die Beschreibung des Strahlungstransportes in den äußeren Schichten von Sternatmosphären (das sogenannte „Radiative Transfer“, vgl. Chandrasekhar [46] oder Sobolev [177]), zum anderen die Modellierung der Neutronenwanderung in Kernreaktoren (vgl. etwa Weinberg und Wigner [183] oder Bell und Glasstone [24]). Mit der mathematischen und technischen Entwicklung tomographischer Methoden hat die Transportgleichung spätestens in den siebziger und achtziger Jahren auch in der Medizin eine größere Bedeutung erlangt. Die Ausbreitung von Röntgenstrahlung in menschlichem Gewebe, wie sie heutzutage standardmäßig in der Computertomographie verwendet wird, stellt in ihrer mathematischen Beschreibung einen Spezialfall dieser Transportgleichung dar (vgl. etwa Barrett und Swindell [23], Herman [77] oder Natterer [128]).

Als ein Nachteil der Verwendung von Röntgenstrahlung in der medizinischen Diagnostik ist seit langem ihre ionisierende Wirkung auf körpereigene Substanzen bekannt. Nicht zuletzt aus diesem Grunde werden nach wie vor große Anstrengungen unternommen, harmlosere Alternativen zu der Verwendung dieser energiereichen Strahlung bei der diagnostischen Untersuchung menschlichen Gewebes zu finden. Mittlerweile haben sich eine Reihe physikalisch recht unterschiedlicher bildgebender Verfahren in der Medizin etabliert, die trotz ihrer teilweise ganz spezifischen Anwendungsmöglichkeiten im medizinischen Alltag miteinander konkurrieren. Hervorzuheben sind hier die Verfahren, deren Kürzel CT (Computerized Tomography), SPECT (Single Photon Emission Computerized Tomography), PET (Positron Emission Tomography) und NMR (Nuclear Magnetic Resonance Tomography) wohl längst fester Bestandteil des klinischen Wortschatzes geworden sind. Zu nennen ist hier sicherlich auch die Ultraschall-Tomographie.

Seit nun etwa zehn Jahren wird - angeregt durch einen 1977 erschienenen Artikel von F.F. Jöbsis [86]- weltweit verstärkt an einem neuen Verfahren gearbeitet, bei dem versucht wird, mit Hilfe von nahem Infrarotlicht (NIR = Near Infra-Red Light) menschliches Gewebe zu durchleuchten, um aufgrund der wieder austretenden Strahlung Rückschlüsse auf die innere Beschaffenheit des durchleuchteten Körpers ziehen zu können (vgl. etwa [3], [54], [72], [125]). Der große Vorteil der Verwendung dieser (im Wellenlängenbereich von etwa 700 bis 1000 nm liegenden) NIR-Strahlung im Vergleich zu der energiereicheren Röntgenstrahlung ist ihre relative Harmlosigkeit. Die Energie dieser Strahlung ist zu gering, um in dem Maße schädliche Ionisationsvorgänge auslösen zu können, wie dies etwa bei Verwendung von Röntgenstrahlen der Fall sein kann.

Dieser immense Vorteil aus medizinischer Sicht hat seinen Preis: Anstatt ihren Weg durch den Körper auf geraden Linien zurückzulegen, werden diese energiearmen Strahlen hin- und hergestreut, und das in realistischen Anwendungen mehrere hundert Mal, bevor sie schließlich in einen Detektor gelangen und registriert werden können. Ein Großteil der Information geht bei diesen wiederholten Streuvorgängen schnell wieder verloren, so daß es ausgesprochen schwierig ist, aus der noch verbleibenden Information gute Rekonstruktionen des Körperinneren zu gewinnen. Ein zusätzliches Problem tritt dadurch auf, daß aufgrund der unbekannten Streuung nun nicht mehr nur eine einzige Maßzahl der Körpersubstanz zu bestimmen ist (in der Computertomographie ist dies die *Dämpfung*), sondern gleich deren zwei (ein *Absorptions-* und ein *Streukoeffizient*).

Als mathematisches Modell der Ausbreitung dieser NIR-Strahlung in menschlichem Gewebe wird gemeinhin die lineare Transportgleichung (bekannt auch als *lineare Boltzmanngleichung* oder *Strahlungstransportgleichung*) akzeptiert, vgl. z.B. Ishimaru [80] oder die Tagungsbände [42]-[45]. Die beiden gesuchten Koeffizienten der Absorption und der Streuung treten in natürlicher Weise als Parameter dieser Gleichung auf. Die mathematische Aufgabe besteht darin, aufgrund von Meßwerten diese Parameter zu bestimmen. Kennt man diese, so kann man Rückschlüsse auf die Gewebestruktur ziehen. Beispielsweise können so Frühgeborene auf eine hinreichende Sauerstoffversorgung des Gehirns untersucht werden, da sich die

Absorptionseigenschaften von mit Sauerstoff angereichertem Blut bezüglich NIR-Strahlung von denen des sauerstoffarmen Blutes unterscheiden. (Für nähere Einzelheiten hierzu vgl. etwa [54].) Als weitere potentielle Anwendungsmöglichkeit dieser Methode wird auch ihr Einsatz im Rahmen von harmlosen Reihenuntersuchungen zur Brustkrebs-Früherkennung diskutiert, die sogenannte *optische Mammographie*. (Vgl. hierzu etwa die entsprechenden Beiträge in [45] oder in den früheren Tagungsbänden [42]-[44].)

In der vorliegenden Arbeit soll das inverse Transportproblem insbesondere im Hinblick auf dieses neue bildgebende Verfahren der *NIR-* oder *Lasertomographie* (zur Erzeugung der NIR-Strahlung werden im allgemeinen entsprechende Laser verwendet) untersucht werden. Dennoch lassen sich einige der gewonnenen Resultate auch auf benachbarte Gebiete anwenden, insbesondere auf die Computertomographie und auf SPECT. Wo dies der Fall ist, haben wir versucht, kurz auf diese Anwendungen einzugehen, soweit es im Rahmen dieser Arbeit als angemessen und interessant erschien.

Generell lassen sich die meisten der hier vorgestellten Ergebnisse auf den Fall der Computertomographie übertragen, wenn man dort Streuung zuläßt. Deshalb haben wir in den Rekonstruktionen des siebten Kapitels diese Situation schwacher Streuung ebenfalls mit untersucht. Grob gesprochen lassen sich die Computertomographie und die NIR- oder Lasertomographie mathematisch gesehen als zwei konträre Grenzfälle der linearen Transportgleichung auffassen: Die Computertomographie entspricht dabei der Situation vergleichsweise geringer oder verschwindender Streukoeffizienten, die Lasertomographie dagegen der Situation ausgesprochen hoher Streukoeffizienten. Insofern ist es auch aus mathematischer Sicht interessant, den Übergang von der Computer- zur Lasertomographie näher zu untersuchen. Diese Zielsetzung wird in der vorliegenden Arbeit immer wieder sichtbar werden.

Wir wollen nun die Inhalte der nachfolgenden Kapitel kurz vorstellen.

in **Kapitel 2** referieren wir einige bekannte und für den Rest der Arbeit wichtige Grundlagen in Bezug auf das direkte und das inverse Transportproblem. Dies sind die Existenz- und Eindeutigkeitssätze der Lösungen des direkten und des inversen Problems, die Integraldarstellung der Transportgleichung und die Entwicklung ihrer Lösung in eine Neumannreihe. Außerdem geben wir einen kurzen Überblick über die im Zusammenhang mit dieser Arbeit interessanten bereits existierenden Arbeiten anderer Autoren zum inversen Transportproblem und diskutieren diese kurz.

In **Kapitel 3** geben wir eine neue Darstellung und Herleitung der ersten drei Terme einer Bornreihe für die lineare Transportgleichung. Diese Bornreihe entspricht einer Neumannreihe bei singulärer Quelle und beschreibt physikalisch die Verteilung der ungestreuten, genau einmal und genau zweimal gestreuten Strahlung. Wir zeigen die Äquivalenz dieser drei Terme zu den Darstellungen, die A. Bondarenko in [31] für die singulären Anteile der Fundamentallösung der linearen Transportgleichung hergeleitet hat. Abschließend gehen wir kurz auf daraus resultierende Rekonstruktionsverfahren ein.

In **Kapitel 4** leiten wir explizit die in der Lasertomographie zur Zeit gebräuchliche Diffusionsapproximation und deren Verallgemeinerung, die Telegraphenapproximation, aus der linearen Transportgleichung her. Wir gehen dabei kurz auf die Behandlung der Quellen und der Randbedingungen bei diesen Approximationen ein und diskutieren deren Verwendung im Rahmen der Lasertomographie. Wir stellen in Abschnitt 4.4 eine Aufspaltung der Lösung in zwei Anteile vor, von denen der erste (etwa mit den in Kapitel 3 berechneten Ausdrücken) analytisch zu bewältigen ist, der zweite dagegen eine bessere Approximierbarkeit durch die Diffusionsmethoden besitzt. Außerdem folgt mit dieser Darstellung in gewissen Fällen eine mögliche Alternative zu dem in Abschnitt 4.7 angegebenen Rekonstruktionsverfahren. Ähnliche Aufspaltungen wurden bereits von früheren Autoren für das direkte Transportproblem verwendet, vgl. dazu die angegebenen Quellen.

In **Kapitel 5** stellen wir sodann die in dieser Arbeit verwendeten (und komplett selbst geschriebenen) numerischen Methoden vor. Dies ist zum einen eine Diskretisierung der linearen Transportgleichung mittels finiter Differenzen, zum anderen eine Simulation der ihr zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge durch eine Monte-Carlo-Simulation. Anschließend werden einige für die Arbeit besonders interessante (und vielleicht auch an sich sehr schöne) Monte-Carlo-Simulationen in Form von Momentaufnahmen gezeigt.

In **Kapitel 6** schließlich leiten wir den zentralen Algorithmus dieser Arbeit her, den wir als „Rücktransportalgorithmus“ bezeichnen. Er stellt ein neues Rekonstruktionsverfahren für Anwendungen z.B. in der Lasertomographie dar. Da es sich bei dem vorliegenden inversen Transportproblem um ein nichtlineares Problem handelt, führen wir in Abschnitt 6.2 zunächst eine Linearisierung dieses Problems durch. Hierzu benötigen wir die Kenntnis der Fréchet-Differenzierbarkeit der dort auftretenden Probleme R_j, welche wir im Abschnitt 6.3 in den physikalisch relevanten L^1-Räumen nachweisen. Dabei machen wir Gebrauch von einer Idee V. Palamodovs, vgl. dort. (Für ähnliche Problemstellungen im Rahmen der Ultraschall-Tomographie wurden Fréchet-Differenzierbarkeitsaussagen beispielsweise von R. Potthast gezeigt, vgl. [153], [154]). In Abschnitt 6.3 wird sodann das zentrale Minimierungsproblem angegangen, woraus schließlich der in Abschnitt 6.4 vorgestellte und in dieser Arbeit verwendete Rekonstruktionsalgorithmus resultiert. In den restlichen Abschnitten des sechsten Kapitels werden dann einige Eigenschaften dieses Algorithmus diskutiert und eine physikalische Deutung der dabei auftretenden Größen gegeben.

Kapitel 7 ist der Präsentation und Diskussion einiger Rekonstruktionen gewidmet, die wir unter Verwendung der in den vorangehenden beiden Kapiteln bereitgestellten Methoden und Techniken durchgeführt haben. Damit soll das grundsätzliche Verhalten des Rücktransportalgorithmus untersucht und auf dessen Brauchbarkeit etwa im Rahmen der Lasertomographie hin überprüft werden. Ein besonderes Augenmerk wird dabei auf die simultane Rekonstruierbarkeit zweier Koeffizienten bei schwacher und bei starker Streuung gelegt. Es stellt sich heraus, daß dieser Algorithmus auch bei Vorhandensein starker Streuung prinzipiell noch in der Lage ist, zwei Koeffizienten der Transportgleichung gleichzeitig zu bestimmen, daß dies aber bei weitem weniger gut gelingt als etwa im Falle nur schwacher Streuung. Wir diskutieren die möglichen Gründe für dieses Verhalten und geben auch hier einige für das Verständnis des Algorithmus hilfreiche physikalische Deutungen der auftretenden Phänomene.

Ich möchte mich an dieser Stelle bei Herrn Prof. Dr. F. Natterer ganz herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele hilfreiche Hinweise und Diskussionen bedanken.

Herrn Dipl.-Math. Thomas Dierkes danke ich für die kritische Durchsicht des Manuskriptes dieser Arbeit.

Kapitel 2

Das Direkte und das Inverse Transportproblem

2.1 Das Cauchy-Problem der Transportgleichung

Wir wollen uns im folgenden mit dem Cauchy-Problem der linearen Transportgleichung befassen. Als generelle Referenz geben wir dabei zunächst das Buch [51] von R. Dautray und J.L. Lions an. Auch auf die Darstellung [75] von J. Hejtmanek sei hier hingewiesen. Wir werden einige der für uns relevanten Ergebnisse aus diesen Quellen kurz vorstellen und dabei auf sämtliche Beweise verzichten. Wir ersparen uns dadurch die Einführung und Diskussion einer Reihe von Begriffen aus der Halbgruppentheorie linearer Operatoren, die ganz wesentlich zum Beweis des resultierenden Existenz- und Eindeutigkeitssatzes verwendet werden, die jedoch zu dessen Formulierung nicht unbedingt notwendig sind. (Als lesenswerte Bücher über Halbgruppen geben wir dennoch die Bücher [150] von A. Pazy oder [91] von T. Kato an. Außerdem wird in Dautray und Lions [51] das notwendige Rüstzeug bereitgestellt.) Im Anschluß daran werden wir einen alternativen (in gewissem Sinne den „klassischen") Zugang zur Herleitung von Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen vorstellen, der sich der Integraldarstellung der Transportgleichung und eines Fixpunktsatzes bedient. Hierzu geben wir die Standardreferenz Case und Zweifel [38] an.

Unter dem *Cauchy-Problem der linearen Transportgleichung* verstehen wir das folgende Problem: Finde eine Lösung $u(x, \zeta, t)$ der (Evolutions-) Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,\zeta,t) \;+\; \zeta\cdot\nabla u(x,\zeta,t) \;+\; a(x,\zeta)u(x,\zeta,t) \tag{2.1}$$

$$-\int_V f(x,\zeta',\zeta)u(x,\zeta',t)d\zeta' \;=\; q(x,\zeta,t) \quad \text{auf} \quad \Omega\times V\times]0,\tau[$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(x,\zeta,0) \;=\; u_0(x,\zeta) \quad \text{in} \quad \Omega\times V \tag{2.2}$$

und der Randbedingung

$$u(x,\zeta,t) \;=\; g(x,\zeta,t) \quad \text{auf} \quad \Gamma_-. \tag{2.3}$$

Dabei bezeichnet $x\in\Omega\subset\mathbf{R}^3$ den Ort eines Teilchens der Geschwindigkeit $\zeta\in V\subset\mathbf{R}^3$ zum Zeitpunkt $t\in[0,\tau[$.
Die Mengen $\Gamma_\pm$ seien definiert als

$$\Gamma_\pm \;:=\; \{\,(x,\zeta,t) \;\in\; \partial\Omega\times V\times]0,\tau[\;, \quad \pm\nu(x)\cdot\zeta>0\,\},$$

wobei $\nu(x)$ die äußere Normale auf $\partial\Omega$ im Punkt x ist. Entsprechend sei Γ_0 definiert, wobei in der Mengenklammer „>“ durch „=“ ersetzt wird. Es gilt somit

$$\partial\Omega\times V\times]0,\tau[\,=:\,\Gamma \;=\; \Gamma_-\cup\Gamma_+\cup\Gamma_0.$$

Wir schreiben $\zeta = v\theta$ mit $v = |\zeta|$ und $\theta = \zeta/|\zeta| \in S^2$. v gibt also den Betrag der Geschwindigkeit, θ die Richtung an. Ist eine feste Geschwindigkeit v vorgegeben (der sogenannte *one speed*-Fall), schreiben wir auch $|\zeta| =: c =$const statt v. Für diesen Fall ist

$$V \;=\; S_c \;:=\; \{\,\zeta\in\mathbf{R}^3\,,\,|\zeta| = c = \text{const} > 0\,\},$$

also die Sphäre mit Radius c um den Nullpunkt. Weitere physikalisch relevante Beispiele für V sind

$$V \;=\; S_{v_0,v_1} \;:=\; \{\,\zeta\in\mathbf{R}^3\,,\,0<v_0\le v=|\zeta|\le v_1<\infty\,\},$$

und

$$V \;=\; B_\delta \;:=\; \{\,\zeta\in\mathbf{R}^3\,,\,|\zeta|\le\delta\,\}.$$

In der Literatur haben sich für zwei spezielle Cauchy-Probleme der linearen Transportgleichung besondere Namen durchgesetzt (vgl. z.B. Kaper, Lekkerkerker, Hejtmanek [90] oder Hejtmanek [75]). Wir definieren in Anlehnung an [75] das

Reaktorproblem: Finde eine Lösung $u(x, \zeta, t)$ von (2.1)-(2.3) mit $q \equiv 0$, $g \equiv 0$ und mit bekannter Anfangsbedingung $u_0(x, \zeta)$ auf $\Omega \times V$, wobei Ω ein beschränktes, offenes und konvexes Gebiet im $\mathbf{R}^3$ ist.

Anmerkung: Der Name dieses Problems leitet sich daraus ab, daß durch die angegebenen Bedingungen die Neutronenpopulation in einem Reaktor beschrieben werden kann (vgl. [90] oder [183]). Es sind dort keine inneren flußunabhängigen Quellen vorhanden ($q \equiv 0$) und es treten von außen auch keine Neutronen in den Reaktor hinein ($g \equiv 0$). Die gesamte Entwicklung des Systems entsteht aus der Anfangspopulation $u_0(x, \zeta)$, entsprechend der durch die Transportgleichung vorgeschriebenen Dynamik. Dieses Modell läßt sich aber ebenso auf die Population von Photonen in einem streuenden Medium anwenden, die zu einer Zeit $t = 0$ in das System hineingegeben werden und sich dann frei ausbreiten können. Insofern ist es auf den Fall der Lasertomographie ohne weiteres anwendbar.

Anmerkung: Kaper, Lekkerkerker und Hejtmanek [90] geben eine etwas andere Randbedingung an: $\zeta u(x, \zeta, t) = 0$ auf Γ_-. Da wir in dieser Arbeit die Möglichkeit $\zeta = 0$ grundsätzlich ausschliessen möchten, können wir uns auf die oben angegebene Randbedingung beschränken.

Im Kontrast zum Reaktorproblem definieren wir das

Streuproblem: Finde eine Lösung $u(x, \zeta, t)$ von (2.1)-(2.3) mit $q \equiv 0$, welche auf dem gesamten $\mathbf{R}^3 \times V \times]0, \tau[$ definiert ist (somit also keine Randbedingung zu erfüllen braucht) und einer bekannten Anfangsbedingung $u_0(x, \zeta)$ genügt.

Anmerkung: Der Unterschied zum Reaktorproblem ist also, daß der Fluß nun auf dem gesamten $\mathbf{R}^3$ betrachtet wird. Dies ist typisch für Streuprobleme, bei denen in der Regel eine aus großer Entfernung einlaufende Welle mit einem Objekt wechselwirkt („gestreut wird"), um sich daraufhin wieder in alle Richtungen ad infinitum zu entfernen. (Vgl. z.B. die Streuprobleme der Quantenmechanik oder der Wellengleichung [122], [160], [106], [137].) Hejtmanek [73] hat 1975 die Terminologie und die Konzepte dieser klassischen Streutheorie auf den Fall der Transportgleichung übertragen, vgl. auch Reed und Simon [160]. Weitere Informationen und Literaturhinweise finden sich z.B. in [11] und [47].

Anmerkung: Auch die Streutheorie läßt sich auf das Problem der Lasertomographie anwenden. In diesem Fall wird das zu untersuchende streuende Gebiet $\tilde{\Omega}$ durch ein mit Vakuum gefülltes Äußeres $\mathbb{R}^3 \backslash \tilde{\Omega}$ erweitert gedacht, in welchem sich also alle Teilchen geradlinig ohne Wechselwirkung mit irgendeiner vorhandenen Substanz ausbreiten können. Arianfar und Emamirad haben in [11] einen generellen Zusammenhang zwischen bestimmten Konzepten der Reaktor- und der Streutheorie aufgezeigt. Choulli und Stefanov [47] haben diese ausgenutzt, um einen Existenz- und Eindeutigkeitssatz für das inverse Transportproblem zu beweisen. Wir werden bei der Behandlung desselben näher darauf eingehen.

Wir fahren nun fort mit der Behandlung des allgemeinen Cauchy-Problems der linearen Transportgleichung (2.1)-(2.3).

Sei $L^p(\Omega \times V)$ für $p \in [1, \infty[$ definiert als der Raum aller bzgl. des Produktmaßes $dxd\mu$ meßbarer Funktionen $f(x, \zeta)$, für die gilt

$$\|f\|_{L^p(\Omega\times V)} := \Big(\int_{\Omega\times V} |f(x,\zeta)|^p \, dxd\mu \Big)^{\frac{1}{p}} < \infty. \tag{2.4}$$

Dabei bezeichnet μ ein geeignetes Radonmaß auf dem $\mathbb{R}^3$ mit $\mu(\{0\}) = 0$, und V ist eine abgeschlossenen Teilmenge des $\mathbb{R}^3$ mit $\mathrm{supp}(\mu) = V$. Für eine nähere Beschreibung dieser Räume und die Diskussion einiger ihrer Eigenschaften verweisen wir z.B. auf Cessenat [40], [41] oder Dautray und Lions [51].

Wir wollen hier Lösungen von (2.1)-(2.3) als Funktionen der Zeit suchen, die ihre Werte in diesen Räumen $L^p(\Omega \times V)$ annehmen.

Die aus physikalischer Sicht natürlichste Wahl des zugrundeliegenden Funktionenraumes ist dabei sicherlich der $L^1(\Omega \times V)$, also der Raum aller integrierbarer Funktionen. Denn aufgrund der Interpretation von $u(x, \zeta, t) \geq 0$ als Flußdichte am Ort x zur Zeit t gibt die L^1-Norm (2.4) gerade die Anzahl der zur Zeit t sich im System befindenden Teilchen $N(t)$ an,

$$\|u\|_{L^1(\Omega\times V)} = \int_{\Omega\times V} u(x,\zeta,t) \, dxd\mu =: N(t) < \infty.$$

Für allgemeines $1 \leq p < \infty$ stellen die $L^p(\Omega \times V)$ Banachräume bzgl. der eingeführten Norm dar. Wir werden in dieser Arbeit hauptsächlich den $L^1(\Omega \times V)$ verwenden, da den Funktionen dieses Raumes im Rahmen der Transporttheorie eine besondere physikalische Bedeutung zukommt (vgl. etwas weiter unten). Insbesondere aus diesem Grunde werden wir diesem Raum den Vorzug vor dem $L^2(\Omega\times V)$ geben, welcher den zusätzlichen Vorteil bietet, auch eine Hilbertraumstruktur zu tragen. Der nachfolgende Existenz- und Eindeutigkeitssatz liefert in gewissem Sinne die Rechtfertigung der Verwendung dieser Räume.

Analog zu den $L^p(\Omega \times V)$ seien die Räume $L^p(\Omega \times V\times]0,\tau[)$ definiert. Alles zuvor Gesagte überträgt sich auf diese Räume.

Damit können wir nun für $p \in [1,\infty[$ die „Sobolevräume" $\tilde{W}_p$ einführen gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{W}_p \quad := \quad \Big\{ & u \in L^p(\Omega \times V\times]0,\tau[),\ \frac{\partial u}{\partial t} + \zeta \cdot \nabla u \ \in\ L^p(\Omega \times V\times]0,\tau[), \\ & u(\,.\,,\,.\,,0) \ \in\ L^p(\Omega \times V), \\ & u|_{\Gamma_-} \in L^p(\Gamma_-,\ |\zeta \cdot \nu|\, d\gamma d\mu dt) \Big\}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

$d\gamma$ ist dabei das Oberflächenmaß auf $\partial\Omega$ und $\nu(x)$ stellt die äußere Normale auf $\partial\Omega$ im Punkt x dar. (Ausführlich beschrieben werden die Räume auf Γ_- z.B. in Cessenat [40], [41] oder in Dautray und Lions [51].)

Ohne Beweis übernehmen wir nun den folgenden Existenz- und Eindeutigkeitssatz aus Dautray und Lions [51].

Satz. *Wir betrachten das Transportproblem (2.1)-(2.3) mit $g = 0$ („Homogenes Problem"). Sei*

$$a(x,\zeta) \ \in\ L^\infty(\Omega \times V) \quad \textit{mit} \quad a(x,\zeta) \geq 0. \tag{2.6}$$

Weiter sei die Kernfunktion $f(x,\zeta',\zeta)$ in (2.1) eine positive Funktion, für die gilt

$$\int_V f(x,\zeta',\zeta)\, d\mu(\zeta) \ \leq\ M_a \quad \forall (x,\zeta') \in \Omega \times V, \tag{2.7}$$

$$\int_V f(x,\zeta',\zeta)\, d\mu(\zeta') \ \leq\ M_b \quad \forall (x,\zeta) \in \Omega \times V, \tag{2.8}$$

mit positiven Konstanten M_a, M_b.

Für die Quelle q und die Anfangsverteilung u_0 gelte

$$
\begin{aligned}
q &\in L^p(\Omega \times V \times]0,\tau[)\ , \quad p \in]1,\infty[, && (2.9)\\
u_0 &\in L^p(\Omega \times V)\ , \qquad\quad p \in]1,\infty[. && (2.10)
\end{aligned}
$$

Dann besitzt das Problem (2.1)-(2.3) mit $g = 0$ eine eindeutige Lösung (im schwachen Sinne) u in dem Raum $\tilde{W}_p$. Es gilt

$$u \in \mathcal{C}([0,\tau]\,;\, L^p(\Omega \times V)). \tag{2.11}$$

Ist weiter u_0 so gegeben, daß zudem

$$\zeta \cdot \nabla u_0 \in L^p(\Omega \times V) \quad \text{und} \quad u_0|_{\Gamma_-} = 0 \tag{2.12}$$

(Konsistenzbedingung) erfüllt sind und ist $q > 0$ gegeben, so daß gilt

$$q \in \mathcal{C}^1([0,\tau]\,;\, L^p(\Omega \times V)), \tag{2.13}$$

dann ist u sogar starke Lösung und wir haben

$$u \in \mathcal{C}^1([0,\tau]\,;\, L^p(\Omega \times V)), \tag{2.14}$$

$$\zeta \cdot \nabla u \in \mathcal{C}^0([0,\tau]\,;\, L^p(\Omega \times V)), \tag{2.15}$$

$$u(t)|_{\Gamma_-} = 0 \quad \forall\, t \in [0,\tau]. \tag{2.16}$$

Falls $q \geq 0$ und $u_0 \geq 0$, so ist auch $u \geq 0$.

Wie in Dautray und Lions weiter ausgeführt wird, gilt auch für den Fall inhomogener Randbedingung

$$u|_{\Gamma_-} = g \in L^p(\Gamma_-\,,\, |\zeta \cdot \nu|\, d\gamma d\mu dt) \tag{2.17}$$

die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung (im schwachen Sinne) von (2.1)-(2.3). Zum Beweis werden Spursätze verwendet, die z.B. von Cessenat [40], [41] bereitgestellt werden.
Falls g, u_0 und q positiv sind, so ist auch die Lösung u des inhomogenen Problems positiv.

Anmerkung: Aus dem Satz geht hervor, daß das direkte homogene Transportproblem -im Gegensatz etwa zum Diffusions- oder Wärmeleitungsproblem- keinen regularisierenden Effekt hat. Selbst in dem Fall, daß die Anfangsverteilung u_0 $\mathcal{C}^\infty$ ist, aber nicht auf Γ_- verschwindet (d.h. die Konsistenzbedingung (2.12) nicht erfüllt ist), wird $u(t)$ im allgemeinen unstetig sein. Analoge Aussagen gelten für das inhomogene Problem.

Anmerkung: Analoge Aussagen gelten auch für das *adjungierte homogene Transportproblem*

$$\Big(\frac{\partial u}{\partial t} - \zeta \cdot \nabla u + a(x,\zeta)u\Big)(x,\zeta,t) \qquad (2.18)$$

$$= \int_V f(x,\zeta,\zeta')\, u(x,\zeta',t)\, d\mu(\zeta') + q(x,\zeta,t),$$

mit der Randbedingung

$$u(x,\zeta,t) = g(x,\zeta,t) \quad \text{auf} \quad \Gamma_+ \qquad (2.19)$$

und der Anfangsbedingung

$$u(x,\zeta,0) = u_0(x,\zeta) \quad \text{in} \quad \Omega \times V, \qquad (2.20)$$

mit $g \equiv 0$ sowie für das entsprechende inhomogene Problem mit $g \neq 0$ (vgl. Dautray und Lions [51] oder Case und Zweifel [38]).

Uns wird die adjungierte Transportgleichung (in einer Form mit invertierter Zeitrichtung $t \to -t$) bei der Behandlung des inversen Transportproblems wieder begegnen. Sie bildet die Grundlage für den Algorithmus, den wir als *Rücktransport-Algorithmus* bezeichnen werden. Der Grund für diese Bezeichnung wird dort klarer werden. Wir wollen die Betrachtung hier abschließen mit der Bemerkung, daß auch für die entsprechenden *stationären Transportprobleme* Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen existieren und verweisen dazu einfach auf die genannte Literatur (Dautray und Lions [51] bzw. Case und Zweifel [38]).

2.2 Eindeutigkeit des Inversen Transportproblems

Wir orientieren uns im wesentlichen an Choulli und Stefanov [47].
Sei V eine offene Menge im $\mathbf{R}^3$ und

$$\sigma_p(x,\zeta') := \int_V f(x,\zeta',\zeta)\, d\zeta. \tag{2.21}$$

σ_p gibt also die Anzahl von Teilchen an, die von einem aus der Richtung ζ' kommenden Teilchen bei einem Stoß am Ort x produziert werden.

In Anlehnung an Reed und Simon [160] bezeichnen wir ein Paar (a,f) als *zulässig*, falls die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:

$$\begin{aligned}
&(i) && 0 \le a \in L^\infty(\mathbf{R}^3 \times V). && (2.22)\\
&(ii) && 0 \le f(x,\zeta',.) \in L_1(V) \quad \text{für fast alle} && (2.23)\\
& && (x,\zeta') \in \mathbf{R}^3 \times V, \quad \text{und} \quad \sigma_p \in L^\infty(\mathbf{R}^3 \times V). &&\\
&(iii) && \text{Es gibt eine offene beschränkte Menge } \Omega \subset \mathbf{R}^3 \text{ derart,} && (2.24)\\
& && \text{daß } f(x,\zeta',\zeta) \text{ und } a(x,\zeta) \text{ für } x \notin \Omega \text{ verschwinden.} &&
\end{aligned}$$

Wir wollen nun den sogenannten *Albedo-Operator der Transportgleichung* definieren. Alternative Definitionen wurden z.B. von Larsen [98] oder Arianfar und Emamirad [11] gegeben.
Sei Ω eine konvexe Menge im $\mathbf{R}^3$ mit $\mathcal{C}^1$-glattem Rand. Die Mengen $\tilde{\Gamma}_\pm$ seien gegeben durch

$$\tilde{\Gamma}_\pm = \{ (x,\zeta) \in \partial\Omega \times V\,, \quad \pm\nu(x)\cdot\zeta > 0 \}.$$

Auf $\tilde{\Gamma}_\pm$ betrachten wir das Maß $d\xi = |\nu(x)\cdot\zeta| d\mu(x) d\zeta$, wobei $d\mu(x)$ das entsprechende Maß auf $\partial\Omega$ ist.
Wir untersuchen das folgende Problem: Finde eine Funktion $u(x,\zeta,t)$ mit

$$(\frac{\partial}{\partial t} - T)u = 0 \quad \text{in } \mathbf{R} \times \Omega \times V, \tag{2.25}$$

$$u|_{\mathbf{R}\times\tilde{\Gamma}_-} = g, \tag{2.26}$$

$$u|_{t\ll 0} = 0, \tag{2.27}$$

wobei $T := -\zeta\cdot\nabla - a(x,\zeta) + \int_V f(x,\zeta',\zeta)\,.\,d\zeta'$ als Differentialoperator in $\Omega\times V$ aufgefaßt wird, und $g \in L^1_c(\mathbf{R},\, L^1(\Gamma_-, d\xi))$ eine integrierbare Funktion von $\mathbf{R}$ nach $L^1(\Gamma_-, d\xi)$ mit kompaktem Träger ist. Das Problem (2.25)-(2.27) besitzt eine eindeutige Lösung in $\mathcal{C}(\mathbf{R},\, L^1(\Omega\times V))$, vgl. dazu z.B. den vorangegangenen Abschnitt.

Sei $L^1_{loc}(\mathbb{R}; L^1(\tilde{\Gamma}_+, d\xi))$ der Raum aller lokal integrierbarer Funktionen von $\mathbb{R}$ nach $L^1(\tilde{\Gamma}_+, d\xi)$. Dann definieren wir den *Albedo-Operator* $\mathcal{A}$ durch

$$\mathcal{A} \,:\, L^1_c(\mathbb{R},\, L^1(\tilde{\Gamma}_-, d\xi)) \;\rightarrow\; L^1_{loc}(\mathbb{R},\, L^1(\tilde{\Gamma}_+, d\xi)), \tag{2.28}$$

$$\mathcal{A}g \;=\; u|_{\mathbb{R}\times\tilde{\Gamma}_+}, \tag{2.29}$$

wobei u (2.25)-(2.27) löst. Der Operator $\mathcal{A}$ bildet somit alle denkbaren Randbedingungen g aus (2.26) auf den jeweils dazugehörigen ausfallenden Fluß $u|_{\mathbb{R}\times\tilde{\Gamma}_+}$ ab, welcher der Messung zugänglich ist und natürlich entscheidend von der in Ω vorhandenen Parameterverteilung $a(x,\zeta)$ und $f(x,\zeta',\zeta)$ abhängt. Wir können somit auch schreiben

$$\mathcal{A} \;=\; \mathcal{A}(a,f),$$

und suchen bei der Behandlung inverser Probleme gewissermaßen die Umkehrung $a \;=\; a(\mathcal{A})$, $f \;=\; f(\mathcal{A})$ bei bekanntem Operator $\mathcal{A}$. (K. Dressler hat dies beispielsweise für den Fall einer Ortsdimension durchgeführt, vgl. [55],[56],[57].)

Der Operator $\mathcal{A}$ kann allgemeiner für Funktionen $g \in L^1(\mathbb{R} \times \tilde{\Gamma}_-,\, dtd\xi)$ mit $g = 0$ für $t \ll 0$ definiert werden. Vgl. z.B. Choulli und Stefanov [47]. Wir formulieren nun den entscheidenden *Eindeutigkeitssatz des Inversen Transportproblems* von Choulli und Stefanov [47]:

Satz. *Seien (a,f) und $(\hat{a},\hat{f})$ zwei zulässige Paare mit von ζ unabhängigen a,$\hat{a}$. Weiter sei Ω irgendeine offene beschränkte Menge mit $\mathcal{C}^1$-glattem Rand und mit der Eigenschaft, daß $a, \hat{a}, f, \hat{f}$ außerhalb von $\bar{\Omega}$ verschwinden. Wenn die zugehörigen Albedo-Operatoren $\mathcal{A}$, $\hat{\mathcal{A}}$ auf $\partial\Omega$ übereinstimmen, so gilt schon $a = \hat{a}$, $f = \hat{f}$.*

Zum Beweis dieses Satzes verwenden Choulli und Stefanov wesentlich die singuläre Struktur der Fundamentallösung der Transportgleichung. Diese wurde auch von V. Antyufeev und A. Bondarenko [29], [10] aufgezeigt und berechnet. Sie liefert nicht nur ein probates Mittel, Existenz- und Eindeutigkeit des Inversen Problems zu zeigen, sondern läßt sich unter gewissen Bedingungen auch konstruktiv zur Bestimmung verschiedener Koeffizienten heranziehen. Wir werden dies in dem nachfolgenden Kapitel näher erläutern (Abschnitt 3.7). Eine der einschränkenden Bedingungen scheint wohl die

Forderung zu sein, daß das Medium nur schwach streuend ist. Bei zu starker Streuung wird die singuläre Struktur in den Messungen praktisch komplett vom Rauschen überdeckt und ist somit nicht verwendbar (vgl. hierzu den Abschnitt 2.6).

2.3 Neumannreihe und Integraldarstellung

Sowohl für das direkte als auch für das inverse Transportproblem können Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen über die entsprechende Integraldarstellung gezeigt werden. Im Falle des direkten Transportproblems beschreiten z.B. Case und Zweifel [38] und Papanicolaou [146], [147] diesen Weg. Im Falle des inversen Transportproblems möchten wir hier insbesondere Prilepko und Volkov [158] nennen, da deren Ergebnisse am ehesten für uns relevant sind.

Wir beschreiben im folgenden zunächst den von Case und Zweifel eingeschlagenen Weg und gehen im Anschluß daran kurz auf den dazu sehr ähnlichen Zugang zum Inversen Problem von Prilepko und Volkov ein.

Zunächst überführen wir die Transportgleichung (2.1)-(2.3) mittels Integration entlang der Charakteristiken (bzw. mittels der Methode der Greenschen Funktion, vgl. [38]) in die *Integraldarstellung der linearen Transportgleichung*

$$
\begin{aligned}
u(x,\zeta,t) \;=\; Q(x,\zeta,t) \;+\; \int_0^t \int_V f[x-\zeta(t-t'),\zeta',\zeta] \,\cdot \qquad\qquad (2.30) \\
\cdot\, u(x-\zeta(t-t'),\zeta,t') \,\exp\Big\{-\int_{t'}^t a[x-\zeta(t-t''),\zeta]\,dt''\Big\}\, d\mu(\zeta')dt'
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
Q(x,\zeta,t) \;=\; u(x-\zeta t,\zeta,0)\,\exp\Big\{-\int_0^t a[x-\zeta(t-t'),\zeta]\,dt'\Big\} \qquad\qquad (2.31) \\
+\int_0^t q(x-\zeta(t-t'),\zeta,t')\,\exp\Big\{-\int_{t'}^t a[x-\zeta(t-t''),\zeta]\,dt''\Big\}\,dt'.
\end{aligned}
$$

Wir denken uns dabei eine evtl. vorhandene nichtverschwindende Randbedingung (2.3) durch eine entsprechende Oberflächenquelle ersetzt,

$$q_s(x_s, \zeta, t) \;:=\; |\zeta \cdot \nu(x_s)|\, g(x_s, \zeta, t)\, \delta(z_\nu(x_s)),$$

wobei z_ν eine (lokale) Koordinate darstellt, welche im Punkt $x_s \in \partial\Omega$ senkrecht auf $\partial\Omega$ steht (vgl. Case und Zweifel [38]). x_s entspricht dabei auf der linken Seite der Gleichung einem Punkt im $\mathbb{R}^3$, während es auf der rechten Seite als derselbe Punkt, diesmal jedoch als Element von $\partial\Omega$, aufgefaßt wird. Eine solche Zuordnung von Randbedingungen zu Oberflächenquellen (und umgekehrt) ist nach Case und Zweifel immer möglich. $q_s(x_s, \zeta, t)$ sei bereits in $q(x, \zeta, t)$ von (2.31) enthalten.
Wir schreiben nun Gleichung (2.30) in Operatorform

$$u(x, \zeta, t) \;=\; Q(x, \zeta, t) \;+\; Ku(x, \zeta, t), \tag{2.32}$$

wobei K durch den Integralausdruck in (2.30) gegeben ist. (2.30) bzw. (2.32) stellen eine Volterrasche Integralgleichung zweiter Art dar. Ein Standardverfahren zur Lösung einer solchen Gleichung ist die Entwicklung von u in seine *Neumannreihe*

$$u(x, \zeta, t) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} u_k(x, \zeta, t), \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned} u_0(x, \zeta, t) \;&:=\; Q(x, \zeta, t), \\ u_k(x, \zeta, t) \;&:=\; Ku_{k-1}(x, \zeta, t) \quad \text{für } k \geq 1. \end{aligned}$$

Physikalisch beschreibt für den Fall der Transportgleichung der k-te Term $u_k(x, \zeta, t)$ gerade die Flußdichte der genau k-fach gestreuten Teilchen. Bei der Diskussion der *Born-Approximation für die Transportgleichung* werden wir ausführlich auf diese Interpretation der einzelnen Summanden zu sprechen kommen. Es zeigt sich, daß die Bornreihe der Transportgleichung gerade ihrer Neumannreihe entspricht. Die erste und zweite Born-Approximation beschreiben gerade die Dynamik der maximal ein- bzw. zweifach gestreuten Teilchen. (Konvergenz der Neumannreihe zieht somit übrigens auch Konvergenz der Bornreihe nach sich!)

Case und Zweifel zeigen für verschiedene Situationen die Konvergenz dieser Neumannreihe und damit Existenz und Eindeutigkeit der Lösung des zugehörigen Transportproblems. (Dies insbesondere auch für Quellen, die in einer oder mehrerer ihrer Variablen deltaförmig im Diracschen Sinne sind.)

Anmerkung: An dieser Stelle sei auch der Artikel von A. Wenzel [186] erwähnt, in welchem Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen der linearen Boltzmanngleichung in einem Raum von Distributionen gezeigt wird. Auch in Choulli und Stefanov [47] wird Existenz und Eindeutigkeit singulärer (distributiver) Lösungen der Transportgleichung bei deltaförmiger Quelle gezeigt. Sie verwenden dazu das *Duhamelsche Prinzip*, welches in diesem Fall -analog zur Neumannreihe- die singulären Anteile der entsprechenden Lösung (also die ungestreuten und einmal gestreuten Teilchen) aussondert. (Vgl. dazu auch den nachfolgenden Abschnitt 2.4.)

Prilepko und Volkov untersuchen in [158] die lineare Transportgleichung mit zeitabhängigen Koeffizienten

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \zeta \cdot \nabla u(x,\zeta,t) + a(x,\zeta,t)\, u \;=\; \int_V f(x,\zeta',\zeta,t)\, u\, d\zeta' + q(x,\zeta,t)$$

mit (2.2) und (2.3) entsprechenden Rand- und Anfangsbedingungen. Sie gehen der Frage nach, ob bei zusätzlicher Kenntnis von

$$u(x,\zeta,t)|_{\Gamma_+} \;=\; h(x,\zeta,t)$$

einer der (jeweils als unbekannt angesehenen) Koeffizienten $a(x,\zeta,t)$ oder $f(x,\zeta,t)$ -zusätzlich zu dem Fluß $u(x,\zeta,t)$- eindeutig rekonstruiert werden kann. (Das sogenannte „Inverse Problem“ der Transportgleichung. Es lassen sich andere Inverse Probleme konstruieren durch Vorgabe anderer zusätzlicher Informationen oder anderer Rand- und Anfangsbedingungen. Vgl. dazu etwa [155],[156],[157].)
Genauer betrachten sie die beiden Probleme

Problem 1: Sei $a(x,\zeta,t) \;=\; \alpha(x,\zeta)\,\beta(x,\zeta,t) + \gamma(x,\zeta,t)$ mit bekannten β,γ und unbekanntem α. Kann α eindeutig rekonstruiert werden, wenn man alle anderen Parameter bis auf den Fluß u selbst kennt?

Problem 2: Sei $f(x,\zeta,\zeta',t) = \phi(x,\zeta)\,\chi(x,\zeta,\zeta',t) + \psi(x,\zeta,\zeta',t)$ mit bekannten χ,ψ und unbekanntem ϕ. Kann ϕ eindeutig rekonstruiert werden, wenn man alle anderen Parameter bis auf den Fluß u selbst kennt?

Zur Beantwortung dieser Fragen überführen sie die Transportgleichung in jeweils zwei unterschiedliche Integralgleichungen, von denen eine der oben angegebenen für den Fluß u (2.30) entspricht, und die andere eine Gleichung zweiter Art in dem jeweils zu rekonstruierenden Parameter darstellt. Anwendung eines geeigneten Fixpunktsatzes auf dieses System von Integralgleichungen liefert dann unter gewissen Bedingungen Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen der beiden oben formulierten Probleme.

Wir wollen den interessierten Leser direkt auf diese Arbeit [158] verweisen, da die konkrete Darstellung der Räume und Voraussetzungen hier zu weit führen würde. Besonders interessant ist dieser Ansatz aus dem Grunde, da er keine besonderen Voraussetzungen an die singuläre Struktur der Lösung der Transportgleichung zu stellen scheint. Es muß bedacht werden, daß bei konkreten Rekonstruktionsverfahren im Rahmen der Lasertomographie diese singulären Strukturen praktisch nicht verwendet werden können, da sie schlicht und einfach unterhalb der heutigen Meßmöglichkeiten liegen und zudem wohl vollkommen von gewöhnlich vorhandenem Rauschen verdeckt werden. (Vgl. hierzu auch die Erläuterungen im Abschnitt 2.6).

2.4 Inverses Transportproblem und Singuläre Strukturen

In diesem Abschnitt soll versucht werden, gewisse Gemeinsamkeiten einiger Arbeiten aufzuzeigen, die sich alle mit dem Inversen Problem der Transportgleichung befassen und sich dabei der Eigenschaft der Transportgleichung bedienen, in den Quellen oder Randbedingungen vorhandene singuläre Strukturen in das Medium hinein- bzw. durch das Medium hindurchzutragen und dadurch Informationen aus klar definierten Teilmengen des Mediums der Messung zugänglich zu machen. Unter *Singulären Strukturen* wollen wir dabei Unstetigkeiten irgendwelcher Art verstehen, die etwa über die Gestalt der Quellterme oder der Anfangs- oder Randbedingungen in das Medium hineingetragen werden. Dies können z.B. stark singuläre Terme wie die von uns zumeist verwendeten Diracschen Delta-Distributionen sein, oder aber auch nur Unstetigkeiten in der ersten Ableitung einer sonst stetig differenzierbaren Funktion.

E.W. Larsen weist bereits 1975 auf die singuläre Struktur von Lösungen der linearen (stationären) Transportgleichung in $L^1(\Omega \times V)$ hin [98]. Er konstruiert explizit für den Fall, daß Quelle q und Randbedingung g ebenfalls aus L^1 sind, Ausdrücke für die singulären Anteile der entsprechenden Lösungen. Zudem weist er darauf hin, daß diese Terme von den ungestreuten und gegebenenfalls einmal gestreuten Teilchen herrühren. Für den verbleibenden

Anteil in der Lösung weist er nach, daß er durch *reguläre* Integralausdrücke mittels Greenscher Funktionen dargestellt werden kann. Zudem zeigt er, gewissermaßen als Korollar, daß der Albedo-Operator

$$A: \; u|_{\Gamma_-} \;\to\; u|_{\Gamma_+}$$

bei Abwesenheit flußunabhängiger Quellen q für endliche, unterkritische Gebiete einen linearen beschränkten, i.a. nicht kompakten, Operator in L^1 darstellt. Für nähere Einzelheiten vgl. [98].

In [103] betrachtet er ein ähnliches Problem, diesmal jedoch mit einer Dirac-deltaförmigen Quelle in Ort und Geschwindigkeit (also distributiv). Er zeigt, daß der ungestreute Anteil der Lösung auf einer Geraden konzentriert ist (und somit ebenfalls eine Deltafunktion darstellt), und daß auch der einmal gestreute Anteil der Lösung noch deltaförmig im Winkel $\theta = \zeta/|\zeta|$ ist. Der Anteil der mehr als einmal gestreuten Teilchen ist dagegen regulär. Larsen leitet für einen speziellen Fall explizite Ausdrücke für die von einem Detektor registierten einmal gestreuten Teilchen her. Er weist aber auch auf Probleme hin, die sich bei der Realisierung von deltaförmigen Quellen und von „ideal kollimierten“ Detektoren unweigerlich einstellen. Für Einzelheiten verweisen wir auch hier auf den Originalartikel [103].

Gewissermaßen das Analogon zum soeben genannten Vorgehen von E.W. Larsen in der planparallelen Geometrie des *radiative transfer* stellt wohl die Arbeit [175] von C.E. Siewert dar. Im sogenannten „radiative transfer“ wird der Strahlungstransport in den äußeren Schichten von Sternen durch eine lineare Transportgleichung z.B. der folgenden Form beschrieben (vgl. [46],[177],[38],[175],[116]-[121])

$$\Big(\frac{1}{c}\,\frac{\partial}{\partial t} + \mu\,\frac{\partial}{\partial z} + a\Big)\, u(z,\mu,\varphi,t) \tag{2.34}$$

$$= \int_0^{2\pi}\int_{-1}^{+1} f(\theta\cdot\theta')\, u(z,\mu',\varphi',t)\, d\varphi'\, d\mu' \;+\; q(z,\mu,\varphi,t)$$

für $0 \le z \le z_0$. Dabei ist $c = |\zeta|$ eine feste Geschwindigkeit und, wenn ϑ den Winkel zur z-Achse und φ den entsprechenden Azimuthwinkel bezeichnen, so ist $\mu = \cos\vartheta$ und $\theta = (\vartheta, \varphi)$.

Siewert betrachtet nun eine stationäre Variante von (2.34) (die wir hier nicht explizit angeben möchten) mit einem Dirac-deltaförmigen Quellterm q in allen auftretenden Variablen. Er berechnet explizit die entsprechenden singulären Anteile der Lösungsfunktion und gibt eine physikalische Interpretation des Ergebnisses. (Natürlich die uns bereits bekannte!) Für Einzelheiten verweisen wir wieder auf den Originalartikel [175].

Eine zeitabhängige Variante von (2.34) bei planparalleler Geometrie untersuchen Ying, Wu und Sun in [189]. Sie nutzen die singuläre Struktur der entsprechenden Fundamentallösung aus, um simultan zwei Koeffizienten der Gleichung zu rekonstruieren. Dabei verwenden sie eine dem „layer stripping" ähnliche Methode, d.h. sie schreiten schichtenweise in den zu untersuchenden Halbraum vor und nutzen in dem zugrundeliegenden Optimierungsansatz die bei einer gegebenen Schicht bereits rekonstruierte Information aus den äußeren Schichten mit aus. Als sehr hilfreich erweist sich dabei die zeitaufgelöste Messung, da aus ihr gerade diese „Tiefeninformation" (d.h. die Zuordnung der Meßwerte zu den einzelnen Schichten) gewonnen werden kann.

Wir wenden uns nun wieder den echt dreidimensionalen Problemen zu.
D.S. Anikonov, I.V.Prokhorov, V.G. Nazarov und A.E. Kovtanyuk (vgl. z.B. [6]) untersuchen die stationäre Transportgleichung

$$\theta \cdot \nabla u(x,\theta) + a(x)\, u(x,\theta) - \int_{S^2} f(x,\theta \cdot \theta')\, u(x,\theta')\, d\theta' \;=\; q(x,\theta) \qquad (2.35)$$

in einem beschränkten konvexen Gebiet mit $\mathcal{C}^1$-glattem Rand und mit der Randbedingung

$$u|_{\tilde{\Gamma}_-} \;=\; g(x,\theta). \qquad (2.36)$$

Sie setzen voraus, daß $a(x)$ stückweise stetig, $f(x,\theta \cdot \theta')$ nicht negativ und beschränkt ist und daß der Quellterm $q(x,\theta)$ nicht negativ, beschränkt und stetig in allen seinen Argumenten ist. Dann betrachten sie das folgende *Inverse Problem:* Gegeben sei die *zusätzliche Information*

$$u|_{\tilde{\Gamma}_+} \;=\; h(x,\theta), \qquad (2.37)$$

und $g(x,\theta)$ erfülle die folgenden Bedingungen:

1.) $g(x,\theta)$ ist positiv, stetig und beschränkt.
2.) Ist (ϑ,φ) die Polardarstellung von θ, wobei ϑ den Winkel zur z-Achse bezeichnet, so gelte die folgende *Sprungbedingung*

$$\lim_{\vartheta \to \frac{\pi}{2}} \frac{\partial g}{\partial \vartheta}(x,\theta(\vartheta,\varphi)) \;=\; \infty, \qquad (2.38)$$

bei ansonsten stetigem $\frac{\partial g}{\partial \vartheta}$. Kann dann der Koeffizient $a(x)$ ohne Kenntnis von b und q, also allein aus g und h, rekonstruiert werden?

Die genannten Autoren geben dazu explizite Formeln zur Rekonstruktion von $a(x)$ an, die auf die Invertierung der Radontransformation von $a(x)$ entlang der Ebene $\{\vartheta = \frac{\pi}{2}\}$ hinauslaufen und welche praktisch den Durchgang der Singularität in der Randbedingung (2.38) durch das Medium beschreiben. Insofern nutzen sie ganz erheblich die Meßbarkeit singulärer Strukturen der Lösung der Transportgleichung aus. Wir verweisen im Einzelnen auf die Arbeiten [4]-[8],[93],[136],[159]. Einen entsprechenden Eindeutigkeitsbeweis findet man in [5],[6].

Ebenfalls die Stationäre Transportgleichung (2.35) untersuchen V. Antyufeev und A. Bondarenko in [10], allerdings mit einer speziellen Form des Streuterms,

$$\theta \cdot \nabla u(x,\theta) + a(x)\, u(x,\theta) - b(x) \int_{S^2} \eta(x, \theta \cdot \theta')\, u(x,\theta')\, d\theta' \;=\; q(x,\theta). \quad (2.39)$$

Eine Lösung von (2.39) mit

$$q(x,\theta) \;=\; \delta(x - x_0)\, \delta(\theta - \theta_0) \quad (2.40)$$

und verschwindender Randbedingung nennen sie *„Fundamentallösung der Stationären Transportgleichung"*. Wie bereits oben schon dargelegt wurde, ist bei einer Quelle der Form (2.40) zu erwarten, daß die entsprechende Lösung der Transportgleichung stark singuläre Anteile besitzt. Antyufeev und Bondarenko berechnen diese Anteile explizit und zeigen, daß der verbleibende „reguläre" Anteil aus $L^1(S^2)$ in der Variablen θ ist. In [31] gibt Bondarenko Abschätzungen für die einzelnen so erhaltenen Terme an. Für Einzelheiten verweisen wir auf die genannten Artikel.

Bondarenko und Antyufeev geben auch ein konstruktives Verfahren an, wie diese singulären Anteile in der Fundamentallösung dazu ausgenutzt werden können, verschiedene Koeffizienten der Transportgleichung zu rekonstruieren. Sie verwenden dazu eine spezielle Detektoranordnung, um diese singulären Anteile aussondern zu können. Hier gilt allerdings, ebenso wie in den vorhergenannten Ansätzen, daß eine nur schwache Streuung in dem Medium vorausgesetzt werden muß, um die Bestimmung dieser singulären Anteile experimentell einigermaßen verläßlich durchführen zu können. Auch für den zeitabhängigen Fall gibt Bondarenko Ausdrücke für die singulären Anteile der Fundamentallösung an, vgl. hierzu [29].

Abschließend wollen wir noch bemerken, daß auch Choulli und Stefanov in ihrem Beweis der Eindeutigkeit der Bestimmung von a und f aus dem Albedo-Operator $\mathcal{A}$ die singuläre Struktur der Fundamentallösung der zeitabhängigen Transportgleichung berechnen und wesentlich in dem genannten Beweis ausnutzen. Sie geben -ähnlich zu Antyufeev und Bondarenko- explizite Formeln an, wie daraus die einzelnen Koeffizienten bestimmt werden können. Speziell für die Bestimmung des Dämpfungskoeffizienten $a(x)$ bedeuten diese nichts anderes als die Invertierung einer Röntgentransformation für die aus den ungestreuten Teilchen erhaltenen Meßwerte. Für nähere Einzelheiten vgl. die entsprechenden Artikel [47],[10].

2.5 Streustrahlung in der Tomographie

Wir wollen hier zunächst (am Beispiel von CT und SPECT) einen kleinen Einblick in die Behandlung von Streustrahlung in den klassischen Bereichen der Tomographie geben, ohne dabei allzusehr in die Tiefe zu gehen. Für Einzelheiten verweisen wir auf die jeweils angegebene Literatur.

Der Versuch, die in einem Objekt gestreute Strahlung für die Tomographie nutzbar zu machen, ist im Prinzip nicht neu. Barrett und Swindell behandeln in ihrem Buch [23] einige solche Ansätze und geben dazu Referenzen an (z. B. [95]). Auch in den „klassischen“ Anwendungsbereichen von Transportmodellen in der Tomographie (wie z.B. der *Computertomographie*, kurz CT, und der *Single Photon Emission Computed Tomography*, kurz SPECT) tritt in der Praxis Streustrahlung auf. Deren Anteil ist gegenüber dem zur Bildrekonstruktion verwendeten Anteil ungestreuter Strahlung zumeist relativ gering, so daß sie in vielen Fällen einfach vernachlässigt wird. In der Regel wird hier versucht, diese gestreute Strahlung mit Hilfe technischer Kunstgriffe (etwa durch Energiefilterung) vor oder während der Messung von der ungestreuten Strahlung zu separieren und somit ihren Einfluß auf die Messung gering zu halten. Da dies oftmals schwierig ist (und zumeist nicht vollkommen gelingt), wird zuweilen versucht, ihren Beitrag auf die Messung mit Hilfe geeigneter Modelle abzuschätzen und vor der Weiterverarbeitung in diesen Meßwerten eine sogenannte „Streukorrektur“ durchzuführen. Die Güte der Streukorrektur hängt dabei selbstverständlich von der Genauigkeit des zur Schätzung verwendeten Modells ab. Für diese und ähnliche Fragestellungen verweisen wir auf die Literatur, etwa [176],[140],[33],[139].

Es ist auch in den „klassischen“ Bereichen der Tomographie möglich, die aus der Streustrahlung stammende Information nicht einfach nur als Störung zu betrachten, sondern sie geschickt in den Rekonstruktionsmechanismus mit einzubauen. Ein Beispiel im Rahmen der Computertomographie bietet der (oben bereits erwähnte) Ansatz von A. Bondarenko. In [10] stellt er gemeinsam mit V. Antyufeev eine Methode vor, die aus dem Anteil der einfach gestreuten Strahlung gewonnene Information zur Rekonstruktion eines weiteren Parameters (Dämpfung und Streukoeffizient) zu verwenden (vgl. [30]). Wir werden auf diesen Ansatz in der vorliegenden Arbeit noch genauer eingehen. A. Welch hat im Rahmen von SPECT die Möglichkeit untersucht, Streustrahlung in den zur Rekonstruktion verwendeten Rückprojektionsalgorithmus mit einzubauen (vgl. [185]). In [2] und [161] werden analytische Ausdrücke zur Beschreibung der Streustrahlung in SPECT hergeleitet. In diesem Zusammenhang wird angenommen (vgl. [185]), daß der größte Anteil (etwa 80-90 Prozent) der in einem gebräuchlichen mit einem Energiefenster versehenen Detektor registrierten Streustrahlung vor ihrer Detektion lediglich ein einziges mal gestreut worden ist. Zur Beschreibung einfach gestreuter Strahlung im Rahmen der Transportgleichung wird in der vorliegenden Arbeit ein analytischer Ausdruck hergeleitet. Hierfür lassen sich zudem schnell konvergierende Vorwärtslöser der Transportgleichung für den Einsatz in iterativen Verfahren (wie beispielsweise dem ebenfalls in dieser Arbeit vorgestellten Rücktransportalgorithmus) herleiten (vgl. etwa [108], „Iteration on the Scattering Source").

2.6 Photonentransport in der Lasertomographie

Ein völlig neuer Anwendungsbereich von Transportmodellen in der Tomographie ist etwa in den letzten zehn Jahren mit der *Licht-* oder *Lasertomographie* entstanden. Bei diesem Verfahren wird Laserlicht im nahen Infrarotbereich zur Durchleuchtung menschlichen Gewebes verwendet. Die Bezeichnung für diese Problemstellung ist noch nicht einheitlich. F.A. Grünbaum hat entsprechend dem von ihm entwickelten Modell den Namen „Diffusionstomographie" geprägt, vgl. dazu den folgenden Abschnitt. Andere Autoren sprechen dagegen auch von „optischer" oder „NIR-Tomographie" („Near Infra-Red Tomography"), vgl. etwa [125], [45], [16]. Die Photonen vergleichsweise geringer Energie werden hier bei ihrem Durchgang durch das Gewebe innerhalb einer Weglänge von einem Zentimeter etwa an die hundert Mal gestreut (bei einer vergleichsweise geringen Absorptionswahrscheinlichkeit). Ein kleines Gedankenexperiment zeigt, daß somit die Wahrscheinlichkeit für ein Photon, bei der Durchleuchtung eines Objektes mit fünf Zentimetern

Durchmesser ungestreut in den gegenüberliegenden Detektor zu gelangen, bei etwa e^{-500} liegt! (Vgl. Abschnitt 5.3) Der relative Anteil von Photonen, die ein solches Objekt ungestreut durchqueren, ist verglichen mit der detektierten Streustrahlung also verschwindend gering und von dem zusätzlich vorhandenen Detektorrauschen wohl kaum noch zu unterscheiden. Will man also Tomographie mit diesem NIR-Laserlicht betreiben, so wird man die „klassisch bewährten“ Methoden der Rekonstruktion (wie z. B. die Rückprojektionsmethode der Computertomographie) nicht ohne weiteres übernehmen können.

Im Prinzip bietet es sich hier nun an, statt der Approximation der Lösung des Vorwärtsproblems durch den ungestreuten Anteil der Strahlung die komplette Lösung der entsprechenden Transportgleichung zu verwenden. Dieses Modell wird im allgemeinen als korrekt angesehen und kann beliebig genau durch numerische Methoden approximiert werden. Wir werden in dieser Arbeit diesen Weg beschreiten. Ob es letztlich wirklich notwendig sein wird, derart genau zu rechnen, wird vom Erfolg der Konkurrenzmethoden wie z.B. der Diffusionsapproximation abhängen. Eine solche mathematische Beschreibung der physikalischen Vorgänge mit Hilfe der allgemeinen Transportgleichung hat allerdings den großen Nachteil, daß letztere relativ komplex ist (sie beinhaltet in ihrer zeitabhängigen Version sechs Freiheitsgrade) und ihre numerische Behandlung somit nicht nur ausgesprochen speicherintensiv, sondern vor allem auch sehr zeitaufwendig ist. Aus diesem Grunde haben sich sehr früh sogenannte Diffusionsmethoden durchgesetzt, die alle den Durchgang von Photonen durch ein streuendes Medium mit Hilfe einer Diffusionsgleichung beschreiben. Diese stellt eine Näherung an die allgemeine Transportgleichung für den Fall starker Streuung dar. Wir werden eine ausführliche Herleitung dieser Approximation an die Transportgleichung in Kapitel 4 liefern.

Als Standardreferenz zur Behandlung des inversen Transportproblems in der optischen Tomographie mit Hilfe der Diffusionsapproximation wollen wir hier die Artikel der Gruppe am UCL London um D. T. Delpy und S. Arridge angeben ([13]-[18],[172]). Einen guten Überblick über die momentane Forschung bieten die Tagungsbände [42]-[45],[125]. Dort findet der Leser eine Vielzahl weiterer Referenzen.

Es ist noch nicht geklärt, ob diese Diffusionsmodelle zur Behandlung des optischen Tomographieproblems in allen Fällen ausreichend sind. Sicherlich wird bei der Untersuchung optisch sehr heterogener Objekte (wie z. B. dem Kopf eines Neugeborenen) die zumindest teilweise Verwendung der Strahlungstransportgleichung oder vergleichbarer richtungsauflösender Methoden große Vorteile bringen. Hier sind also auch Hybridmethoden denkbar, die sowohl die Diffusions- als auch die Transportgleichung verwenden. Im Rahmen der Numerik der Transportgleichung sind solche Mischmodelle nicht unbekannt, vgl. z.B. die diffusionsbeschleunigten Verfahren („synthetic acceleration“) [108]. Wir werden in dieser Arbeit vorrangig die reinen Transportalgorithmen untersuchen. Diese können auch im Falle ausgesprochen heterogener Objekte ohne Probleme eingesetzt werden.

2.7 Das Modell von Grünbaum

Ein sehr interessantes statistisches Modell für das inverse Transportproblem in der optischen Tomographie hat 1989 F.A. Grünbaum vorgeschlagen und später gemeinsam mit J.P. Zubelli und S.K. Patch weiterentwickelt. In diesem Modell wird beispielsweise ein rechteckiges Grundgebiet -ähnlich dem in Kapitel 5, Abb.2, gezeigten- untersucht und dazu in kleine Rechtecke (Pixel) unterteilt. Photonen werden an einer der Seiten dieses Grundgebietes in ein solches Randpixel injiziert und können von dort ausgehend schrittweise von einem Pixel zu einem beliebigen benachbarten weiterziehen so lange, bis sie in einem dieser Pixel absorbiert werden, oder aber das Gebiet wieder über eines der Randpixel verlassen. Je nach Definition des Zustandsraumes kann dieser Wanderungsprozeß als Einschritt- oder als Zweischritt-Markovprozeß beschrieben werden. Das Eigentümliche gegenüber den bislang beschriebenen Transportmodellen ist die Tatsache, daß in diesem Modell die in den einzelnen Pixeln stattfindenden physikalischen Vorgänge zunächst einmal überhaupt keine Rolle spielen. Betrachtet werden vielmehr lediglich die Übergangswahrscheinlichkeiten für die Photonen von jedem dieser Pixel zu einem beliebigen benachbarten Pixel, jeweils in Abhängigkeit der Position des zuvor durchwanderten Pixels. Es wird dabei angenommen, daß diese einzelnen Übergangswahrscheinlichkeiten nicht von der Startposition des Photons abhängen und sich auch zeitlich nicht ändern. In diesem Fall kann das betrachtete inverse Problem folgendermaßen formuliert werden: Gegeben sei die Abbildung, welche jedem Randpixel P_j und jedem weiteren Randpixel P_k die Wahrscheinlichkeit zuordnet, daß ein in P_j injiziertes Photon das Gebiet über das Pixel P_k wieder verläßt. Können daraus dann sämtliche Übergangs- und Absorptionswahrscheinlichkeiten innerhalb des Gebietes eindeutig bestimmt werden? Man vermutet, daß dies bei hinreichend großer „Komplexität“ der genannten Abbildung (d.h. bei Vorhandensein hinreichend vieler voneinander unabhängiger Daten) zumindest im Prinzip möglich sein „sollte“ (vgl. dazu F.A. Grünbaum [66]). S.K. Patch und F.A. Grünbaum untersuchen diese und ähnliche Fragen in [66]-[69], [148], [149]. Zur Vereinfachung der dabei auftretenden nichtlinearen Gleichungen verwenden sie Konzepte der algebraischen Geometrie (Plücker-Einbettungen, Graßmann-Identitäten). F.A. Grünbaum und J.P. Zubelli berechnen in [68] Konditionszahlen für einige explizite Beispiele. Noch offen scheint bislang die Frage zu sein, in welcher Art die so definierten Übergangswahrscheinlichkeiten mit den tatsächlich ablaufenden physikalischen Prozessen verknüpft sind. (Vgl. dazu F.A. Grünbaum [64], [65]).

Kapitel 3

Die Born-Approximation der Transportgleichung

Im folgenden sollen einige Rechnungen zur Bornapproximation der Transportgleichung vorgestellt werden. In dem Manuskript [133] wurden bereits die Fälle durchgerechnet, in denen isotrop, d.h. nicht richtungsabhängig, in ein Medium eingestrahlt wird. Mit einer ähnlichen Methode sollen hier ergänzend die ebenfalls interessanten Fälle gerichteter Einstrahlung untersucht werden, die z.B. in der Lasertomographie und der Röntgentomographie mit Streuung eine Rolle spielen. Es werden explizite Darstellungen der ersten und zweiten Born-Approximationen angegeben und mit den Darstellungen der entsprechenden Beiträge der Fundamentallösung der Transportgleichung bei A. Bondarenko [31] verglichen. Es stellt sich heraus, daß die beiden Darstellungen grundsätzlich äquivalent zueinander sind, wenngleich die Herleitungen sich unterscheiden. Zudem werden die zahlreichen Sonderfälle kleinerer Raumdimension durchgerechnet, die bei speziellen Quelle-Detektor-Geometrien auftreten. Wir werden sowohl die entsprechenden zeitabhängigen, als auch die zeitstationären Fälle betrachten. Abschließend wird kurz auf die Situation bei isotroper Einstrahlung eingegangen.

3.1 Vorbereitungen

Sei $\varphi \in \mathcal{D} := \mathcal{C}_0^\infty(\mathbf{R}^3 \times S^2 \times \mathbf{R})$ eine Testfunktion im Raum aller unendlich oft differenzierbarer Funktionen auf dem $\mathbf{R}^3 \times S^2 \times \mathbf{R}$ mit kompaktem Träger. Die Distributionen $\delta(t-t_0)$, $\delta(x-x_0)$ und $\delta(\theta-\theta_0)$ seien wie üblich definiert durch

$$\langle \delta(t-t_0)\,,\,\varphi\rangle \;=\; \int_{S^2}\int_{\mathbf{R}^3} \varphi(x,\theta,t_0)\,dxd\theta\,, \tag{1.1}$$

$$\langle \delta(x-x_0)\,,\,\varphi\rangle \;=\; \int_{S^2}\int_{\mathbf{R}} \varphi(x_0,\theta,t)\,dtd\theta\,, \tag{1.2}$$

$$\langle \delta(\theta-\theta_0)\,,\,\varphi\rangle \;=\; \int_{\mathbf{R}^3}\int_{\mathbf{R}} \varphi(x,\theta_0,t)\,dtdx\,. \tag{1.3}$$

Analoge Darstellungen gelten für Produkte dieser Ausdrücke, z.B.

$$\langle \delta(t-t_0)\delta(x-x_0)\delta(\theta-\theta_0)\,,\,\varphi\rangle \;=\; \varphi(x_0,\theta_0,t_0). \tag{1.4}$$

Bei der Behandlung der Stationären Transportgleichung verwenden wir entsprechend Testfunktionen $\tilde{\varphi} \in \tilde{\mathcal{D}} := \mathcal{C}_0^\infty(\mathbf{R}^3 \times S^2)$ aller unendlich oft differenzierbarer Funktionen auf $\mathbf{R}^3 \times S^2$ mit kompaktem Träger. Alle folgenden Definitionen übertragen sich auf diesen Fall in offensichtlicher Weise.
Seien nun $\theta, \theta' \in S^2$ gegeben. Mit $E_\theta^\perp(x)$ bezeichnen wir die Projektion von x auf die zu θ orthogonale Ebene $\theta^\perp$:

$$x \;=\; r\theta + z \text{ mit } z \in \theta^\perp \quad\Rightarrow\quad E_\theta^\perp(x) \;=\; z.$$

Für $\theta \neq \pm\theta'$ sei $E_{\theta,\theta'}^\perp(x)$ entsprechend die Projektion von x auf den eindimensionalen Unterraum des $\mathbf{R}^3$, welcher zu der durch θ und θ' aufgespannten Ebene senkrecht steht, also

$$x \;=\; r\theta + s\theta' + z' \text{ mit } z' \in \theta^\perp \cap \theta'^\perp \quad\Rightarrow\quad E_{\theta,\theta'}^\perp(x) \;=\; z'.$$

Wir definieren nun die Distribution $\delta(E_\theta^\perp(x))$ durch

$$\langle \delta(E_\theta^\perp(x))\,,\,\varphi\rangle \;:=\; \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\mathbf{R}} \varphi(\tau\theta,\tilde{\theta},t)\,d\tau d\tilde{\theta}dt. \tag{1.5}$$

Hierbei ist $d\tau$ das Linienelement in $\mathbf{R}\theta$. Der Träger dieser Distribution besteht also aus einem vierdimensionalen Unterraum $\mathbf{R} \times S^2 \times \mathbf{R}\theta$ im sechsdimensionalen (um die Zeitdimension erweiterten) Phasenraum $\mathbf{R}^3 \times S^2 \times \mathbf{R}$.

Analoges gilt für den stationären Fall $\tilde{\varphi} \in \tilde{\mathcal{D}}$. Wir werden in diesem Kapitel durchweg vom Phasenraum schlechthin sprechen, wobei dieser im zeitabhängigen Fall jeweils um die Zeitdimension erweitert gedacht werden soll.
Weiter definieren wir für $\theta \neq \pm\theta'$ die Distribution $\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x))$ durch

$$\langle \delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x))\,,\,\varphi\rangle \;:=\; \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\Sigma} \varphi(x,\tilde{\theta},t)\,d\sigma d\tilde{\theta} dt. \tag{1.6}$$

Dabei ist $d\sigma$ das Flächenelement in der durch θ, θ' aufgespannten Ebene Σ

$$\Sigma \;=\; \Sigma(\theta,\theta') \;:=\; \{\, x \in \mathbf{R}^3\,,\, x = r\theta + s\theta'\,,\, r,s \in \mathbf{R}\,\}. \tag{1.7}$$

Das Flächenelement ist z.B. bei der in (1.7) verwendeten Darstellung $x = r\theta + s\theta'$ gegeben durch

$$d\sigma \;=\; |\theta \times \theta'|\, drds. \tag{1.8}$$

Der Träger von $\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x))$ ist ein fünfdimensionaler Unterraum $\mathbf{R} \times S^2 \times \Sigma$ im sechsdimensionalen Phasenraum $\mathbf{R} \times S^2 \times \mathbf{R}^3$.
Allgemeiner definieren wir die affinen Unterräume

$$\begin{aligned} \Sigma(x_0,\theta,\theta') \;&:=\; x_0 \,+\, \Sigma(\theta,\theta') \\ &=\; \{\, x \in \mathbf{R}^3\,,\, x = x_0 + r\theta + s\theta'\,,\, r,s \in \mathbf{R}\}. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Sie spielen eine wichtige Rolle in der Beschreibung einfach gestreuter Strahlung. Diese Hyperebenen sind die Träger der Distributionen $\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x - x_0))$, welche durch Translation aus den $\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x))$ hervorgehen. Ihre Flächenelemente können ebenfalls durch (1.8) beschrieben werden. Mit (1.8) bekommt (1.6) die explizite Darstellung

$$\langle \delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x))\,,\,\varphi\rangle \;=\; \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}} \varphi(r\theta + s\theta', \tilde{\theta}, t)\,|\theta \times \theta'|\, drdsd\tilde{\theta}dt. \tag{1.10}$$

Entsprechendes gilt für $\langle \delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(x - x_0))\,,\,\varphi\rangle$.

Wir wollen nun zwei für das Folgende nützliche Formeln herleiten.
a.) Sei für $\theta \neq \theta'$

$$y \;=\; r\theta + s\theta' + z \quad \text{mit} \quad z \in \theta^{\perp} \cap \theta'^{\perp}. \tag{1.11}$$

Dann gilt

$$\langle \frac{1}{|\theta \times \theta'|}\,\delta(r)\,\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(y))\,,\,\varphi\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}} \frac{1}{|\theta \times \theta'|}\,\delta(r)\,\varphi(r\theta + s\theta',\tilde{\theta},t)\,|\theta \times \theta'|\,drdsd\tilde{\theta}dt \\
&= \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\mathbf{R}} \varphi(s\theta',\tilde{\theta},t)\,dsd\tilde{\theta}dt \\
&= \langle \delta(E^{\perp}_{\theta'}(y))\,,\,\varphi\rangle,
\end{aligned}$$

also

$$\delta(E^{\perp}_{\theta'}(y)) \;=\; \frac{1}{|\theta \times \theta'|}\,\delta(r)\,\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta'}(y)). \tag{1.12}$$

b.) Haben wir die Darstellung

$$y \;=\; r\theta + z \quad \text{mit} \quad z \in \theta^{\perp} \tag{1.13}$$

gegeben, so folgt

$$\begin{aligned}
\langle \delta(r)\,\delta(E^{\perp}_{\theta}(y))\,,\,\varphi\rangle &= \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2}\int_{\mathbf{R}} \delta(r)\,\varphi(r\theta,\tilde{\theta},t)\,drd\tilde{\theta}dt \\
&= \int_{\mathbf{R}}\int_{S^2} \varphi(0,\tilde{\theta},t)\,d\tilde{\theta}dt \;=\; \langle \delta(y)\,,\,\varphi\rangle,
\end{aligned}$$

also

$$\delta(y) \;=\; \delta(r)\,\delta(E^{\perp}_{\theta}(y)). \tag{1.14}$$

Ähnlich beweist man die bekannten Darstellungen

$$g(t)\delta(t) \;=\; g(0)\delta(t), \tag{1.15}$$

$$\int_{t_0}^{t_1} g(t)dt \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} h(t_1 - t)h(t - t_0)g(t)dt, \tag{1.16}$$

wobei g irgendeine stetige Funktion und h die Heavisidefunktion ist.

Anmerkung: Die in den Formeln a.) und b.) auftretenden Produkte deltaförmiger Ausdrücke (Distributionen bzw. verallgemeinerte Funktionen) machen Sinn im Rahmen der Theorie der Distributionen und der verallgemeinerten Funktionen. Insbesondere sind sie wohldefiniert. Alle hier verwendeten Eigenschaften und Rechenregeln für Distributionen findet der Leser in dem Werk [61] von I.M. Gelfand und G.E. Shilow oder in [143] von V. Palamodov.

Wir wollen im folgenden immer

$$\mathrm{supp}\,(b) \subset \Omega$$

voraussetzen, um nicht in einen Widerspruch zu den geforderten Randbedingungen zu kommen. Ω sei dabei ein kompaktes, konvexes Gebiet im $\mathbf{R}^3$ mit Rand $\partial\Omega$. Weiter definieren wir die Mengen $\Gamma_\pm$ durch

$$\Gamma_\pm := \{ (x,\theta,t) \in \partial\Omega \times S^2 \times \mathbb{R}_+ \,,\ \pm\nu(x)\cdot\theta > 0 \},$$

wobei $\nu(x)$ die äußere Normale auf $\partial\Omega$ im Punkt x bezeichnet. Die entsprechenden Mengen für den stationären Fall bezeichnen wir wieder mit $\tilde{\Gamma}_\pm$.
Wir gehen im folgenden immer davon aus, daß das System $(a, b\eta)$ *zulässig* im oben definierten Sinne ist. (Vgl. Abschnitt 2.2.)

3.2 Die Born-Approximation der Lasertomographie

3.2.1 Die zeitabhängige Transportgleichung

Wir betrachten die Transportgleichung in der folgenden Form:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \theta\cdot\nabla u(x,\theta,t) + a(x)u(x,\theta,t) = b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta' + q(x,\theta,t) \tag{2.17}$$

in $\Omega \times S^2 \times \mathbf{R}_+$ mit den Anfangs- und Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(x,\theta,0) &= 0 \quad \text{in} \quad \Omega\times S^{n-1}, \\ u(x,\theta,t) &= 0 \quad \text{auf} \quad \Gamma_-. \end{aligned} \tag{2.18}$$

Als Quelle $q(x,\theta,t)$ stellen wir uns einen Laser vor, der zur Zeit $t = 0$ einen kurzen Lichtblitz am Ort $x_0 \in \partial\Omega$ in Richtung θ_0 in das Medium schickt,

$$q(x,\theta,t) \;=\; \delta(t)\delta(x-x_0)\delta(\theta-\theta_0). \tag{2.19}$$

Dies entspricht einem Standardfall der Lasertomographie. Die Verteilung $u(x,\theta,t)$ stellt bei dieser Quellform eine Distribution dar.

Wir wollen das Problem in der Bornschen Näherung lösen. *Dazu betrachten wir zunächst den Fall $b(x) = 0$.*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \theta \cdot \nabla u(x,\theta,t) + a(x)u(x,\theta,t) = q(x,\theta,t) \tag{2.20}$$

$$u(x,\theta,0) = 0 \quad \text{in} \quad \Omega \times S^{n-1}, \tag{2.21}$$

$$u(x,\theta,t) = 0 \quad \text{auf} \quad \Gamma_- \,. \tag{2.22}$$

Mit Hilfe des Charakteristikenverfahrens führt man diese Differentialgleichung in die folgende *Integralgleichung* über (Vgl. Case und Zweifel [38], Bell und Glasstone [24])

$$\begin{aligned} u(x,\theta,t) \;&=\; \exp\{-\int_0^t a(x+\theta(\tau-t))d\tau\}\, u(x-\theta t,\theta,0) \qquad (2.23)\\ &+\int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a(x+\theta(\tau-t)d\tau\}\, q(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta,\tau^{'})d\tau^{'}. \end{aligned}$$

Der erste der beiden Summanden in (2.23) gibt den Beitrag zu $u(x,\theta,t)$ aus den Anfangsdaten an. Dieser ist hier identisch Null, da $u(x,\theta,0) = 0$ auf $\Omega \times S^{n-1}$ vorausgesetzt wurde. Der zweite Summand gibt den Beitrag aus dem Quellterm q an. Dieser wird uns im folgenden besonders interessieren.

3.2.2 Der ungestreute Anteil

Wir betrachten nun (2.23) für den Fall

$$q(x,\theta,t) \;=\; \delta(t)\delta(x-x_0)\delta(\theta-\theta_0) \tag{2.24}$$

und berücksichtigen, daß nach (2.18) $u(x,\theta,0) = 0$ gilt. Nach (2.23) folgt dann für $u(x,\theta,t)$ die Darstellung:

$$u(x,\theta,t) \;=\; \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a(x+\theta(\tau-t))d\tau\}\, q(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta,\tau^{'})d\tau^{'}. \tag{2.25}$$

Sei $x - x_0 = r\theta + z$ mit $z \in \theta^\perp$. (2.25) nimmt dann die Form an:

$$
\begin{aligned}
u(x,\theta,t) &= \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a(x_0 + \theta(r+\tau-t)+z)d\tau\} \qquad (2.26)\\
&\quad \delta(r\theta + z + \theta(\tau' - t))\,\delta(\theta-\theta_0)\,\delta(\tau')\,d\tau'.
\end{aligned}
$$

Es gilt $\delta((r+\tau'-t)\theta + z) = \delta(r+\tau'-t)\,\delta(z)$ nach Formel (1.14).
Weiter gelten: $g(\tau')\,\delta(\tau') = g(0)\,\delta(\tau')$,

$$
\begin{aligned}
\int g(\tau')\,\delta(r+\tau'-t)\,\delta(\tau')\,d\tau' &= \int g(0)\,\delta(r+\tau'-t)\,\delta(\tau')\,d\tau',\\
\int_0^t g(\tau')\,d\tau' &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(\tau')\,h(t-\tau')\,g(\tau')\,d\tau'.
\end{aligned}
$$

Wendet man dies auf (2.26) an, so folgt

$$
\begin{aligned}
u(x,\theta,t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_0^t a(x_0 + \theta(r+\tau-t)+z)d\tau\}\\
&\quad \delta(r+\tau'-t)\,\delta(z)\,\delta(\theta-\theta_0)\,\delta(\tau')\,h(\tau')\,h(t-\tau')\,d\tau'\\
&= \exp\{-\int_0^t a(x_0 + \theta(r+\tau-t))d\tau\}\\
&\qquad \delta(r-t)\,\delta(z)\,\delta(\theta-\theta_0)\,h(t-r)\,h(r).
\end{aligned}
$$

Beachten wir nun, daß $z = E_\theta^\perp(x-x_0)$, $E_\theta^\perp$ = Projektion auf den Orthogonalraum zu θ, und $r = (x-x_0)\cdot\theta$ ist, und nennen wir die Lösung $u_0(x,\theta,t)$, so haben wir gezeigt

$$
\begin{aligned}
u_0(x,\theta,t) &= \exp\{-\int_0^t a(x+\theta(\tau-t))d\tau\}\,\delta((x-x_0)\cdot\theta - t) \quad (2.27)\\
&\quad \delta(E_\theta^\perp(x-x_0))\,\delta(\theta-\theta_0)\,h((x-x_0)\cdot\theta).
\end{aligned}
$$

Dies ist gerade die von der Quelle ungestreut bei (x,θ,t) ankommende Strahlung.
Führen wir die Schreibweise

$$
\rho(x,y) := \exp\{-\int_x^y a(\tilde{x})d\tilde{x}\}
$$

ein, wobei das Integral über die Verbindungsstrecke von x nach y zu nehmen ist, so folgt mit (2.27) das

Lemma. *Die ungestreute Strahlung* $u_0(x, \theta, t)$ *von (2.17)-(2.19) ist gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_0(x,\theta,t) &= \rho(x_0,x)\,\delta((x-x_0)\cdot\theta - t)\,\delta(E_\theta^\perp(x-x_0)) \\ &\quad \delta(\theta-\theta_0)\,h((x-x_0)\cdot\theta). \end{aligned} \tag{2.28}$$

Träger dieser Distribution ist eine eindimensionale Mannigfaltigkeit im sechsdimensionalen Phasenraum.

3.2.3 Die Bornsche Näherung

Wir betrachten wieder die Transportgleichung (2.17)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \theta\cdot\nabla u(x,\theta,t) + a(x)u(x,\theta,t) = b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'})u(x,\theta^{'},t)d\theta^{'} + q(x,\theta,t). \tag{2.29}$$

(2.29) ist formal von derselben Gestalt wie (2.20), wobei jetzt das Streuintegral ebenfalls als zum Quellterm zugehörig aufgefaßt wird. Für die Lösung von (2.29) können wir die dort hergeleitete Darstellung (2.23) bzw. (2.25) übernehmen, diesmal jedoch mit $q(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta,\tau^{'})$ ersetzt durch

$$q(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta,\tau^{'}) + b(x+\theta(\tau^{'}-t))\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'})u(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta^{'},\tau^{'})d\theta^{'}.$$

Setzen wir dies in (2.25) ein, so liefert der erste Summand des Quellterms wieder $u_0(x,\theta,t)$, während der zweite eine implizite Form besitzt

$$\begin{aligned} u(x,\theta,t) &= u_0(x,\theta,t) + \int_0^t \exp\{-\int_{\tau^{'}}^t a(x-\theta(\tau-t))d\tau\} \\ &\quad \left[b(x+\theta(\tau^{'}-t))\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'})u(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta^{'},\tau^{'})d\theta^{'}\right] d\tau^{'}. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Die *Bornsche Näherung* besteht nun darin, in diesem zweiten Summanden statt des unbekannten $u(\ldots)$ die bekannte Funktion $u_0(\ldots)$ einzusetzen. Dies entspricht der Berücksichtigung von genau einmal gestreuter Strahlung durch den Integralausdruck. Zudem wird der ungestreute Anteil natürlich durch den ersten Summanden $u_0(x, \theta, t)$ mit berücksichtigt.

Anmerkung: Man kann diese Bornsche Näherung auch als die Summe der ersten zwei Terme einer Entwicklung der Lösung der Transportgleichung in eine Neumann-Reihe auffassen. Insofern entspricht sie genau den ersten beiden singulären Termen der Fundamentallösung für die Transportgleichung, wie sie z.B. von A. Bondarenko hergeleitet wurde. Allerdings ist die Art der Darstellung hier etwas verschieden von der bei Bondarenko.

Wir berechnen nun diesen einmal gestreuten Anteil (bezeichnen wir ihn mit $u_1(x, \theta, t)$), indem wir $u_0(x + \theta(\tau' - t), \theta', \tau')$ aus (2.27), (2.28) in (2.30) einsetzen.

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) \;=\; & \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a(x+\theta(\tau-t))d\tau\}\, b(x+\theta(\tau'-t)) \\ & \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')\exp\{-\int_0^{\tau'} a(x+\theta(\tau'-t)+\theta'(\tau-\tau'))d\tau\} \\ & \delta(E_{\theta'}^{\perp}(x+\theta(\tau'-t)-x_0)) \\ & \delta(\theta'-\theta_0)\,\delta(\tau'-(x+\theta(\tau'-t)-x_0)\cdot\theta') \\ & h((x+\theta(\tau'-t)-x_0)\cdot\theta')\; d\theta'\, d\tau'. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Setze nun $x - x_0 = r\theta + r'\theta' + z'$, und $E_{\theta,\theta'}^{\perp}$ sei die Projektion auf den eindimensionalen Orthogonalraum zu dem von θ, θ' aufgespannten Unterraum (also $z' = E_{\theta,\theta'}^{\perp}(x - x_0)$). Dann gelten:

$$\begin{aligned} (i) \quad \delta(E_{\theta'}^{\perp}(x+\theta(\tau'-t)-x_0)) &= \delta(E_{\theta'}^{\perp}((r+\tau'-t)\theta + r'\theta' + z')) \\ &= \frac{1}{|\theta'\times\theta|}\delta(r+\tau'-t)\delta(z') \end{aligned}$$

nach der Formel (1.12), wobei $|\theta' \times \theta| = |\sin\angle(\theta, \theta')|$ den Betrag der Projektion von θ auf den zweidimensionalen Orthogonalraum $E_{\theta'}^{\perp}$ von θ' angibt.

$$\begin{aligned} (ii) \quad \delta[(x+\theta(\tau'-t)-x_0)\cdot\theta'-\tau'] &= \delta[(r+\tau'-t)\theta\cdot\theta' + r'\theta'\cdot\theta' - \tau'] \\ &= \delta[(r+\tau'-t)\theta\cdot\theta' + r' - \tau'], \end{aligned}$$

und analog
$(iii) \quad h((x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0)\cdot\theta^{'}) = h((r+\tau^{'}-t)\theta\cdot\theta^{'}+r^{'})$.
Wir setzen hier zunächst einmal $\theta \neq \pm\theta^{'}$ voraus. Der Fall $\theta = \pm\theta^{'}$ wird weiter unten gesondert behandelt.

Führen wir die Winkelintegration durch, so bekommen wir für $\theta^{'}$ wegen des Faktors $\delta(\theta^{'}-\theta_0)$ nur einen Beitrag bei $\theta^{'}=\theta_0$. Führen wir zudem die $\tau^{'}$-Integration durch, so ist wegen des $\delta(\tau^{'}+r-t)$ nur der Beitrag bei $\tau^{'}=t-r$ von Null verschieden. Außerdem wird wieder die Identität

$$\int_0^t g(\tau^{'})d\tau^{'} = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\tau^{'})h(\tau^{'})h(t-\tau^{'})d\tau^{'}$$

verwendet. Damit bekommen wir aus (2.31),(i),(ii) und (iii)

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \exp\{-\int_{t-r}^{t} a(x+\theta(\tau-t))d\tau\}b(x+\theta r) \\ &\quad \eta(\theta\cdot\theta_0)\exp\{-\int_0^{t-r} a(x-\theta r+\theta_0(\tau+r-t))d\tau\} \\ &\quad \delta(r^{'}+r-t)\,\frac{1}{|\theta\times\theta_0|}\,\delta(z^{'})\,h(t-r^{'}-r)\,h(r^{'}) \\ &\quad h(t-r)\,h(r). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Hier ist nun also $x-x_0 = r\theta+r^{'}\theta_0+z^{'}$ mit $z^{'} = E^{\perp}_{\theta,\theta_0}(x-x_0)$ zu setzen. Der singuläre Term $\delta(r^{'}+r-t)$ liefert uns eine Laufzeitbedingung. $\delta(z^{'})$ schränkt die Betrachtung auf die durch θ,θ_0 aufgespannte Ebene ein (vgl. Abb.1).
Setzen wir also $x_1 = x-\theta r = x_0+r^{'}\theta_0$, wobei r und $r^{'}$ gerade so zu wählen sind, daß $r+r^{'}=t$ erfüllt ist, so erhalten wir die Darstellung

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \exp\{-\int_{x_1}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\exp\{-\int_{x_0}^{x_1} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\,b(x_1)\,\eta(\theta\cdot\theta_0) \\ &\quad \delta(r^{'}+r-t)\,\frac{\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta_0}(x-x_0))}{|\theta\times\theta_0|}\,h(t-r-r^{'})\,h(r^{'}) \\ &\quad h(t-r)\,h(r). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Damit gilt das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (2.17)-(2.19) ist für $\theta \neq \pm\theta_0$ gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \rho(x_0,x_1)\,\rho(x_1,x)\,b(x_1)\,\eta(\theta\cdot\theta_0)\,\frac{\delta(E^{\perp}_{\theta,\theta_0}(x-x_0))}{|\theta\times\theta_0|} \\ &\quad \delta(r^{'}+r-t)\,h(r^{'})\,h(t-r)\,h(r) \end{aligned} \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned} \textit{mit} \qquad x &= x_0 + r^{'}\theta_0 + r\theta + z^{'} \\ \textit{und} \qquad x_1 &= x_0 + r^{'}\theta_0. \end{aligned}$$

Träger dieser Distribution ist eine vierdimensionale Mannigfaltigkeit im sechsdimensionalen Phasenraum.

Die Heaviside-Funktionen liefern nur dann einen Beitrag, falls

$$r, r^{'} \geq 0, \quad r \leq t, \quad r + r^{'} \leq t,$$

was den physikalischen Gegebenheiten entspricht.
Wir fassen die bisherigen Ergebnisse zusammen in dem

Satz. *Die Born-Approximation von (2.17)-(2.19) lautet für $\theta \neq \pm\theta_0$*

$$u_B(x,\theta,t;x_0,\theta_0) = u_0(x,\theta,t) + u_1(x,\theta,t),$$

wobei $u_0(x,\theta,t)$ durch (2.28) und $u_1(x,\theta,t)$ durch (2.34) gegeben sind.

Die Größen r und $r^{'}$ lassen sich explizit aus x_0 und θ_0 berechnen: Durch Projektion der Darstellung $x - x_0 = r^{'}\theta_0 + r\theta + z^{'}$ auf θ und θ_0 folgt wegen $z^{'} \perp \{\theta, \theta_0\}$ durch einfaches Auflösen nach r und $r^{'}$:

$$\begin{aligned} r^{'} &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-x_0)\cdot[\theta_0 - \gamma\theta]\}, \\ r &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-x_0)\cdot[\theta - \gamma\theta_0]\}, \end{aligned} \tag{2.35}$$

mit $\gamma = \theta\cdot\theta_0$. (Vgl. auch Abschnitt 3.6.)

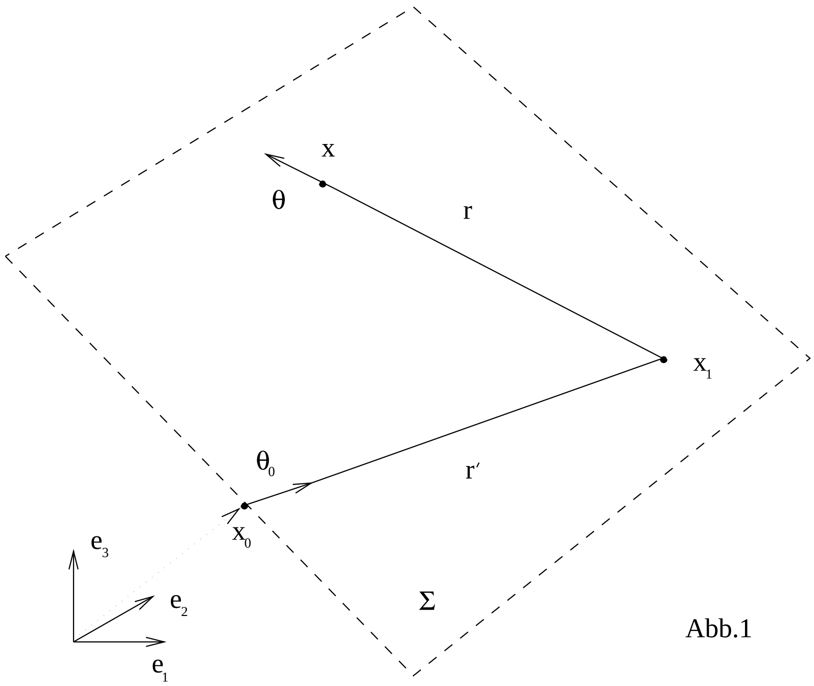


Abb.1

3.2.4 Der kollineare Fall $\theta = \pm\theta_0$

Wir behandeln zunächst den Fall $\theta = \theta_0$.
Setze dazu $x - x_0 = r\theta_0 + z'$. Es gilt

$$\begin{aligned}
&\delta(\theta' - \theta_0)\,\delta(E^{\perp}_{\theta'}(x + \theta(\tau' - t) - x_0)) \\
&\qquad = \delta(\theta' - \theta_0)\,\delta(E^{\perp}_{\theta_0}((r + r' - t)\theta_0 + z')) \\
&\qquad = \delta(\theta' - \theta_0)\,\delta(z'),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\delta(\theta' - \theta_0)\,\delta((x + \theta(\tau' - t) - x_0)\cdot\theta' - \tau') \\
&\qquad = \delta(\theta' - \theta_0)\,\delta((\tau' - t + r)\theta_0\cdot\theta_0 - \tau') \\
&\qquad = \delta(\theta' - \theta_0)\,\delta(r - t),
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
\delta(\theta' - \theta_0)\, h(\tau' - (x + \theta(\tau' - t) - x_0) \cdot \theta') &= \delta(\theta' - \theta_0)\, h(t - r), \\
\delta(\theta' - \theta_0)\, h((x + \theta(\tau' - t) - x_0) \cdot \theta') &= \delta(\theta' - \theta_0)\, h(r + \tau' - t).
\end{aligned}$$

Damit folgt aus (2.31) für $\theta = \theta_0$

$$\begin{aligned}
u_1(x, \theta, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{\tau'}^{t} a(x + \theta_0(\tau - t))d\tau\} \\
&\quad \exp\{-\int_{0}^{\tau'} a(x + \theta_0(\tau - t))d\tau\}\, b(x + \theta_0(\tau' - t))\, \eta(1) \\
&\quad \delta(r - t)\, \delta(z')\, h(r - \tau' - t)\, h(t - r)\, h(\tau')\, h(t - \tau')\ d\tau' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{0}^{t} a(x + \theta_0(\tau - t))d\tau\}\, b(x + \theta_0(\tau' - t))\, \eta(1) \\
&\quad\quad h((x - x_0) \cdot \theta_0)\, \delta(E_{\theta_0}^{\perp}(x - x_0))\, \delta((x - x_0) \cdot \theta_0 - t) \\
&\quad\quad h(\tau')\, h(t - \tau')\, d\tau', \qquad (2.36)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{mit}\quad \delta(r - t) &= \delta((x - x_0) \cdot \theta_0 - t), \\
\delta(z') &= \delta(E_{\theta_0}^{\perp}(x - x_0)).
\end{aligned}$$

Der Term $h((x - x_0) \cdot \theta_0)$ ist aus physikalischen Gründen in die Darstellung mit aufgenommen worden, da der Alternativfall hier mit negativen Zeiten $t \leq 0$ einhergehen würde. (Dies folgt aus dem Term $\delta(r - t)$: Wegen $t \geq 0$ wird ein nicht verschwindender Wert nur für $r = (x - x_0) \cdot \theta_0 \geq 0$ geliefert.) Wir erhalten also für $\theta = \theta_0$ das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (2.17)-(2.19) ist für $\theta = \theta_0$ gegeben durch*

$$\begin{aligned}
u_1(x, \theta, t) &= \rho(x_0, x)\, (\int_0^x b(\tilde{x})d\tilde{x})\, \eta(1)\, h((x - x_0) \cdot \theta_0) \\
&\quad \delta(E_{\theta}^{\perp}(x - x_0))\, \delta((x - x_0) \cdot \theta_0 - t). \qquad (2.37)
\end{aligned}$$

Träger dieser Distribution ist eine dreidimensionale Mannigfaltigkeit im sechsdimensionalen Phasenraum.

Wir betrachten nun den Fall $\theta = -\theta_0$.
Wir setzen wieder $x - x_0 = r\theta_0 + z^{'}$ in (2.31) ein. Diesmal folgt mit

$$
\begin{aligned}
\delta(E^{\perp}_{\theta_0}((r+t-\tau^{'})\theta_0 + z^{'})) &= \delta(z^{'}), \\
\delta[(r+t-\tau^{'})\theta_0 \cdot \theta_0 - \tau^{'}] &= \delta(r+t-2\tau^{'})
\end{aligned}
$$

die Darstellung

$$
\begin{aligned}
u_1(x,\theta,t) &= \int_0^t \exp\{-\int_{\tau^{'}}^t a(x-\theta_0(\tau-t))d\tau\}\, b(x-\theta_0(\tau^{'}-t)) \\
&\quad \eta(-1)\exp\{-\int_0^{\tau^{'}} a(x-\theta_0(\tau^{'}-t)+\theta_0(\tau-\tau^{'}))d\tau\} \\
&\quad \delta[(r\theta_0+z^{'}-\theta_0(\tau^{'}-t))\cdot\theta_0-\tau^{'}]\,\delta(E^{\perp}_{\theta_0}(r\theta_0+z^{'}-\theta_0(\tau^{'}-t))) \\
&\quad h(\tau^{'}-(r\theta_0+z^{'}-\theta_0(\tau^{'}-t))\cdot\theta_0) \\
&\quad h((r\theta_0+z^{'}-\theta_0(\tau^{'}-t))\cdot\theta_0)\; d\theta^{'}d\tau^{'} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{\tau^{'}}^t a(x+\theta_0(t-\tau)d\tau\} \\
&\quad \exp\{-\int_0^{\tau^{'}} a(x+\theta_0(t+\tau-2\tau^{'}))d\tau\} b(x+\theta_0(t-\tau^{'}))\,\eta(-1) \\
&\quad \delta(r+t-2\tau^{'})\,\delta(z^{'})h(r+t-\tau^{'})\,h(\tau^{'})\,h(t-\tau^{'})\,d\tau^{'}.
\end{aligned}
$$

Ausführen der Integration über $\tau^{'}$ liefert dann schließlich

$$
\begin{aligned}
u_1(x,\theta,t) &= \exp\{-\int_{\frac{r+t}{2}}^t a(x+\theta_0(t-\tau)d\tau\}\exp\{-\int_0^{\frac{r+t}{2}} a(x+\theta_0(\tau-r))d\tau\} \\
&\quad b(x+\theta_0\frac{t-r}{2})\,\eta(-1)\,\delta(z^{'})\,h(\frac{r+t}{2})\,h(\frac{t-r}{2}), \qquad (2.38)
\end{aligned}
$$

mit $r = (x-x_0)\cdot\theta_0$ und $z^{'} = E^{\perp}_{\theta_0}(x-x_0)$.
Bezeichnen wir nun

$$
x_1 := x + \frac{(t-(x-x_0)\cdot\theta_0)}{2}\theta_0 = x + \frac{(t-r)}{2}\theta_0,
$$

so erhalten wir das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (2.17)-(2.19) ist für $\theta = -\theta_0$ gegeben durch*

$$
\begin{aligned}
u_1(x,\theta,t) &= \rho(x_0,x_1)\,\rho(x_1,x)\,b(x_1)\,\eta(-1) \qquad (2.39)\\
&\quad \delta(E_{\theta_0}^{\perp}(x-x_0))\,h(t+(x-x_0)\cdot\theta_0)\,h(t-(x-x_0)\cdot\theta_0).
\end{aligned}
$$

Träger dieser Distribution ist eine vierdimensionale Mannigfaltigkeit im sechsdimensionalen Phasenraum.

Dabei liegt x_1 nicht zwischen x_0 und x, d.h. die beiden Integrale können nicht zusammengefaßt werden! Zudem beachte man, daß diesmal keine Laufzeitbedingung mittels einer entsprechenden δ-Funktion auftritt, was daraus resultiert, daß bei gegebenem x und t sich immer ein Umkehrpunkt $x_1 := x + \frac{1}{2}(t - (x-x_0)\cdot\theta_0)\theta_0$ finden läßt, bei der die Flugzeit gerade „passend" ist.
Interessant ist es übrigens, sich einmal die beiden Möglichkeiten aufeinanderzu gerichteter Richtungen $\theta = -\theta_0$ zum einen und voneinander abgewendeter Richtungen $\theta = -\theta_0$ zum anderen vorzustellen, welche beide von der hier gegebenen Darstellung erfaßt werden. Im ersten Fall wird der Zielpunkt genau einmal passiert, bevor er erreicht wird, im zweiten Fall wird erst noch einmal der Quellpunkt durchlaufen, bevor das Teilchen dann bei x mit der korrekten Richtung θ eintrifft.
Für den kollinearen Fall erhalten wir somit den

Satz. *Für $\theta = \pm\theta_0$ lautet die Born-Approximation von (2.17)-(2.19)*

$$u_B(x,\theta,t;x_0,\theta_0) = u_0(x,\theta,t) + u_1(x,\theta,t),$$

wobei $u_0(x,\theta,t)$ durch (2.28) und $u_1(x,\theta,t)$ im Falle $\theta = \theta_0$ durch (2.37), im Falle $\theta = -\theta_0$ dagegen durch (2.39) gegeben sind.

3.3 Die Born-Approximation der Computertomographie

3.3.1 Die stationäre Transportgleichung

Hier stellen wir uns einen gerichteten Röntgenstrahl vor, der für eine hinreichend lange Zeit durch einen Körper geschickt wird. Nach einer kurzen Übergangsphase wird dieser stationär sein und wird sich somit durch die entsprechende stationäre Transportgleichung beschreiben lassen. (Dieses funktioniert natürlich ebenso mit einem kontinuierlichen Laserstrahl, der durch ein streuendes Medium gestrahlt wird.)
Wir betrachten also die stationäre Transportgleichung

$$\theta \cdot \nabla u(x,\theta) + a(x)u(x,\theta) = b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) u(x,\theta^{'}) d\theta^{'} + q(x,\theta) \qquad (3.1)$$

in $\Omega \times S^{n-1}$ mit der Randbedingung

$$u(x,\theta) = 0 \quad \text{auf} \quad \tilde{\Gamma}_{-}. \qquad (3.2)$$

Als Quelle geben wir vor

$$q(x,\theta) = \delta(x - x_0)\delta(\theta - \theta_0). \qquad (3.3)$$

Die zu (3.1), (3.2) zugehörige Integraldarstellung lautet für $b \equiv 0$

$$u(x,\theta) \;=\; \int_0^\infty q(x - s\theta, \theta) \exp\{-\int_{x-s\theta}^x a(\tilde{x}) d\tilde{x}\}\, ds. \qquad (3.4)$$

Mit (3.3) folgt

$$u(x,\theta) = \int_0^\infty \delta(x - s\theta - x_0)\delta(\theta - \theta_0) \exp\{-\int_s^0 a(x - \tau\theta) d\tau\}\, ds. \qquad (3.5)$$

Setzen wir wieder $x - x_0 = r\theta + z$ mit $z = E_\theta(x - x_0)$, $r = (x - x_0) \cdot \theta$, so bekommen wir

$$\begin{aligned} u(x,\theta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(s)\delta(r-s)\delta(z)\delta(\theta - \theta_0) \exp\{-\int_s^0 a(x - \tau\theta) d\tau\}\, ds \\ &= \delta(z)\delta(\theta \cdot \theta_0) \exp\{-\int_r^0 a(x - \tau\theta) d\tau\}\, h(r) \\ &= \delta(E_\theta^\perp(x - x_0))\delta(\theta - \theta_0) \exp\{-\int_{(x-x_0)\cdot\theta}^0 a(x - \tau\theta) d\tau\}\, h(r). \end{aligned}$$

Nennen wir diesen ungestreuten ($b \equiv 0$) Anteil $u_0(x,\theta)$, so haben wir also das

Lemma. *Die ungestreute Strahlung von (3.1)-(3.3) ist gegeben durch*

$$u_0(x,\theta) = \delta(E_\theta^\perp(x-x_0))\,\delta(\theta-\theta_0)\,h((x-x_0)\cdot\theta)\,\rho(x_0,x). \tag{3.6}$$

Träger dieser Distribution ist eine eindimensionale Mannigfaltigkeit im fünfdimensionalen Phasenraum.

3.3.2 Die Born-Approximation

Betrachte nun die allgemeine stationäre Transportgleichung (3.1) mit $q(x,\theta) = \delta(x-x_0)\delta(\theta-\theta_0)$ und fasse die gesamte rechte Seite formal wie schon im zeitabhängigen Fall als Quellterm auf. Mit (3.6) folgt dann

$$\begin{aligned} u(x,\theta) &= u_0(x,\theta) + \int_0^\infty \exp\{-\int_s^0 a(x-\tau\theta)d\tau\} \\ &\qquad b(x-s\theta)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta-\theta_0)u(x-s\theta,\theta')d\theta'\,ds. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Die Bornsche Näherung bekommen wir wieder dadurch, daß wir in dem Integralausdruck das unbekannte $u(x-s\theta,\theta')$ durch den ungestreuten Anteil $u_0(x-s\theta,\theta')$ ersetzen. Bezeichnen wir diesen neuen Integralterm mit $u_1(x,\theta)$, so gilt also

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) &= \int_0^\infty \exp\{-\int_s^0 a(x-\tau\theta)d\tau\}\,b(x-s\theta) \\ &\quad \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')\,\delta(E_{\theta'}^\perp(x-s\theta-x_0))\,\delta(\theta'-\theta_0)\,h((x-s\theta-x_0)\cdot\theta') \\ &\quad \exp\{-\int_{x_0}^{x-s\theta} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\,d\theta'\,ds. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Setze nun $x - x_0 = r\theta + r'\theta' + z'$ mit $z' = E_{\theta,\theta'}^\perp(x-x_0)$ = Projektion auf den zu θ,θ' orthogonalen Unterraum. *Wir setzen zunächst einmal wieder $\theta \neq \pm\theta'$ voraus und werden die Fälle $\theta = \pm\theta'$ gesondert betrachten.*

Dann schreibt sich (3.8) als

$$
\begin{aligned}
u_1(x,\theta) &= \int_0^\infty \exp\{-\int_s^0 a(x-\tau\theta)d\tau\}\, b(x-s\theta) \\
&\quad \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')\, \delta(E_{\theta'}^{\perp}((r-s)\theta + r'\theta' + z'))\, \delta(\theta'-\theta_0) \\
&\quad h(((r-s)\theta + r'\theta' + z')\cdot\theta')\, \exp\{-\int_{x_0}^{x-s\theta} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\, d\theta'\, ds. \\
&= \int_0^\infty \rho(x-s\theta,x)\, \rho(x_0,x-s\theta)\, b(x-s\theta)\, \eta(\theta\cdot\theta_0) \\
&\quad \delta(E_{\theta_0}^{\perp}((r-s)\theta + r'\theta_0 + z'))\, h((r-s)\theta\cdot\theta_0 + r')\, ds. \qquad (3.9)
\end{aligned}
$$

Wegen $|\theta\times\theta_0| \neq 0$ können wir nun Formel (1.12) auf den Delta-Ausdruck in (3.9) anwenden. Anschließende Integration über s liefert schließlich das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (3.1)-(3.3) ist für $\theta \neq \pm\theta_0$ gegeben durch*

$$
\begin{aligned}
u_1(x,\theta) &= \rho(x_0,x-r\theta)\, \rho(x-r\theta,x)\, b(x-r\theta) \\
&\quad \eta(\theta\cdot\theta_0)\, \frac{\delta(E_{\theta,\theta_0}^{\perp}(x-x_0))}{|\theta\times\theta_0|}\, h(r')\, h(r). \qquad (3.10)
\end{aligned}
$$

Träger dieser Distribution ist eine vierdimensionale Mannigfaltigkeit im fünfdimensionalen Phasenraum.

Auch hier gilt wieder

$$
\begin{aligned}
r' &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-x_0)\cdot[\theta_0-\gamma\theta]\}, \\
r &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-x_0)\cdot[\theta-\gamma\theta_0]\}, \\
\gamma &:= \theta\cdot\theta_0.
\end{aligned}
$$

Das gleiche Resultat hätten wir auch einfacher durch Integration von (2.33) über die Zeit t bekommen können. Insgesamt gilt also für die Born-Approximation der Stationären Transportgleichung der

Satz. *Die Born-Approximation von (3.1)-(3.3) lautet für* $\theta \neq \pm\theta_0$

$$u_B(x,\theta;x_0,\theta_0) = u_0(x,\theta) + u_1(x,\theta),$$

wobei $u_0(x,\theta)$ *durch (3.6) und* $u_1(x,\theta)$ *durch (3.10) gegeben sind.*

Dieses Ergebnis stimmt grundsätzlich mit den ersten beiden Termen der von Bondarenko [31] berechneten Fundamentallösung der Stationären Transportgleichung überein. Die Art der Darstellung ist dort allerdings eine andere.

3.3.3 Der kollineare Fall $\theta = \theta_0$

Wir gehen aus von der Gleichung (3.8) und setzen $x - x_0 = r\theta_0 + z^{'}$ mit $z^{'} = E_{\theta_0}^{\perp}(x - x_0)$. Es folgt für $u_1(x,\theta)$ die Darstellung:

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) &= \int_0^{\infty} \exp\{-\int_{x-s\theta_0}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\, b(x-s\theta_0)\,\eta(\theta_0\cdot\theta_0) \\ &\quad \exp\{-\int_{x_0}^{x-s\theta_0} a(\tilde{x})d\tilde{x}\} \\ &\quad \delta(E_{\theta_0}^{\perp}((r-s)\theta_0 + z^{'}))\, h(((r-s)\theta_0 + z^{'})\cdot\theta_0) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{x-s\theta_0}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\exp\{-\int_0^{x-s\theta_0} a(\tilde{x})d\tilde{x}\} \\ &\quad b(x-s\theta_0)\,\eta(1)\,\delta(z^{'})\,h(r-s)\,h(s)\,ds \qquad (3.11) \end{aligned}$$

Wegen $h(r-s)h(s) = h((x-x_0)\cdot\theta_0 - s)h(s)$ liegt der Punkt $x - s\theta_0$ zwischen x_0 und x auf deren Verbindungslinie. Deshalb können die beiden Exponentialterme zusammengefaßt werden. Wir erhalten

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{x_0}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\, b(x-s\theta_0)\,\eta(1) \\ &\quad \delta(E_{\theta_0}^{\perp}(x-x_0))\, h((x-x_0)\cdot\theta_0 - s)\, h(s)\, ds. \end{aligned}$$

Es gilt also das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (3.1)-(3.3) ist für* $\theta = \theta_0$ *gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) \quad = \quad & \rho(x_0,x)\,\eta(1)\int_{x_0}^{x} b(\tilde{x})d\tilde{x} \\ & \delta(E_{\theta_0}^{\perp}(x-x_0))\,h((x-x_0)\cdot\theta_0). \end{aligned} \tag{3.12}$$

Träger dieser Distribution ist eine dreidimensionale Mannigfaltigkeit im fünfdimensionalen Phasenraum.

3.3.4 Der kollineare Fall $\theta = -\theta_0$

Wir setzen wieder $x - x_0 = r\theta_0 + z^{'}$, $z^{'} = E_{\theta}^{\perp}(x - x_0)$. In (3.8) setzen wir $\theta = -\theta_0$ und führen die $\theta^{'}$-Integration aus. Wir bekommen:

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) \quad = \quad & \int_0^{\infty} \exp\{-\int_{x+s\theta_0}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\,b(x+s\theta_0)\,\eta(-1) \\ & \exp\{-\int_{x_0}^{x+s\theta_0} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\,ds \\ & \delta(E_{\theta_0}^{\perp}((r+s)\theta_0+z^{'}))\,h\left(((r+s)\theta_0+z^{'})\cdot\theta_0\right) \\ = \quad & \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\int_{x+s\theta_0}^{x} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\exp\{-\int_{x_0}^{x+s\theta_0} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\,b(x+s\theta_0) \\ & \eta(-1)\,\delta(z^{'})\,h(r+s)\,h(s)\,ds. \end{aligned}$$

Es folgt also das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (3.1)-(3.3) ist für* $\theta = -\theta_0$ *gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta) \quad = \quad & \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x_0,x+s\theta_0)\,\rho(x+s\theta_0,x)b(x+s\theta_0)\,\eta(-1) \\ & \delta(E_{\theta}^{\perp}(x-x_0))\,h((x-x_0)\cdot\theta_0+s)\,h(s)\,ds. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Träger dieser Distribution ist eine vierdimensionale Mannigfaltigkeit im fünfdimensionalen Phasenraum.

Auch dieses Ergebnis hätte man durch Integration der zeitabhängigen Darstellung (2.39) über die Zeit t bekommen können. Die beiden Heaviside-Funktionen stellen sicher, daß der Stoßprozess nicht zwischen x_0 und x stattfindet, was keinen Sinn machen würde. Da die Zeitabhängigkeit eliminiert wurde, ist es unwesentlich, wo außerhalb dieses Verbindungsstückes von x_0 und x dieser Stoß stattfindet, was durch die Integration über s ausgedrückt wird. Auch hier können die beiden inneren Integrale nicht zusammengefaßt werden. Wir bekommen somit den

Satz. *Die Born-Approximation von (3.1)-(3.3) lautet für* $\theta = \pm\theta_0$

$$u_B(x,\theta;x_0,\theta_0) \;=\; u_0(x,\theta) + u_1(x,\theta),$$

wobei $u_0(x,\theta)$ *durch (3.6) und* $u_1(x,\theta)$ *im Falle* $\theta = \theta_0$ *durch (3.12), im Falle* $\theta = -\theta_0$ *dagegen durch (3.13) gegeben sind.*

3.4 Die zweifach gestreute Strahlung

3.4.1 Die zweite zeitabhängige Born-Approximation

Zuweilen interessiert man sich in der Praxis auch für die zweimal gestreute Strahlung. Diese entspricht dem dritten Term der Neumann-Reihe, bzw. dem dritten Summanden in der zweiten Born-Approximation. Hier wird iterativ, nachdem man die erste Born-Näherung berechnet hat, diese noch einmal in die Integralgleichung eingesetzt und somit eine bessere Approximation an die tatsächliche Lösung gewonnen.

Wir wollen auch diesen Fall hier kurz durchrechnen, ohne dies allerdings bis in die kleinsten Einzelheiten zu tun. Insbesondere werden wir nicht sämtliche auftretenden Sonderfälle behandeln können. Auch hier werden wir uns wieder auf den Fall dreier Ortsdimensionen beschränken, mit der Anmerkung, daß auch für zwei oder höhere Dimensionen analoge Aussagen nachgewiesen werden können.

Es sind wieder einige geometrische Fallunterscheidungen zu treffen in Abhängigkeit von den Streurichtungen und deren linearer Unabhängigkeit. Wir beschränken uns dabei zunächst auf den Fall, daß Ausstrahlrichtung, erste Streurichtung und zweite Streurichtung (= Detektionsrichtung) den gesamten Raum aufspannen, also linear unabhängig sind:

$$\mathbb{R}^3 = \mathrm{span}\{\theta_0, \theta^{'}, \theta\}.$$

Die anderen Fälle kleinerer Raumdimensionen werden gesondert betrachtet. Wir verwenden weiterhin die Bezeichnung

$$\rho(x,y) := \exp\{-\int_x^y a(\tilde{x})d\tilde{x}\},$$

wobei das Integral über die Verbindungsstrecke von x nach y zu nehmen ist. Damit lautet nun die Integralgleichung der zweiten Born-Näherung

$$\begin{aligned} u(x,\theta,t) \quad &= \quad u_0(x,\theta,t) \; + \int_0^t \rho(x-\theta(t-\tau^{'}),x)\, b(x-\theta(t-\tau^{'})) \\ &\quad\ \{\int_{S^2} \eta(\theta\cdot\theta^{'})[u_0(x-\theta(t-\tau^{'}),\theta^{'},\tau^{'}) \; + \; u_1(x-\theta(t-\tau^{'}),\theta^{'},\tau^{'})] \\ &\qquad\qquad d\theta^{'}\}\, d\tau^{'} \qquad\qquad (4.1) \\ &=: \quad u_0(x,\theta,t) + u_1(x,\theta,t) + u_2(x,\theta,t). \end{aligned}$$

Der erste Integralterm mit u_0 unter dem Integralzeichen liefert gerade wieder $u_1(x,\theta,t)$, wogegen der verbleibende Term $u_2(x,\theta,t)$ als zweimal gestreute Strahlung neu zu berechnen ist.
Wir übernehmen die Darstellung (2.33) für $u_1(x-\theta(t-\tau^{'}),\theta^{'},\tau^{'})$

$$\begin{aligned} u_1(x-\theta(t-\tau^{'}),\theta^{'},\tau^{'}) &= \rho(x_1,x-\theta(t-\tau^{'}))\, b(x_1)\, \eta(\theta^{'}\cdot\theta_0)\, \rho(x_0,x_1) \\ & \quad \delta(r^{'}+r-\tau^{'})\, \frac{1}{|\theta_0\times\theta^{'}|}\, \delta(E^{\perp}_{\theta_0,\theta^{'}}(x-\theta(t-\tau^{'})-x_0)) \\ & \quad h(\tau^{'}-r-r^{'})\, h(r^{'})\, h(\tau^{'}-r)\, h(r), \end{aligned} \tag{4.2}$$

mit $x-\theta(t-\tau^{'}) = x_0 + r^{'}\theta_0 + r\theta^{'} + z^{'},\ x_1 = x_0 + r^{'}\theta_0,\ \theta^{'} \neq \pm\theta_0$.
Hierbei gilt, wie oben gezeigt wurde

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-\theta(t-\tau^{'})-x_0)\cdot[\theta^{'}-\gamma\theta_0]\}, \\ r^{'} &= \frac{1}{1-\gamma^2}\{(x-\theta(t-\tau^{'})-x_0)\cdot[\theta_0-\gamma\theta^{'}]\}, \\ \gamma &= \theta^{'}\cdot\theta_0. \end{aligned}$$

Setzen wir dies also in (4.1) ein, und führen wir die $\tau^{'}$-Integration dabei sofort aus, d.h. ersetzen wir wegen des $\delta(r^{'}+r-\tau^{'})$ den Integrationsparameter $\tau^{'}$ durch $r+r^{'}$, so folgt

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta,t) &= \rho(x-\theta(t-r-r^{'}),x)\, b(x-\theta(t-r-r^{'})) \int_{S^2} \eta(\theta\cdot\theta^{'}) \\ & \quad \rho(x_1,x-\theta(t-r-r^{'}))\, b(x_1)\, \eta(\theta^{'}\cdot\theta_0)\, \rho(x_0,x_1)\, \frac{1}{|\theta_0\times\theta^{'}|} \\ & \quad \delta(E^{\perp}_{\theta_0,\theta^{'}}(x-\theta(t-r-r^{'})-x_0))\, h(r^{'})\, h(r)\, d\theta^{'}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Um diesen Ausdruck weiter zu vereinfachen, berücksichtigen wir nun unsere Voraussetzung $\mathbb{R}^3 = \mathrm{span}\{\theta_0,\theta^{'},\theta\}$ und schreiben $x-x_0$ wie folgt

$$x-x_0 = s\theta + s^{'}\theta^{'} + s^{''}\theta_0.$$

Diese Darstellung ist eindeutig. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \delta(E^{\perp}_{\theta_0,\theta^{'}}(x-\theta(t-r-r^{'})-x_0)) &= \delta(E^{\perp}_{\theta_0,\theta^{'}}((s-t+r+r^{'})\theta + s^{'}\theta^{'} + s^{''}\theta_0)) \\ &= \delta(E^{\perp}_{\theta_0,\theta^{'}}((s-t+r+r^{'})\theta)). \end{aligned}$$

Offenbar ist aufgrund der Eigenschaften des Vektorproduktes $e_\perp := \frac{\theta_0 \times \theta'}{|\theta_0 \times \theta'|}$ im $\mathbf{R}^3$ eine Einheitsbasis von Bild$(E^\perp_{\theta_0,\theta'})$. Somit gilt

$$E^\perp_{\theta_0,\theta'}((s-t+r+r')\theta) \;=\; (s-t+r+r')\frac{\theta_0 \times \theta'}{|\theta_0 \times \theta'|} \cdot \theta\, e_\perp .$$

Anschaulich kann $(\theta_0 \times \theta') \cdot \theta$ als Volumen des dreidimensionalen von θ_0, θ' und θ aufgespannten Parallelepipeds interpretiert werden. Dieses ist ungleich Null nach Voraussetzung der linearen Unabhängigkeit. Somit vereinfacht sich der Delta-Ausdruck zu

$$\delta((s-t+r+r')\frac{(\theta_0 \times \theta') \cdot \theta)}{|\theta_0 \times \theta'|}) \;=\; \frac{|\theta_0 \times \theta'|}{|(\theta_0 \times \theta') \cdot \theta)|}\delta(s-t+r+r').$$

Es resultiert das folgende

Lemma. *Die zweifach gestreute Strahlung von (2.17)-(2.19) ist gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta,t) \;&=\; \rho(x-\theta(t-r-r'),x)\, b(x-\theta(t-r-r')) \\ &\int_{S^2} \eta(\theta\cdot\theta')\, \rho(x_1, x-\theta(t-r-r'))\, b(x_1)\, \eta(\theta'\cdot\theta_0)\, \rho(x_0,x_1) \\ &\frac{1}{|(\theta_0 \times \theta')\cdot\theta)|}\, \delta(t-(r+r'+s))\, h(r)\, h(r')\, h(s)\, d\theta' . \end{aligned} \tag{4.4}$$

Wir haben in (4.4) aus physikalischen Gründen wieder $h(s)$ ergänzt, da sonst negative Zeiten durch das verbleibende Dirac-Delta einen Beitrag liefern würden, was wir hier ausschließen möchten.
Die x_1-abhängigen Terme können nicht ohne weiteres aus dem Integral herausgezogen werden, da sie streng genommen θ'-abhängig sind: zu verschiedenen θ' können unterschiedliche $x_1(\theta')$ gehören.
Genauer ist die einzige Einschränkung (Singularität), die uns bleibt, die Diracfunktion in der Zeit. Von jedem Punkt der Halbgeraden $x_0 + r'\theta_0$, $r' > 0$, kann man durch Wahl passender Winkel θ' die Halbgerade $x - s\theta$, $s > 0$, erreichen, und somit den Punkt (x,θ).
Man erwartet also, daß im stationären Fall diese Singularität verschwindet, da kontinuierlich eingestrahlt wird und jeder der von der Diracschen Deltafunktion gewünschten Zeitpunkte somit vertreten ist (Integration über die Zeit).

Wir wollen hier also wirklich einmal den bereits früher als Alternative gefundenen Weg beschreiten und die entsprechende zweite Born-Approximation im stationären Fall durch einfache Zeitintegration der Näherung im zeitabhängigen Fall berechnen

$$u_2(x,\theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_2(x,\theta,t)dt. \tag{4.5}$$

Die Deltafunktion in (4.4) bewirkt hier ein Ersetzen von t durch $r + r^{'} + s$,

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta) \quad &= \quad \rho(x - s\theta, x)\, b(x - s\theta) \int_{S^2} \eta(\theta \cdot \theta^{'})\, \rho(x_1, x - s\theta)\, b(x_1) \\ &\quad \eta(\theta^{'} \cdot \theta_0)\, \rho(x_0, x_1)\, \frac{1}{|(\theta_0 \times \theta^{'}) \cdot \theta|}\, h(r)\, h(r^{'})\, h(s)\, d\theta^{'}. \end{aligned} \tag{4.6}$$

mit $x_1 = x_0 + r^{'}(\theta^{'})\theta_0$. Beachte, daß das Spatprodukt im Nenner durch zyklische Vertauschung seinen Wert beibehält, bei antizyklischer Vertauschung dagegen das Vorzeichen wechselt. Wegen der Betragsstriche hat letzteres keine Auswirkung auf die Darstellung von u_2, d.h. die Vektoren können beliebig angeordnet werden.

Wir haben oben gesehen, daß $r, r^{'}$ und s eindeutig durch x, x_0, θ, θ_0 und $\theta^{'}$ gegeben sind. Explizite Darstellungen für $r, r^{'}$ hatten wir bereits angegeben. Eine solche läßt sich auch für $s, s^{'}$ und $s^{''}$ nach derselben Methode finden. Wir werden diese in Abschnitt 3.6 kurz darstellen.

3.4.2 Direkte Herleitung der zweiten stationären Born-Näherung

Wir wollen noch einmal direkt die Darstellung (4.6) der zweiten stationären Born-Näherung berechnen und diese dabei kurz diskutieren. Dazu gehen wir wieder von der *Stationären Integraldarstellung* (3.7) aus

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta) \quad &= \quad \int_0^{\infty} \exp\{-\int_{\tau^{'}}^{0} a(x - \tau\theta)d\tau\}\, b(x - \tau^{'}\theta) \\ &\quad \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) u_1(x - \tau^{'}\theta, \theta^{'}) d\theta^{'}\, d\tau^{'}, \end{aligned} \tag{4.7}$$

wobei wir in dem Streuintegral schon u durch die erste Bornapproximation $u_0 + u_1$ ersetzt haben und die aus q und u_0 resultierenden ersten beiden Terme u_0 und u_1 (resp.) nicht aufgeschrieben haben. Die aus u_1 resultierende zweifach gestreute Strahlung $u_2(x,\theta)$ ist neu zu berechnen. Setzen wir die Darstellung (3.10) für u_1 ein, so folgt

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta) &= \int_0^\infty \exp\{-\int_{x_1}^x a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\, b(x_1) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta') \\ &\quad \exp\{-\int_{x_1-r\theta'}^{x_1} a(\tilde{x})d\tilde{x}\} \exp\{-\int_{x_0}^{x_1-r\theta'} a(\tilde{x})d\tilde{x}\}\, b(x_1-r\theta')\,\eta(\theta'\cdot\theta_0) \\ &\quad \frac{1}{|\theta'\times\theta_0|}\,\delta(z')\,h(r')\,h(r)\,d\theta'\,d\tau' \end{aligned} \tag{4.8}$$

mit $x_1 = x-\tau'\theta$, $z' = E^{\perp}_{\theta',\theta_0}(x_1-x_0)$.
Wir setzen wieder $\mathrm{span}\{\theta_0,\theta',\theta\} = \mathbb{R}^3$ voraus und schreiben

$$x - x_0 = s\theta + s'\theta' + s''\theta_0.$$

Es folgt

$$\delta(E^{\perp}_{\theta',\theta_0}(x-\tau'\theta-x_0)) = \frac{|\theta_0\times\theta'|}{|(\theta_0\times\theta')\cdot\theta|}\delta(s-\tau').$$

Setzen wir dies ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(\tau')\,\rho(x-\tau'\theta,x)\,b(x-\tau'\theta)\int_{S^{n-1}}\eta(\theta\cdot\theta') \\ &\quad \rho(x-\tau'\theta-r\theta',x-\tau'\theta)\,\rho(x_0,x-\tau'\theta-r\theta')\,\delta(s-\tau') \\ &\quad b(x-\tau'\theta-r\theta')\,\eta(\theta'\cdot\theta_0)\,\frac{1}{|(\theta_0\times\theta')\cdot\theta|}\,h(r')\,h(r)\,d\theta'\,d\tau'. \end{aligned} \tag{4.9}$$

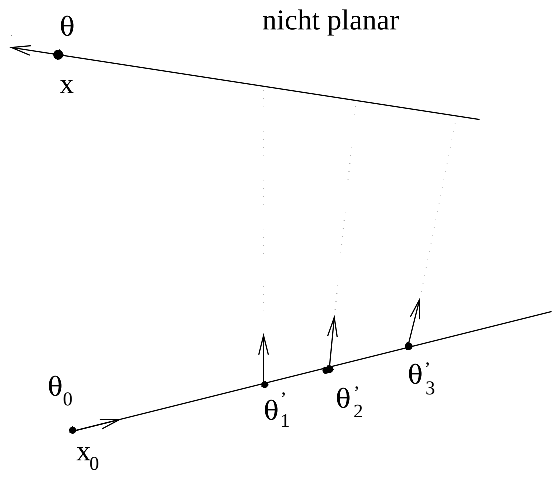
Hierbei ist s abhängig von $(x-x_0),\theta,\theta_0$ und θ' und kann durch Lösen eines linearen Gleichungssystems explizit bestimmt werden. Analoges gilt für r und r', wie bereits gezeigt wurde. Führen wir die τ'-Integration aus, so erhalten wir schließlich das

Lemma. *Die zweifach gestreute Strahlung von (3.1)-(3.3) ist gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_2(x,\theta) &= \rho(x-s\theta,x)\,b(x-s\theta)\int_{S^{n-1}}\rho(x-s\theta-r\theta',x-s\theta) \\ &\quad \eta(\theta\cdot\theta')\,\rho(x_0,x-s\theta-r\theta')\,b(x-s\theta-r\theta')\,\eta(\theta'\cdot\theta_0) \\ &\quad \frac{1}{|(\theta_0\times\theta')\cdot\theta|}\,h(r')\,h(r)\,h(s)\,d\theta' \end{aligned} \tag{4.10}$$

mit $x - x_0 = r^{'}\theta_0 + r\theta^{'} + s\theta$.

Es verbleibt also in der Darstellung von u_2 nur die Integration über $\theta^{'}$. Wegen der linearen Unabhängigkeit der drei Richtungsvektoren gibt es keine zwei Verbindungsstrecken zwischen den beiden Halbstrahlen $x_0 + r^{'}\theta_0$ und $x - s\theta$, die dieselbe Richtung $\theta^{'}$ haben. (Wären zwei Richtungen $\theta_1^{'}$ und $\theta_2^{'}$ identisch, so würden diese beiden Linien zusammen mit den sie verbindenden Streckenzügen (Vgl. Abbildung) eine Ebene definieren, in welcher alle weiteren auftretenden Verbindungsstrecken enthalten sein müßten: Das Problem wäre nicht mehr echt dreidimensional, im Widerspruch zu unserer Voraussetzung.)
Die folgende Abbildung soll diesen Sachverhalt ein wenig veranschaulichen.



3.4.3 Der planare Fall

Was passiert aber nun, wenn das Problem zweidimensional wird, d.h. wenn die drei Richtungsvektoren $\theta_0, \theta^{'}$ und θ eine Ebene im $\mathbf{R}^3$ aufspannen? Dann liegt sicherlich auch $x - x_0$ in dieser Ebene. Wir haben also die Darstellung

$$x - x_0 = s\theta_0 + s^{'}\theta^{'} + \tilde{z}$$

mit $\tilde{z} = E^{\perp}_{\theta',\theta_0}(x - x_0) =: E^{\perp}_{\{\theta,\theta_0,\theta'\}}(x - x_0)$. Setzen wir dieses in (4.8) ein, so folgt mit

$$
\begin{aligned}
\delta(z^{'}) &= \delta(E^{\perp}_{\theta',\theta_0}(x - \tau^{'}\theta - x_0)) \\
&= \delta(E^{\perp}_{\{\theta,\theta_0,\theta'\}}(s\theta_0 + s^{'}\theta^{'} - \tau^{'}\theta + \tilde{z})) \\
&= \delta(\tilde{z})
\end{aligned}
$$

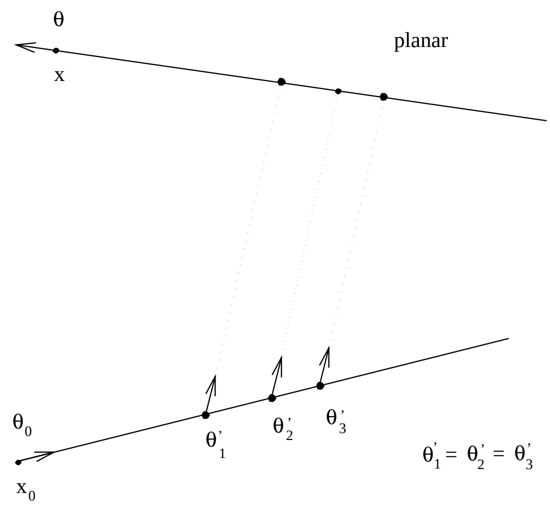
schliesslich das

Lemma. *Die zweifach gestreute Strahlung, welche sich ausschließlich in der durch x_0, θ_0 und θ definierten Ebene bewegt, ist gegeben durch*

$$
\begin{aligned}
u_2(x,\theta) = & \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \tau^{'}\theta, x)\, b(x - \tau^{'}\theta) \int_{S^{n-1}} \rho(x - \tau^{'}\theta - r\theta^{'}, x - \tau^{'}\theta) \\
& \eta(\theta \cdot \theta^{'})\, \rho(x_0, x - \tau^{'}\theta - r\theta^{'})\, \delta(E^{\perp}_{\theta,\theta_0}(x - x_0))\, b(x - \tau^{'}\theta - r\theta^{'}) \\
& \eta(\theta^{'} \cdot \theta_0)\, \frac{1}{|\theta' \times \theta_0|}\, h(\tau^{'})\, h(r^{'})\, h(r)\, d\theta^{'}\, d\tau^{'}. \qquad (4.11)
\end{aligned}
$$

Wie vielleicht zu erwarten war, wird die nun fehlende Dimension in der $\theta^{'}$-Integration dadurch kompensiert, daß eine Integration über die Halbgerade $x - \tau^{'}\theta$ hinzugekommen ist. Dies bedeutet nichts anderes, als daß die Auswahl des $\theta^{'}$ nicht mehr wie im echt dreidimensionalen Fall eindeutig ist, sondern daß pro Richtungsvektor $\theta^{'}$ nun jeder Punkt auf der Halbgeraden durch x (bzw. x_0) als Streupunkt in Frage kommt, soweit er die durch die Heaviside-Funktionen gegebenen Restriktionen erfüllt (d.h. $\theta^{'}$ darf nicht „ins Leere gehen"). Diese Situation soll in der folgenden Abbildung noch einmal verdeutlicht werden.

Auf einem beschränkten Gebiet Ω wird natürlich die Integration über $\tau^{'}$ irgendwann abbrechen, spätestens dann, wenn der Rand des Gebietes $\partial\Omega$ erreicht ist. Dort verschwindet dann allerdings nach Voraussetzung auch $b(x)$, so daß die obige Darstellung auch in diesem Fall Gültigkeit besitzt.



Die Parameter r und $r^{'}$ hängen übrigens diesmal von $\tau^{'}$ ab, da sie aus der Darstellung

$$x - \tau^{'}\theta - x_0 = r^{'}\theta_0 + r\theta^{'}$$

stammen. Somit können die entsprechenden Terme nicht aus dem $\tau^{'}$-Integral herausgezogen werden!

3.4.4 Der kollineare Fall

Die Rechnungen im kollinearen Fall verlaufen analog zu den bereits behandelten. Hier ist zusätzlich zu den Bedingungen im planaren Fall noch Dim span $\{x - x_0, \theta_0, \theta\} = 1$ zu fordern. Dann ist es möglich, daß sich die Bewegung eines zweifach gestreuten Teilchens ausschließlich auf einer Geraden im $\mathbf{R}^3$ konzentriert.

3.4.5 Vergleich mit der Methode bei Bondarenko

A. Bondarenko gibt eine etwas andere Form des zweifach gestreuten Anteils in seinem Artikel [31] an. Wir wollen hier kurz zeigen, daß die beiden Ausdrücke dennoch äquivalent sind. Dazu wenden wir $u_2(x, \theta)$ auf eine Testfunktion $\phi(x, \theta)$ aus einem geeigneten Funktionenraum an. (Bondarenko verwendet hierzu den Raum $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbf{R}^3 \times S^2)$, also den Raum der unendlich oft

differenzierbaren Funktionen auf $\mathbf{R}^3 \times S^2$ mit kompaktem Träger, versehen mit einer Pseudotopologie.)
Bezeichnen wir den regulären Anteil von $u_2(x,\theta)$ in (4.10) durch

$$\begin{aligned}\chi_2(x,\theta;x_0,\theta_0) \quad := \quad & \rho(x-s\theta,x)\, b(x-s\theta)\, \eta(\theta\cdot\theta')\, \rho(x-s\theta-r\theta',x-s\theta) \\ & \rho(x_0,x-s\theta-r\theta')\, b(x-s\theta-r\theta')\, \eta(\theta'\cdot\theta_0),\end{aligned}$$

so gilt offenbar

$$\begin{aligned} I_2 \quad := \quad & \langle u_2(x,\theta;x_0,\theta_0)\,,\, \phi(x,\theta)\rangle \\ = \quad & \int_{\mathrm{R}^3} dx \int_{S^2} d\theta u_2(x,\theta;x_0,\theta_0)\phi(x,\theta) \qquad (4.12) \\ = \quad & \int_{-\infty}^{+\infty} ds\, h(s) \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, h(r) \int_{-\infty}^{+\infty} dr'\, h(r') \\ & \int_{S^{n-1}} d\theta \int_{S^{n-1}} d\theta'\, \phi(x,\theta) \frac{\chi_2(x,\theta;x_0,\theta_0)}{|(\theta_0\times\theta')\cdot\theta|}. \end{aligned}$$

Nach Konstruktion gilt

$$x = x_0 + r'\theta_0 + r\theta' + s\theta. \qquad (4.13)$$

Für das dreidimensionale Volumenelement dx können wir nach der Transformationsformel schreiben

$$dx = |(\theta_0\times\theta')\cdot\theta|\, ds\, dr\, dr',$$

wobei der Vorfaktor der rechten Seite gerade das durch die Transformation (4.13) verzerrte Einheitsvolumen, d.h. den Betrag der die Transformation beschreibenden Jacobi-Determinante, angibt. Es folgt

$$I_2 = \int_{S^2} d\theta \int_0^\infty dr \int_{S^2} d\theta' \int_0^\infty ds \int_0^\infty dr'\, \phi(x,\theta)\chi_2(x,\theta;x_0,\theta_0). \qquad (4.14)$$

Führt man nun gemäß Bondarenko die Transformation

$$dx = r^2 dr d\theta' \qquad (4.15)$$

durch, so bekommt man

$$I_2 = \int_{S^2} d\theta \int_{\mathbb{R}^3} dx \phi(x,\theta) \int_0^\infty dr' \int_0^\infty ds \, \frac{1}{r^2} \chi_2(x,\theta;x_0,\theta_0)$$

mit $r = |x - x_0 - r'\theta_0 - s\theta|$ wegen (4.13). Somit lautet die Alternativdarstellung für u_2:

$$u_2(x,\theta;x_0,\theta_0) = \int_0^\infty \int_0^\infty \chi_2(x,\theta;x_0,\theta_0) \frac{1}{|x - x_0 - r'\theta_0 - s\theta|^2} dr' ds. \quad (4.16)$$

Dies ist die Darstellung bei Bondarenko.

3.5 Die Born-Approximation im isotropen Fall

3.5.1 Der isotrope Lichtblitz

In [133] wurde bereits der isotrope Fall vorgestellt. Wir wollen diese Ergebnisse hier der Vollständigkeit halber nur kurz wiederholen und lediglich die Sonderfälle kollinearer Geometrie zusätzlich durchrechnen.
Wir lassen nun also eine Quelle zum Zeitpunkt $t = 0$ am Ort x_0 isotrop, d.h. in alle Richtungen $\theta_0 \in S^2$ mit der gleichen Intensität, in das Medium einstrahlen. Dies bedeutet, daß wir in (2.25) statt (2.24) nun

$$q(x,\theta,t) = \delta(x - x_0)\,\delta(t) \quad (5.1)$$

einzusetzen haben. Damit folgt aus (2.25) in diesem Fall

$$\begin{aligned} u_0(x,\theta,t) &= \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a(x + \theta(\tau - t))d\tau\} \\ &\qquad \delta(x + \theta(\tau' - t) - x_0)\,\delta(\tau')d\tau' \\ &= \exp\{-\int_0^t a(x + \theta(\tau - t))d\tau\}\,\delta(x - x_0 - t\theta). \end{aligned}$$

Setzen wir wieder $\rho(x,y) := \exp\{-\int_x^y a(\tilde{x})d\tilde{x}\}$, so gilt das

Lemma. *Die ungestreute Strahlung von (2.17), (2.18) ist bei isotroper Einstrahlung (5.1) gegeben durch*

$$u_0(x,\theta,t) = \rho(x - t\theta, x)\,\delta(x - x_0 - t\theta). \quad (5.2)$$

Der Träger dieser Distribution ist eine dreidimensionale Mannigfaltigkeit im sechsdimensionalen Phasenraum.

Der Ausdruck (5.2) ist physikalisch vernünftig, da aufgrund der isotropen Einstrahlung lediglich eine Zeitbedingung zu erfüllen ist, um einen Beitrag (etwa im Rahmen einer Messung) zu liefern. Diese Zeitbedingung wird gerade durch das Dirac-Delta ausgedrückt.

Die Bornsche Näherung bekommen wir, indem wir (5.2) in die Integraldarstellung (2.30) einsetzen:

$$u_B(x,\theta,t) = u_0(x,\theta,t) + u_1(x,\theta,t)$$

mit

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \int_0^t \rho(x+\theta(\tau^{'}-t),x)\, b(x+\theta(\tau^{'}-t)) \\ &\quad \int_{S^2} \eta(\theta\cdot\theta^{'})\, u_0(x+\theta(\tau^{'}-t),\theta^{'},\tau^{'}) d\theta^{'}\, d\tau^{'} \\ &= \int_0^t \rho(x+\theta(\tau^{'}-t),x)\, b(x+\theta(\tau^{'}-t)) \\ &\quad \int_{S^2} \eta(\theta\cdot\theta^{'})\, \rho(x+\theta(\tau^{'}-t)-\tau^{'}\theta^{'}, x+\theta(\tau^{'}-t)) \\ &\quad \delta(x+\theta(\tau^{'}-t)-\tau^{'}\theta^{'}-x_0)\, d\theta^{'} d\tau^{'}. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Aus dem dreidimensionalen Deltaterm folgt bzgl. der $\theta^{'},\tau^{'}$-Integration

$$x+\theta(\tau^{'}-t)-\tau^{'}\theta^{'}-x_0 = 0$$

$$\Rightarrow \tau^{'}\theta^{'} = x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \theta^{'} &= \frac{x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0}{|x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0|} \quad , \text{ da } \theta^{'} \in S^2, \\ \text{und } \tau^{'} &= |x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0|. \end{aligned}$$

Dabei wurde bereits ausgenutzt, daß aufgrund des vorliegenden Integrationsbereiches $\tau^{'}$ nicht negativ wird. Man kann also formal das dreidimensionale Dirac-Delta in ein Richtungs-Delta und ein Betrags-Delta aufspalten (dies entspricht im wesentlichen der Anwendung der Transformationsformel $dx = |\tau'|^2 d\tau' d\theta'$ auf das Integral in (5.3) mit $x = x_0 + t\theta + \tau'(\theta' - \theta)$),

$$\begin{aligned} &\delta(x + \theta(\tau' - t) - \tau'\theta' - x_0) = \\ &= \frac{1}{|x + \theta(\tau' - t) - x_0|^2}\, \delta(\theta' - \frac{(x + \theta(\tau' - t) - x_0)}{|x + \theta(\tau' - t) - x_0|}) \\ &\qquad \times \delta(|\tau'| - |x + \theta(\tau' - t) - x_0|). \end{aligned}$$

Exakter kann man durch Anwenden auf eine Testfunktion die folgende Formel im $\mathbf{R}^3$ beweisen, vgl. z.B. [133]

$$\int_{S^2} f(\theta)\, \delta(x - t\theta)\, d\theta = |x|^{-2}\, f(\frac{x}{|x|})\, \delta(|t| - |x|). \tag{5.4}$$

Wenden wir (5.4) auf (5.3) an, so folgt

$$\begin{aligned} u_1(x, \theta, t) \;\; = \;\; & \int_{-\infty}^{+\infty} h(\tau')\, h(t - \tau')\, \rho(x + \theta(\tau' - t), x) \\ & b(x + \theta(\tau' - t))\, \eta(\theta \cdot \frac{(x + \theta(\tau' - t) - x_0)}{|x + \theta(\tau' - t) - x_0|}) \\ & \rho(x_0, x + \theta(\tau' - t))\, \frac{1}{|x + \theta(\tau' - t) - x_0|^2} \\ & \delta(|\tau'| - |x + \theta(\tau' - t) - x_0|)\, d\tau'. \end{aligned} \tag{5.5}$$

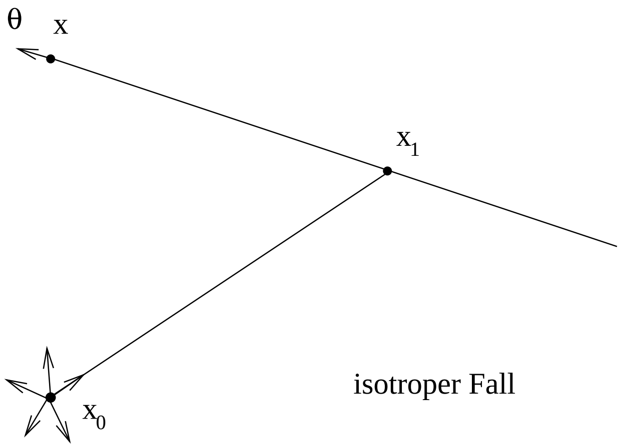
Wir setzen $x_1 := x + \theta(\tau' - t)$. Wegen des $h(\tau')$ können die Betragsstriche um das τ' weggelassen werden. Führen wir die τ'-Integration aus, so folgt das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (2.17), (2.18) ist bei isotroper Einstrahlung (5.1) gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_1(x, \theta, t) \;\; = \;\; & h(t - |x_1 - x_0|)\, \rho(x_1, x) \\ & b(x_1)\, \eta(\theta \cdot \frac{x_1 - x_0}{|x_1 - x_0|})\, \rho(x_0, x_1)\, \frac{1}{|x_1 - x_0|^2}, \end{aligned} \tag{5.6}$$

wobei x_1 nun der Punkt auf der Geraden $x - \mathbf{R}^1\theta$ ist, für den gilt:

$$t = |x - x_1| + |x_1 - x_0|.$$



Der Faktor $\frac{1}{|x_1-x_0|^2}$ gibt dabei an, wieviel der Ausgangsintensität der Quelle bei x_1 tatsächlich ankommt. Dabei geht der Abstand von der Quelle bekanntlich in drei Raumdimensionen umgekehrt quadratisch ein, was hier der Fall ist. Die Heaviside-Funktion $h(t-|x_1-x_0|)$ gibt die notwendige Laufzeit an, die ein Strahl zum Erreichen des Punktes x benötigt.

3.5.2 Der kollineare Fall

Wir müssen noch den Fall betrachten, wo x_0 auf der Geraden $x-\mathbf{R}^1\theta$ liegt. Für diesen kollinearen Fall gilt in (5.5)

$$|x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0| = |\gamma+\tau^{'}-t|$$

mit $x-x_0=\gamma\theta$. Die Deltafunktion nimmt dann die Gestalt an

$$\begin{aligned}\delta(\tau^{'}-|x+\theta(\tau^{'}-t)-x_0|) &= \delta(\tau^{'}-|\gamma+\tau^{'}-t|)\\ &= \delta(\tau^{'}-\gamma-\tau^{'}+t)+\delta(\tau^{'}+\gamma+\tau^{'}-t)\\ &= \delta(t-\gamma)+\delta(2\tau^{'}+\gamma-t).\end{aligned}$$

Aus dem ersten Deltaterm folgt sofort die Bedingung $\gamma \geq 0$, wenn man nur positive Zeiten zuläßt. Dies bedeuted, daß $\theta = \frac{x-x_0}{|x-x_0|}$ sein muß. Wir ergänzen daher -also auch hier wieder aus den bekannten physikalischen Gründen- in dem ersten Summanden den Faktor $h(\gamma) = h((x-x_0)\cdot\theta)$.

Dieser erste Summand beschreibt dann einen Stoß zwischen x_0 und x für den Anteil der Quellstrahlung, der in Richtung $\theta = \frac{x-x_0}{|x-x_0|}$ ausgestrahlt wird (Vorwärtsstreuung). Hier ist jeder Punkt auf der Verbindungsstrecke gleichsam für einen Stoß zulässig, soweit nur $|x - x_0| = t$ erfüllt ist. Der zweite Deltaterm ist für die Stöße außerhalb dieser Verbindungsstrecke zuständig (Rückwärtsstreuung). Er betrifft die Strahlen, die von der Quelle in Richtung $-\theta$ ausgestrahlt werden.
Für die Bornapproximation folgt in dieser kollinearen Anordnung somit

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \int_0^t \rho(x+\theta(\tau' - t), x)\, b(x+\theta(\tau' - t)) \\ &\qquad \rho(x_0, x+\theta(\tau' - t))\, \frac{1}{|x+\theta(\tau' - t) - x_0|^2}\, d\tau' \\ &\qquad \eta(1)\, \delta(t - |x-x_0|)\, h((x-x_0)\cdot\theta) \\ &+ \rho(x_1, x)\, b(x_1)\, \rho(x_0, x_1)\, \frac{1}{|x_1 - x_0|^2}\, \eta(-1) \end{aligned} \tag{5.7}$$

mit $x_1 := x_0 - \frac{1}{2}(t - |x-x_0|)\theta$. Man kann den ersten Beitrag noch etwas suggestiver schreiben und bekommt das

Lemma. *Die einmal gestreute Strahlung von (2.17), (2.18) ist bei isotroper Einstrahlung (5.1) für den Fall kollinearer Quelle-Detektor-Anordnung $\theta = \frac{x-x_0}{|x-x_0|}$ gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_1(x,\theta,t) &= \int_{x_0}^{x} \rho(x_0,\tilde{x})\, \frac{1}{|\tilde{x} - x_0|^2}\, b(\tilde{x})\, \rho(\tilde{x}, x)\, d\tilde{x} \\ &\qquad \eta(1)\, \delta(t - |x-x_0|)\, h((x-x_0)\cdot\theta) \\ &+ \rho(x_0, x_1)\, \frac{1}{|x_1 - x_0|^2}\, b(x_1)\, \eta(-1)\, \rho(x_1, x), \end{aligned} \tag{5.8}$$

mit $\tilde{x} = x + \theta(\tau' - t)$.

Wir haben also den

Satz. *Die Born-Approximation von (2.17), (2.18) lautet bei isotroper Einstrahlung (5.1)*

$$u_B(x,\theta,t;x_0,\theta_0) = u_0(x,\theta,t) + u_1(x,\theta,t),$$

wobei $u_0(x,\theta,t)$ durch (5.2) und $u_1(x,\theta,t)$ im Falle $\theta = \frac{x-x_0}{|x-x_0|}$ durch (5.8), sonst aber durch (5.6) gegeben ist.

3.5.3 Die stationäre isotrope Born-Näherung

Abschließend seien hier noch kurz ohne Beweis die entsprechenden Formulierungen der isotropen Born-Approximation für den stationären Fall angegeben.
Für $u_0(x,\theta)$ bekommen wir mit dem Ansatz $x-x_0 = r\theta+z,\ z = E_\theta^\perp(x-x_0)$, die Darstellung

$$u_0(x,\theta) = \delta(E_\theta^\perp(x-x_0))\, h((x-x_0)\cdot\theta)\, \rho(x_0,x). \tag{5.9}$$

Z.B. durch Integration von (5.6) über alle Zeiten t folgt weiter

$$u_1(x,\theta) = \int_{x-\infty\theta}^{x} \rho(x_0,\tilde{x})\, \frac{1}{|\tilde{x}-x_0|^2}\, b(\tilde{x})\, \eta(\theta\cdot\frac{\tilde{x}-x_0}{|\tilde{x}-x_0|})\, \rho(\tilde{x},x)\, d\tilde{x}. \tag{5.10}$$

Für nähere Einzelheiten verweisen wir auf Natterer [133].

3.6 Explizite Darstellung der Entwicklungskoeffizienten s, s', s''.

Wir gehen aus von der eindeutigen Darstellung

$$x - x_0 = s\theta + s'\theta' + s''\theta_0$$

mit linear unabhängigen Einheitsvektoren $\theta, \theta', \theta_0$. Projektion auf diese liefert:

$$\begin{aligned}
(x-x_0)\cdot\theta &= s + s'\theta'\cdot\theta + s''\theta_0\cdot\theta, \\
(x-x_0)\cdot\theta' &= s\theta\cdot\theta' + s' + s''\theta_0\cdot\theta', \\
(x-x_0)\cdot\theta_0 &= s\theta\cdot\theta_0 + s'\theta'\cdot\theta_0 + s''.
\end{aligned}$$

Sei $\alpha := \theta\cdot\theta'$, $\beta := \theta\cdot\theta_0$, $\gamma := \theta'\cdot\theta_0$, so folgt ein inhomogenes lineares Gleichungssystem für die Unbekannten s, s' und s'':

$$\begin{aligned} 1 \cdot s + \alpha s' + \beta s'' &= (x - x_0) \cdot \theta, \\ \alpha s + 1 \cdot s' + \gamma s'' &= (x - x_0) \cdot \theta', \\ \beta s + \gamma s' + 1 \cdot s'' &= (x - x_0) \cdot \theta_0. \end{aligned}$$

Dieses ist eindeutig nach s, s' und s'' auflösbar.

3.7 Rekonstruktionsverfahren

Wir haben im Vorangegangenen explizite Darstellungen der ungestreuten, einmal gestreuten und zweimal gestreuten Strahlung für einige Fälle deltaförmiger Strahlungsquellen hergeleitet. Aus diesen Darstellungen können entsprechende Ausdrücke auch für andere Quellformen durch einfache Superposition berechnet werden.

Geht man davon aus, daß in einem physikalischen Experiment diese Anteile z.B. der ungestreuten und der einmal gestreuten Strahlen auf dem Rand des zu untersuchenden Gebietes $\partial\Omega$ ermittelt werden können (etwa durch Ausnutzung ihres singulären Charakters), so ist es nicht mehr schwierig, daraus Rückschlüsse auf die Absorptions- und Streueigenschaften innerhalb des Gebietes Ω zu ziehen. Wir wollen dies kurz vorführen. (Vgl. dazu auch Antyufeev und Bondarenko [10] und Choulli und Stefanov [47].) Im Kapitel 4 werden wir zudem ein ähnliches Verfahren vorschlagen, bei welchem jedoch die Verteilung der mehrfach gestreuten Strahlung zusätzlich zu der ungestreuten Strahlung ausgenutzt wird (vgl. den Abschnitt „Separation der Singularitäten").

Nehmen wir also an, daß wir die ungestreut durch das Medium hindurchtretende Strahlung erkennen und messen können. Wir kennen somit Ausdrücke der Form (2.28),(3.6),(5.2) bzw. (5.9), je nach dem zugrundeliegenden Experiment. Tatsächlich meßtechnisch bestimmt werden dabei in allen genannten Fällen die Größen

$$\rho(x_s, x_d) \;=\; \exp\Big\{ -\int_{x_s}^{x_d} a(\tilde{x})\, d\tilde{x} \Big\}, \tag{7.1}$$

wobei x_s die Quellposition und x_d die zugehörige Detektorposition bezeichnen und das Integral sich über deren Verbindungslinie erstreckt. (Die zudem in (2.28),(3.6),(5.2) und (5.9) auftretenden *distributiven* (deltaförmigen) Anteile liefern dagegen ein Rezept dafür, *wie* diese Werte (7.1) von dem regulären Hintergrund abgesondert werden können. (Vgl. [10], [47].)

Führen wir dies für alle möglichen Kombinationen von Quellpositionen $x_s \in \partial\Omega$ und Detektorpositionen $x_d \in \partial\Omega$ durch, und logarithmieren wir die entsprechend gemessenen Werte, so haben wir nichts anderes als die *Röntgentransformation der Dämpfung $a(x)$ über das Gebiet Ω* bestimmt. Deren Invertierung ist aber ein seit langem bekanntes und zum Beispiel im Rahmen der Computertomographie längst gelöstes Problem (vgl. z.B. Natterer [128] oder Helgason [76]). Insbesondere ist die Dämpfung $a(x)$ eindeutig durch ihre Röntgentransformation in Ω bestimmt.

Somit kennen wir $a(x)$. Nehmen wir nun an, daß wir zudem die einmal gestreute Strahlung absondern und messen können. Dann kennen wir also außerdem noch Ausdrücke der Form (2.34),(3.10),(5.6) bzw. (5.10), je nach Experiment. Die Ausdrücke (2.34) und (3.10) bestehen dabei im wesentlichen aus einem Anteil

$$\rho(x_0, x_1)\, b(x_1)\, \eta(\theta_0 \cdot \theta)\, \rho(x_1, x), \tag{7.2}$$

(wobei x_1 gerade den Ort des Streuvorgangs bezeichnet) und dem zugehörigen deltaförmigen Anteil. Mit Hilfe des letzteren läßt sich wie im Falle der ungestreuten Strahlung der einmal gestreute Anteil vom regulären Hintergrund absondern (vgl. [10]). Zudem läßt sich mit ihm der Streuort x_1 ermitteln.

Da $\rho(x_0, x_1)$ und $\rho(x_1, x)$ bereits bekannt sind, bleiben nur noch $b(x_1)$ und $\eta(\theta_0 \cdot \theta)$ zu rekonstruieren. Dies ist aber grundsätzlich kein Problem. Ein naheliegendes Verfahren wird von Antyufeev und Bondarenko angegeben: Denn nach einer geeigneten Diskretisierung von $\eta(\theta_0 \cdot \theta)$ im Winkel θ ist hierzu nur ein Gleichungssystem mit Unbekannten x_1 und $\eta(\theta_0 \cdot \theta_i)$, $(i = 1, \ldots, N)$, aufgrund von N Meßwerten und einer Normierungsbedingung für η zu lösen. Dieses Vorgehen funktioniert auch bei ortsabhängigem $\eta = \eta(x_1, \theta_0 \cdot \theta)$, vgl. dazu [10]. Also sind auch $b(x)$ und $\eta(\theta \cdot \theta')$ in Ω eindeutig aus der Messung ungestreuter und einmal gestreuter Strahlen rekonstruierbar.

Dies stimmt zumindest theoretisch. Praktisch stellen deltaförmige Quellen eine Idealisierung dar und können nie exakt konstruiert werden. Auch die Detektoren haben immer eine Ausdehnung und einen gewissen Öffnungswinkel. E.W. Larsen hat, wie oben bereits erwähnt wurde, schon in [103] auf solche meßtechnischen Probleme hingewiesen.

Ein weiteres Problem ist schon mehrfach erwähnt worden: Die singulären Anteile werden mit wachsendem Streukoeffizienten $b(x)$ in Ω und mit regulärem η zunehmend von dem regulären Anteil der Strahlung verdeckt und können bei ungünstigen Bedingungen (wie sie etwa bei der Verwendung von Strahlung im nahen Infrarotbereich bei der Lasertomographie auftreten) praktisch nicht mehr in den Messungen nachgewiesen werden.

Selbst bei vorhandenem stark ausgeprägtem singulären Anteil ist eine aufwendige Detektorkonstruktion notwendig, um etwa den einmal gestreuten Anteil von dem regulären Hintergrund unterscheiden zu können. Vgl. dazu etwa Antyufeev und Bondarenko [10].

Kapitel 4

Die Diffusionsapproximationen der Transportgleichung

4.1 Die $\mathcal{P}_1$-Approximation

4.1.1 Grundlagen

Wir betrachten die lineare Transportgleichung

$$\frac{1}{c}\frac{\partial u}{\partial t}+\theta\cdot\nabla u(x,\theta,t)+a(x)u(x,\theta,t) = b(x)\int_{S^{n-1}}\eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta'+q(x,\theta,t), \tag{1.1}$$

$(x,\theta,t)\in\mathbb{R}^n\times S^{(n-1)}\times\mathbb{R}$. Dabei seien $a(x), b(x), \eta(\theta\cdot\theta')\geq 0$, $a(x)\geq b(x)$, $c>0$ und weiter gelte

$$\int_{S^{n-1}}\eta(\theta\cdot\theta')d\theta' = 1. \tag{1.2}$$

Physikalisch wird durch Gleichung (1.1) die Ausbreitung neutraler Partikel durch ein Medium beschrieben, wobei angenommen wird, daß die Teilchen ausschließlich mit dem Medium und nicht untereinander wechselwirken. Die Konstante c gibt dabei die Geschwindigkeit der Teilchen an, $q(x,\theta,t)$ ist der von u unabhängige Quellterm, $u(x,\theta,t)$ die durch q und durch evtl. vorhandene Anfangs- und Randbedingungen hervorgerufene Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens. Dies ist die Wahrscheinlichkeit, sich zur Zeit

t am Ort x mit der Geschwindigkeit $c\theta$ zu bewegen. θ gibt somit eine Richtung an. $a(x)$ ist der totale Wirkungsquerschnitt, $b(x)$ der Streuquerschnitt. Die Größe $\sigma_a(x) = a(x) - b(x)$ wird gemeinhin als Absorptionsquerschnitt bezeichnet, und $\eta(\theta \cdot \theta^{'})$ ist die bei einem Streuvorgang auftretende Winkelverteilung der gestreuten Partikel. Die gesamte Gleichung (1.1) stellt eine Bilanzgleichung dar.

Wir wollen hier zunächst von einem unendlich ausgedehnten Medium ausgehen. Zudem soll Gleichung (1.1) für alle Zeiten gelten. Damit brauchen wir (zunächst) keine Rand- oder Anfangsbedingungen zu betrachten.
Wir führen drei für die $\mathcal{P}_1$-Approximation wichtige Momente ein.

$$\begin{aligned} \Phi(x,t) &:= \int_{S^{n-1}} u(x,\theta,t)d\theta\,, \\ J(x,t) &:= \int_{S^{n-1}} \theta\, u(x,\theta,t)d\theta\,, \\ T(x,t) &:= \int_{S^{n-1}} \theta \otimes \theta\, u(x,\theta,t)d\theta. \end{aligned}$$

Hierbei ist $\Phi(x,t)$ eine skalare Größe und gibt die Photonendichte am Ort x zur Zeit t an. Die vektorielle Größe $J(x,t)$ hat die Bedeutung einer Stromdichte am Ort x zur Zeit t. Das Symbol $\otimes$ bezeichnet das Tensorprodukt zweier Vektoren. Wir werden im folgenden einfach $\theta\theta$ statt $\theta \otimes \theta$ schreiben, da keine Mißverständnisse zu befürchten sind.
Dem Tensor $T(x,t)$ kommt keine direkte physikalische Bedeutung zu. Er kann komponentenweise dargestellt werden als

$$T = (T_{ij})_{i,j=1,\ldots,n} = (\int_{S^{n-1}} \theta_i\theta_j u d\theta)_{i,j=1,\ldots,n}\,,$$

wenn θ_i, θ_j die kartesischen Koordinaten des Richtungsvektors θ bezeichnen.

Beispielsweise berechnet sich damit die Spur von T als

$$\begin{aligned} \operatorname{Spur} T &= \int (\theta_1\theta_1 u + \theta_2\theta_2 u + \ldots + \theta_n\theta_n u)d\theta \\ &= \int (\theta \cdot \theta) u d\theta = \int u\, d\theta = \Phi(x,t), \end{aligned}$$

so daß man einen spurfreien Tensor einführen kann gemäß

$$T_0(x,t) = T(x,t) - \frac{1}{n}\Phi(x,t)\,\delta.$$

δ ist hier der Einheitstensor mit $\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und $\delta_{ij} = 0$ für $i \neq j$ $(i, j = 1 \dots, n)$. Wir werden diesen spurfreien Tensor hier nicht weiter verwenden. (Vgl. aber z.B. [88].)
Im folgenden werden wir einige Identitäten der Vektoranalysis benötigen. Wir formulieren sie für den Fall $n = 3$, d.h. die Integrationen erstrecken sich jeweils über die Einheitssphäre S^2 im $\mathbf{R}^3$. Generell sei für den Rest dieses Kapitels immer der physikalisch relevante Fall dreier Raumdimensionen vorausgesetzt, obwohl die meisten Beziehungen sich -evtl. mit einigen Abänderungen- auch in anderen Dimensionen formulieren lassen. Es gelten also im $\mathbf{R}^3$

$$\begin{aligned}
&(i) && \int 1 d\theta = 4\pi, \\
&(ii) && \int \theta d\theta = 0, \\
&(iii) && \int \theta \cdot A d\theta = 0, \\
&(iv) && \int \theta(\theta \cdot A) d\theta = \frac{4\pi}{3} A, \\
&(v) && \int (\theta \cdot A)(\theta \cdot B) d\theta = \frac{4\pi}{3} A \cdot B, \\
&(vi) && \int \theta(A \cdot \theta)(B \cdot \theta) d\theta = 0.
\end{aligned} \tag{1.3}$$

Hierbei sind A, B irgendwelche Vektoren (wobei auch der Nabla-Operator formal als Vektor aufgefaßt werden kann).

4.1.2 Direkte Herleitung der $\mathcal{P}_1$-Approximation

Ausgehend von den bislang erwähnten Eigenschaften wollen wir nun die sogenannte $\mathcal{P}_1$-Approximation an die Transportgleichung herleiten. Sie bildet den Ausgangspunkt für die in zahlreichen Anwendungen sicherlich am meisten verwendete Approximation dieser Gleichung, nämlich die Diffusionsnäherung. Auf diese werden wir in einem nachfolgenden Abschnitt näher eingehen.
Aufgrund der Normierungsbedingung (1.2) gilt die Beziehung

$$\int_{S^{n-1}} \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') u(x, \theta', t) \, d\theta' \, d\theta \tag{1.4}$$

$$= \int_{S^{n-1}} (\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) d\theta)\, u(x,\theta^{'},t) d\theta^{'} \;=\; \int_{S^{n-1}} u(x,\theta,t) d\theta.$$

Wir multiplizieren nun Gleichung (1.1) mit 1 und integrieren über alle Winkel θ. Wir erhalten

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\int u\, d\theta + \int \theta \cdot \nabla u\, d\theta + a(x)\int u\, d\theta =$$

$$b(x)\int\int \eta(\theta \cdot \theta^{'}) u(x,\theta^{'},t)\, d\theta^{'} d\theta + \int q(x,\theta,t)\, d\theta.$$

Setzen wir nun

$$\begin{aligned} \sigma_a(x) \;&:=\; a(x) - b(x), \\ q_0(x,t) \;&:=\; \int q(x,\theta,t)\, d\theta \end{aligned}$$

und berücksichtigen wir (1.4) und $\theta \cdot \nabla = \nabla \cdot \theta$, so folgt

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot J(x,t) + \sigma_a(x)\Phi(x,t) = q_0(x,t). \tag{1.5}$$

Diese Erhaltungsgleichung muß von jeder Lösung von (1.1) erfüllt werden.

Als nächstes multiplizieren wir Gleichung (1.1) mit θ und integrieren über alle Winkel θ. Wir erhalten

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\int \theta u d\theta \;+\; \int \theta\theta \cdot \nabla u d\theta \;+\; a(x)\int \theta u d\theta \tag{1.6}$$

$$=\; b(x)\int\int \eta(\theta \cdot \theta^{'})\theta u(x,\theta^{'},t) d\theta d\theta^{'} \;+\; \int \theta q(x,\theta,t) d\theta.$$

Es gilt wegen $\theta \cdot \nabla = \nabla \cdot \theta$

$$\int \theta\theta \cdot \nabla u d\theta = \int \nabla \cdot \theta\theta u d\theta = \nabla \cdot \int \theta\theta u d\theta = \nabla \cdot T(x,t).$$

Weiter gilt mit noch zu bestimmendem α (Vgl. [38], S.198)

$$\int_{S^{n-1}} \theta^{'} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) d\theta^{'} \;=\; \alpha\theta.$$

Den Faktor α bekommen wir durch Projektion auf θ

$$\alpha = \alpha\theta \cdot \theta = \int_{S^{n-1}} \theta^{'} \cdot \theta \eta(\theta^{'} \cdot \theta) d\theta^{'} \;=:\; \bar{\mu}_0.$$

$\bar{\mu}_0$ hat die physikalische Bedeutung des mittleren Streukosinus.
Damit folgt

$$\begin{aligned} & b(x)\int\int \eta(\theta\cdot\theta')\theta u(x,\theta',t)\,d\theta d\theta' \\ = \;& b(x)\int u(x,\theta',t)\,(\int \theta\eta(\theta\cdot\theta')d\theta)\,d\theta' \\ = \;& b(x)\int u(x,\theta',t)\bar{\mu}_0\theta' d\theta' \\ = \;& b(x)\bar{\mu}_0 J(x,t). \end{aligned}$$

Weiter definieren wir die vektorielle Größe

$$q_1(x,t) \;:=\; \int_{S^{n-1}} \theta q(x,\theta,t)d\theta.$$

Damit folgt aus (1.6)

$$\frac{1}{c}\frac{\partial J}{\partial t} + \nabla\cdot T(x,t) + a(x)J(x,t) \;=\; \bar{\mu}_0 b(x)J(x,t) + q_1(x,t). \tag{1.7}$$

Definieren wir also

$$\sigma_{tr}(x) \;:=\; a(x) - \bar{\mu}_0 b(x),$$

so lautet schließlich unser System (1.5),(1.7):

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \nabla\cdot J + \sigma_a\phi &= q_0, \\ \frac{1}{c}\frac{\partial J}{\partial t} + \nabla\cdot T + \sigma_{tr}J &= q_1. \end{aligned} \tag{1.8}$$

Dieses System ist noch exakt und muß von jeder Lösung der Transportgleichung (1.1) identisch erfüllt werden. Es enthält keinerlei Näherungen. Allerdings ist es nicht geschlossen, da es mehr Unbekannte als Gleichungen enthält.

Man kann (1.8) dadurch in ein geschlossenes System überführen, daß man das höhere Moment $T(x,t)$ durch die niedrigeren Momente Φ, J ausdrückt. Dies geschieht z.B. dadurch, daß $u(x,\theta,t)$ als nur schwach vom Winkel θ abhängig angesehen wird, also linear in θ approximiert werden kann:

$$u(x,\theta,t) \doteq A(x,t) + B(x,t)\cdot\theta.$$

Die Koeffizienten A, B bekommen wir durch Projektion

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4\pi}\int_{S^{n-1}}(A+B\cdot\theta)ud\theta = \frac{1}{4\pi}\int_{S^{n-1}}ud\theta = \frac{1}{4\pi}\phi, \\
B &= \frac{1}{4\pi}\int_{S^{n-1}}\theta(A+B\cdot\theta)ud\theta = \frac{3}{4\pi}\int_{S^{n-1}}\theta ud\theta = \frac{3}{4\pi}J.
\end{aligned}
$$

Damit folgt

$$
u(x,\theta,t) \doteq \frac{1}{4\pi}\Phi(x,t) + \frac{3}{4\pi}J(x,t)\cdot\theta. \tag{1.9}
$$

Für den Term $\nabla\cdot T(x,t)$ folgt damit die Darstellung

$$
\begin{aligned}
\nabla\cdot T(x,t) &= \nabla\cdot\int\theta\theta ud\theta \\
&\doteq \nabla\cdot\int\theta\theta[\frac{1}{4\pi}\Phi + \frac{3}{4\pi}J\cdot\theta]d\theta \\
&= \frac{1}{4\pi}\int\theta\theta\cdot(\nabla\Phi)d\theta + \frac{3}{4\pi}\int\theta(\nabla\cdot\theta)(J\cdot\theta)d\theta \\
&= \frac{1}{4\pi}(\frac{4\pi}{3}\nabla\Phi) + 0 \\
&= \frac{1}{3}\nabla\Phi,
\end{aligned}
$$

wobei $\nabla\cdot\theta = \theta\cdot\nabla$ und die Beziehungen (1.3) (iv),(vi) verwendet wurden. Einsetzen in (1.8) ergibt die $\mathcal{P}_1$-*Approximation*

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \nabla\cdot J + \sigma_a\Phi &= q_0, \\
\frac{1}{c}\frac{\partial J}{\partial t} + \frac{1}{3}\nabla\Phi + \sigma_{tr}J &= q_1,
\end{aligned} \tag{1.10}
$$

$$
\begin{aligned}
\sigma_a(x) &= a(x) - b(x), \\
\sigma_{tr}(x) &= a(x) - \bar{\mu}_0 b(x),
\end{aligned}
$$

$$
q_0 = \int_{S^{n-1}} qd\theta, \qquad q_1 = \int_{S^{n-1}}\theta qd\theta.
$$

Die erste der Gleichungen (1.10) ist eine skalare, die zweite eine vektorielle Gleichung. Zusammen haben wir also in der $\mathcal{P}_1$-Aproximation ein System aus $n+1$ Gleichungen für $n+1$ Unbekannte.

Analog zur Entwicklung (1.10) von $u(x, \theta, t)$ in eine Taylorreihe kann auch q in eine Taylorreihe in θ entwickelt werden. Die ersten beiden Glieder bekommen wir auch hier durch Projektion auf 1 und θ.

$$q(x, \theta, t) \doteq \frac{1}{4\pi} q_0 + \frac{3}{4\pi} q_1 \cdot \theta.$$

q_1 ist hierbei wieder eine vektorielle Größe, analog zu J in der Entwicklung von u.

4.2 Die allgemeine $\mathcal{P}_N$-Approximation

4.2.1 Kugelflächenfunktionen

Wir betrachten den Fall $n = 3$. Ein Vektor $\theta \in S^2$ hat hier die kartesische und sphärische Darstellung

$$\theta = (\theta_x, \theta_y, \theta_z) = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta).$$

Mit $\mu = \cos\vartheta$ können wir auch schreiben $\theta = (\mu, \varphi)$. Für das Winkelelement $d\theta$ gilt $d\theta = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$.
Wir definieren die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta)$ durch

$$Y_{lm}(\theta) := \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} P_l^{|m|}(\mu) e^{im\phi}, \tag{2.11}$$

$l = 0, 1, 2, \ldots,\ m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l.$
$P_l^{|m|}(\mu)$ sind hierbei die zugeordneten Legendre-Polynome. (Vgl. z.B. [38] oder [83]). Die Y_{lm} bilden bekanntlich ein vollständiges orthogonales Funktionensystem. Es gilt die *Orthogonalitätsbeziehung*

$$\int_{S^{n-1}} Y^*_{lm}(\theta) Y_{l'm'}(\theta) d\theta = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{2.12}$$

($*$ = konjugiert komplex). Es gilt offenbar der Zusammenhang $Y_{l,-m}(\theta) = (-1)^m Y^*_{lm}(\theta)$.

Eine Beziehung zwischen den Kugelflächenfunktionen und den Legendrepolynomen vermittelt das folgende *Additionstheorem*

$$\begin{aligned} P_l(A \cdot B) &= \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(A) Y_{lm}(B) \\ &= \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(A) Y^*_{lm}(B). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Die $P_l(\mu)$ sind hier die Legendre-Polynome, $A, B \in S^2$. Zudem gelten die im folgenden nützlichen Darstellungen

$$
\begin{aligned}
\theta_x &= \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{1,0}(\theta), \\
\theta_y &= \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \left[Y_{1,-1}(\theta) - Y_{1,1}(\theta)\right], \qquad (2.14) \\
\theta_z &= i\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \left[Y_{1,-1}(\theta) + Y_{1,1}(\theta)\right].
\end{aligned}
$$

Wir erwähnen noch die *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\theta')Y_{lm}(\theta) = \delta(\theta - \theta'). \qquad (2.15)$$

4.2.2 Entwicklung der Transportgleichung

Wir wollen die lineare Transportgleichung (1.1) in Kugelflächenfunktionen entwickeln. Dazu setzen wir an

$$
\begin{aligned}
u(x,\theta,t) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \psi_{lm}(x,t)Y_{lm}(\theta), \qquad (2.16) \\
q(x,\theta,t) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} q_{lm}(x,t)Y_{lm}(\theta), \qquad (2.17) \\
\eta(\theta\cdot\theta') &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} f_l P_l(\theta\cdot\theta') \\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} f_l Y^*_{lm}(\theta')Y_{lm}(\theta). \qquad (2.18)
\end{aligned}
$$

Die Koeffizienten ψ_{lm}, q_{lm} und f_l berechnen sich dabei über die Orthogonalitätsrelationen, z.B.

$$\psi_{lm}(x,t) = \int_{S^{n-1}} u(x,\theta,t)Y^*_{lm}(\theta)d\theta.$$

Insbesondere haben die Koeffizienten niedriger Ordnung eine direkte physikalische Bedeutung:

$$\psi_{0,0}(x,t) = \int_{S^{n-1}} u(x,\theta,t)d\theta = \Phi(x,t), \tag{2.19}$$

$$\text{und} \quad J(x,t) = \int_{S^{n-1}} \theta u(x,\theta,t)d\theta = (J_x, J_y, J_z)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad J_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{1,-1} - \psi_{1,1}\right], \\ J_y &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\psi_{1,-1} + \psi_{1,1}\right], \\ J_z &= \psi_{1,0}. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Setzen wir also (2.16),(2.17) und (2.18) in (1.1) ein, so bekommen wir

$$\begin{aligned} &(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \theta\cdot\nabla + a(x))\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\psi_{lm}(x,t)Y_{lm}(\theta)\right] \\ &= b(x)\int\left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} f_l Y^*_{lm}(\theta')Y_{lm}(\theta)\right]\times \\ &\quad \left[\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\psi_{lm}(x,t)Y_{lm}(\theta)\right]d\theta' \\ &\quad + \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} q_{lm}(x,t)Y_{lm}(\theta). \end{aligned} \tag{2.21}$$

Ausmultiplizieren, Multiplikation mit $Y^*_{\lambda\mu}(\theta)$ und Integration über alle Winkel θ liefert, wenn wir die Orthogonalitätsbeziehungen ausnutzen, für jedes (λ,μ) die Gleichung (Vgl. Case und Zweifel)

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right)\left[\left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\psi_{\lambda\mu}\right] + \\ &+ \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(\nabla\psi_{lm})\cdot\left(\int\theta Y_{lm}(\theta)Y^*_{\lambda\mu}(\theta)d\theta\right) \\ &= \left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} b(x)f_\lambda\psi_{\lambda\mu} + \left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} q_{\lambda\mu}. \end{aligned} \tag{2.22}$$

Die vektorielle Größe $\int \theta Y_{lm}(\theta) Y^*_{\lambda\mu}(\theta) d\theta$ läßt sich komponentenweise vereinfachen mittels einiger Rekursionsbeziehungen für die Kugelflächenfunktionen, z.B.

$$\theta_z Y_{lm}(\theta) = \left(\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l+1,m} + \left(\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l-1,m}.$$

Ähnliche Beziehungen gelten für θ_x und θ_y. Damit läßt sich die verbleibende Integration durchführen und wir erhalten für die $\psi_{\lambda\mu}$ das System von Gleichungen (Vgl. Case und Zweifel):

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + a(x) \right) \psi_{\lambda\mu} \\
&+ \frac{1}{2\lambda+1} \Bigg[(\lambda+1-\mu)^{\frac{1}{2}} (\lambda+1+\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{\lambda+1,\mu} \\
&\qquad + (\lambda-\mu)^{\frac{1}{2}} (\lambda+\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{\lambda-1,\mu} \\
&- \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Big\{ (\lambda+\mu)^{\frac{1}{2}} (\lambda+\mu-1)^{\frac{1}{2}} \psi_{\lambda-1,\mu-1} \\
&\qquad - (\lambda-\mu+2)^{\frac{1}{2}} (\lambda-\mu+1)^{\frac{1}{2}} \psi_{\lambda+1,\mu-1} \Big\} \\
&- \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Big\{ - (\lambda-\mu)^{\frac{1}{2}} (\lambda-\mu-1)^{\frac{1}{2}} \psi_{\lambda-1,\mu+1} \\
&\qquad + (\lambda+\mu+1)^{\frac{1}{2}} (\lambda+\mu+2)^{\frac{1}{2}} \psi_{\lambda+1,\mu+1} \Big\} \Bigg] \\
&= b(x) f_\lambda \psi_{\lambda\mu} + q_{\lambda\mu}(x,t),
\end{aligned} \tag{2.23}$$

($\lambda = 0, 1, 2, \ldots,\ \mu = -\lambda, -\lambda+1, \ldots, \lambda-1, \lambda$). Die Terme $\psi_{\lambda,\mu}$, bei denen mindestens ein negativer Index λ, μ auftritt, sind dabei Null zu setzen. Dieses gekoppelte System von Differentialgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten $\psi_{\lambda,\mu}$ ist noch exakt und völlig äquivalent zur Transportgleichung (1.1). Kaltenbach und Kaschke bezeichnen dieses System als *Boltzmann-Hierarchie.*

Die *$\mathcal{P}_N$-Approximation* bekommen wir nun aus diesem System (2.23), indem wir nur die Gleichungen für die ersten N Entwicklungskoeffizienten $\psi_{\lambda,\mu}$, $\lambda = 0, 1, \ldots, N$ betrachten und alle auftretenden Koeffizienten mit

$\lambda > N$ vernachlässigen. Dieses Vorgehen liefert uns dann ein geschlossenes System von

$$\sum_{l=0}^{N}(2l+1) = (N+1)^2$$

Gleichungen in ebensovielen Unbekannten.

Analoge Darstellungen der $\mathcal{P}_N$-Approximation findet der Leser auch in den Standardwerken über Neutronentransport [38], [52], [183], [187], und in dem Artikel [88] von Kaltenbach und Kaschke.

4.2.3 Noch einmal die $\mathcal{P}_1$-Approximation

Wir wollen zeigen, daß der soeben dargestellte Zugang zu der $\mathcal{P}_N$-Approximation für den Fall $N = 1$ dasselbe Resultat liefert wie die anfangs durchgeführte Herleitung.

Dazu schreiben wir die Gleichungen (2.23) für die Fälle $\lambda = 0\,(\mu = 0)$, $\lambda = 1\,(\mu = -1, 0, 1)$ noch einmal explizit auf.
$(\lambda = 0,\ \mu = 0)$:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right)\psi_{0,0} + \frac{\partial}{\partial z}\psi_{1,0} - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)(-\sqrt{2})\psi_{1,-1}$$
$$- \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\sqrt{2}\psi_{1,1} = b(x)f_0\psi_{0,0} + q_{0,0}.$$

$(\lambda = 1,\ \mu = 0)$:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right)\psi_{1,0} + \frac{1}{3}\Bigg[\sqrt{2}\sqrt{2} + \frac{\partial}{\partial z}\psi_{0,0}$$
$$- \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\{-\sqrt{3}\sqrt{2}\psi_{2,-1}\}$$
$$- \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\{-\sqrt{2}\sqrt{3}\psi_{2,1}\}\Bigg] = b(x)f_1\psi_{1,0} + q_{1,0}.$$

$(\lambda = 1,\ \mu = -1)$:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right)\psi_{1,-1} + \frac{1}{3}\Bigg[\sqrt{3}\frac{\partial}{\partial z}\psi_{2,-1} - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \times$$
$$\{-2\sqrt{3}\psi_{2,-2} - \}\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\{-\sqrt{2}\psi_{0,0} + \sqrt{2}\psi_{2,0}\}\Bigg]$$

$$= b(x) f_1 \psi_{1,-1} \; + \; q_{1,-1}.$$

$(\lambda = 1,\, \mu = 1)$:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) \psi_{1,-1} \; + \; \frac{1}{3}\left[\sqrt{3}\frac{\partial}{\partial z}\psi_{2,1} \; - \; \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \times \right.$$

$$\left. \{\sqrt{2}\psi_{0,0} - \sqrt{2}\psi_{2,0}\} \; - \; \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\{2\sqrt{3}\psi_{2,2}\}\right]$$

$$= b(x) f_1 \psi_{1,1} \; + \; q_{1,1}.$$

Vernachlässigen wir nun alle Glieder $\psi_{2,\mu}$, so bekommen wir die $\mathcal{P}_1$-*Approximation.* Sie lautet

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) \psi_{0,0} \; + \; \frac{\partial}{\partial z}\psi_{1,0} \; + \; \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial x}(\psi_{1,-1} - \psi_{1,1}) \tag{2.24}$$

$$- \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial y}(\psi_{1,-1} + \psi_{1,1}) \; = \; b(x) f_0 \psi_{0,0} \; + \; q_{0,0}.$$

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) \psi_{1,0} \; + \; \frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial z}\psi_{0,0} \; = \; b(x) f_1 \psi_{1,0} \; + \; q_{1,0}. \tag{2.25}$$

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) \psi_{1,-1} \; + \; \frac{\sqrt{2}}{6}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_{0,0} \; = \; b(x) f_1 \psi_{1,-1} \; + \; q_{1,-1}. \tag{2.26}$$

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) \psi_{1,-1} \; - \; \frac{\sqrt{2}}{6}\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_{0,0} \; = \; b(x) f_1 \psi_{1,1} \; + \; q_{1,1}. \tag{2.27}$$

Dabei enthält Gleichung (2.24) noch keinerlei Approximation, sie ist also exakt. Mit (2.19), (2.20) bekommt sie die folgende physikalische Bedeutung:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \Phi}{\partial t} + a(x)\Phi(x,t) + \nabla \cdot J(x,t) = b(x) f_0 \Phi(x,t) + q_{0,0}. \tag{2.28}$$

Wegen $f_0 \equiv 1$ entspricht dies der Gleichung (1.5) bzw. der ersten der beiden Gleichungen in (1.9) mit $q_{0,0} = q_0$. Gleichung (2.28) drückt eine Art Partikel-Balancegleichung in dem System aus.

Die weiteren drei Gleichungen stellen dagegen eine Approximation dar. (Es wurden Terme höherer Ordnung vernachlässigt.) Wir wollen auch diese in eine physikalisch anschauliche Form bringen. Mit Hilfe von (2.20) läßt sich (2.25) schreiben als

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) J_z + \frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial z}\psi_{0,0} = b(x) f_1 J_z + q_{1,0}. \tag{2.29}$$

Addieren wir (2.26) und (2.27) miteinander, so folgt

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) J_y + \frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial y}\psi_{0,0} = b(x) f_1 J_y + \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{1,-1} + q_{1,1}). \tag{2.30}$$

Subtraktion von (2.27) von (2.26) liefert dagegen

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + a(x)\right) J_x + \frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial x}\psi_{0,0} = b(x) f_1 J_x + \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{1,-1} - q_{1,1}). \tag{2.31}$$

Setzen wir
$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{1,-1} - q_{1,1}), \\ S_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{1,-1} + q_{1,1}), \\ S_z &= q_{1,0}, \qquad S = (S_x, S_y, S_z), \end{aligned}$$

so schreibt sich (2.29),(2.30),(2.31) in vektorieller Form als

$$\frac{1}{c}\frac{\partial J}{\partial t} + a(x) J(x,t) + \frac{1}{3}\nabla\Phi = b(x) f_1 J + S. \tag{2.32}$$

Dies ist gerade die zweite der Gleichungen (1.9) mit $f_1 = \bar{\mu}_0$ und $S = q_1$.

Somit haben wir in (2.28),(2.32) wieder unsere bekannte Form der $\mathcal{P}_1$-Approximation (1.9) gefunden.

4.2.4 Kurze Diskussion des gekoppelten Systems

Das System (2.23) stellt ein gekoppeltes System von Gleichungen für die Koeffizienten ψ_{lm} dar, welches der Transportgleichung (1.1) völlig äquivalent ist. Die Kopplung findet ausschließlich statt über den Advektionsterm $\theta \cdot \nabla$. Ist dieser gleich Null, d.h. findet kein Transport statt, so sind die Gleichungen entkoppelt.

Bricht man das System bei der Ordnung N ab, so bekommt man kein geschlossenes System, da in der N-ten Gleichung Koeffizienten $(N+1)$-ter Ordnung enthalten sind. Die $\mathcal{P}_N$-Approximation vernachlässigt gerade diese störenden Terme und liefert somit ein geschlossenes System.

Weinberg und Wigner geben eine interessante Interpretation der so vernachlässigten Terme im Zusammenhang mit den Navier-Stokes-Gleichungen der Hydrodynamik (vgl. Weinberg und Wigner [183]). Dort sind dies gerade die Nicht-Diagonalelemente des Stress-Tensors. Man beachte, daß auch nicht verschwindende, dafür aber konstante, Nicht-Diagonalelemente ebenfalls diese Terme höherer Ordnung zum Verschwinden bringen, da lediglich deren Ableitungen in das System eingehen.

4.3 Approximation durch Diffusionsmodelle

Bei starker Streuung nimmt die Ausbreitung der Teilchen im Medium schnell diffusionsähnlichen Charakter an. Dies führte schon früh dazu, in solchen Fällen die schwierig zu handhabende Transportgleichung durch einfacher zu bewältigende Diffusionsmodelle zu approximieren. Diese haben jedoch alle den Nachteil, in der Nähe anisotroper Quellen und an den Rändern des Gebietes relativ ungenau zu sein. Insbesondere im Rahmen inverser Transportprobleme wirft dies einige Schwierigkeiten auf.

4.3.1 Die Telegraphen-Approximation

Wir gehen aus von der $\mathcal{P}_1$-Approximation (1.9) bzw. (2.28),(2.32). Dort ist bereits der Fluß $u(x,\theta,t)$ linear approximiert worden (vgl. (1.9)). In der Nähe stark anisotroper Quellen und an den Rändern des Gebietes kann dies schon einen Fehler darstellen.

Definieren wir den *Diffusionskoeffizienten* D durch

$$D(x) = \frac{1}{3\sigma_{tr}(x)} = \frac{1}{3(a-\bar{\mu}_0 b)},$$

so schreibt sich (1.10) als

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + c\nabla\cdot J + c\sigma_a \Phi &= cq_0, &(3.33)\\ \frac{3D}{c}\frac{\partial J}{\partial t} + D\nabla\Phi + J &= 3Dq_1. &(3.34)\end{aligned}$$

Differenzieren von (3.33) nach der Zeit liefert

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + c\nabla\cdot\frac{\partial J}{\partial t} + c\sigma_a\frac{\partial \Phi}{\partial t} = c\frac{\partial q_0}{\partial t}. \qquad (3.35)$$

Setzen wir nun (3.34) in (3.35) ein, so folgt weiter

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{c^2}{3D}\nabla\cdot[3Dq_1 - D\nabla\Phi - J] + c\sigma_a\frac{\partial \Phi}{\partial t} = c\frac{\partial q_0}{\partial t}. \qquad (3.36)$$

Somit also

$$\frac{3D}{c^2}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + 3D\nabla\cdot q_1 - \nabla\cdot D\nabla\Phi - \nabla\cdot J + \frac{3D\sigma_a}{c}\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{3D}{c}\frac{\partial q_0}{\partial t}.$$

Mittels (3.33) können wir nun noch $\nabla\cdot J$ eliminieren. Wir erhalten

$$\frac{3D}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - \nabla\cdot D\nabla\Phi + \frac{1}{c}(1+3D\sigma_a)\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \sigma_a\Phi$$
$$= \frac{3D}{c}\frac{\partial q_0}{\partial t} - 3D\nabla\cdot q_1 + q_0. \tag{3.37}$$

Diese Darstellung hat die Form einer *Telegraphengleichung*. Sie beschreibt die Form einer gedämpften Welle im Raum, welche zugleich einer Diffusion unterworfen ist. Der effektive Quellterm beträgt

$$S_1 := \frac{3D}{c}\frac{\partial q_0}{\partial t} + q_0 - 3D\nabla\cdot q_1.$$

Man beachte, daß (3.37) nicht mehr äquivalent zu (3.33),(3.34) ist, da lediglich das Verhalten von $\Phi(x,t)$ beschrieben wird. Allerdings ist bislang explizit noch keine weitere Näherung bzgl. der $\mathcal{P}_1$-Approximation vorgenommen worden.

Der Wellencharakter trägt der Tatsache Rechnung, daß sich Teilchen nur mit endlicher Geschwindigkeit c im Medium ausbreiten. Die Gruppengeschwindigkeit einer fortschreitenden Welle ist aufgrund des zusätzlichen Diffusionsanteils allerdings kleiner als c, nämlich $\frac{c}{\sqrt{3}}$. (Vgl. Weinberg und Wigner [183], S.236, oder Ishimaru [79].)

4.3.2 Die Diffusionsapproximation

Die in Anwendungen zumeist verwendete Diffusionsapproximation ergibt sich aus (3.33),(3.34), wenn man in (3.34)

$$\frac{3D}{c}\frac{\partial J}{\partial t} \equiv 0 \quad , \quad q_1 \equiv 0 \tag{3.38}$$

setzt. Sie setzt also voraus, daß die Quelle isotrop ist und daß sich der Strom J zeitlich an einem gegebenen festen Ort x kaum ändert oder aber die Geschwindigkeit c betragsmäßig sehr viel größer als D ist. Es folgt dann aus (3.34) das sogenannte *Ficksche Diffusionsgesetz*

$$J(x,t) = -D(x)\nabla\Phi(x,t). \tag{3.39}$$

Setzen wir dies in (3.33) ein, so resultiert die *Diffusionsnäherung*

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} - \nabla\cdot D(x)\nabla\Phi(x,t) + \sigma_a(x)\Phi(x,t) = q_0(x,t). \tag{3.40}$$

Diese betrachtet im Gegensatz zur Telegraphengleichung die Ausbreitung von Störungen im Medium als unendlich schnell (lasse in der Telegraphennäherung c gegen unendlich gehen), was streng physikalisch natürlich nicht möglich ist. Dennoch liefert diese Approximation in vielen Fällen akzeptable Ergebnisse.

4.3.3 Diffusionsnäherung mit anisotroper Quelle

In der Praxis hat man es häufig mit anisotropen Quellen zu tun. Ein Beispiel hierfür ist das Gebiet der Lasertomographie, in dem die Quelle durch einen Laserstrahl erzeugt wird. Dieser ist naturgemäß stark gebündelt und entspricht mathematisch einem Delta-Peak in Ort, Zeit und Richtung,

$$q^{LT}(x,\theta,t) = \delta(x-x_0)\delta(t)\delta(\theta-\theta_0).$$

In der oben vorgestellten Diffusionsnäherung wird dieser Delta-Peak durch sein nulltes Moment approximiert,

$$\begin{aligned} q_0(x,t) &= \int_{S^{n-1}} q(x,\theta,t)d\theta = \int_{S^{n-1}} \delta(x-x_0)\delta(t)\delta(\theta-\theta_0)d\theta \\ &= \delta(x-x_0)\delta(t). \end{aligned} \tag{3.41}$$

Dies ist sicherlich im allgemeinen keine gute Näherung. In Anwendungen (wie zum Beispiel in der genannten Lasertomographie) behilft man sich dadurch, daß als Quellort x_0 nicht der tatsächliche Ort der Quelle angesetzt wird, sondern daß dieser stattdessen in Richtung θ_0 um eine gewisse Distanz in das Medium hineinversetzt wird. Für diese Distanz verwendet man in der Regel eine mittlere freie Weglänge und argumentiert damit, daß dies in etwa der Ort ist, an welchem der Laserstrahl durch Streuung seine ursprüngliche Orientierung verloren hat, also angenähert als isotrop angesehen werden kann. Dies dürfte im Falle eines isotropen Streugesetzes auch tatsächlich eine brauchbare Näherung sein. Im Falle stark vorwärtsgerichteter Streuung muß diese Distanz eventuell als ein Vielfaches dieser mittleren freien Weglänge angesetzt werden.

Wir wollen hier nun eine Darstellung der Diffusionsnäherung angeben, welche das in der $\mathcal{P}_1$-Approximation vorhandene Moment erster Ordnung q_1 mit berücksichtigt. Bei einer räumlich verteilten anisotropen Quelle mag dies zuweilen zu besseren Ergebnissen führen, die Anwendbarkeit im Rahmen der Lasertomographie scheint allerdings sehr begrenzt zu sein.

Statt der Näherung (3.38) fordern wir nun lediglich

$$\frac{3D}{c}\frac{\partial J}{\partial t} \equiv 0. \tag{3.42}$$

Damit folgt aus (3.34) die Beziehung

$$J = -D\nabla\Phi + 3Dq_1. \tag{3.43}$$

Somit bekommen wir als *alternative Diffusionsnäherung*

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} - \nabla\cdot D(x)\nabla\Phi + \sigma_a(x)\Phi = q_0 - 3\nabla\cdot(Dq_1). \tag{3.44}$$

Setzen wir nun noch voraus, daß der Diffusionskoeffizient in der Umgebung der Quelle räumlich konstant ist, so folgt

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} - \nabla\cdot D(x)\nabla\Phi + \sigma_a(x)\Phi = q_0 - 3D\nabla\cdot q_1. \tag{3.45}$$

4.3.4 Anwendung auf eine Laserquelle

Sei zunächst die folgende gerichtete Laserquelle gegeben

$$q^{LT}(x,\theta,t) = \delta(x-x^{(0)})\delta(t)\delta(\theta-\theta^{(0)}). \tag{3.46}$$

Wir haben hierfür das nullte Moment bereits ausgerechnet. Es beträgt

$$q_0(x,t) = \delta(x-x^{(0)})\delta(t). \tag{3.47}$$

Dies entspricht einem isotropen Lichtblitz am Ort $x^{(0)}$ zur Zeit $t^{(0)} = 0$. Für das erste Moment q_1 folgt

$$\begin{aligned} q_1(x,t) &= \int_{S^{n-1}} \theta\delta(x-x^{(0)})\delta(t)\delta(\theta-\theta^{(0)})d\theta \\ &= \theta^{(0)}\delta(x-x^{(0)})\delta(t). \end{aligned} \tag{3.48}$$

Dies ist ein in Richtung $\theta^{(0)}$ gerichteter Lichtblitz am Ort $x^{(0)}$ zur Zeit $t^{(0)} = 0$. In die Diffusionsdarstellungen (3.37) und (3.45) geht der Term $\nabla\cdot q_1$ ein. Diesen wollen wir nun berechnen.

Dazu schreiben wir die dreidimensionale Deltafunktion als Produkt dreier eindimensionaler Deltafunktionen entlang der kartesischen Achsen

$$\begin{aligned}\delta_3(x-x^{(0)}) &= \delta_1(\tilde{x}-\tilde{x}^{(0)})\delta_1(\tilde{y}-\tilde{y}^{(0)})\delta_1(\tilde{z}-\tilde{z}^{(0)}) \\ &=: \delta_{1x}\delta_{1y}\delta_{1z} \qquad , \quad x=(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}).\end{aligned}$$

Es gilt

$$\nabla\cdot q_1(x,t) = \nabla\cdot(\theta^{(0)}\delta(x-x^{(0)})\delta(t)) = \theta^{(0)}\cdot\nabla\delta(x-x^{(0)})\delta(t) \tag{3.49}$$

mit

$$\nabla\delta(x-x^{(0)}) := (\delta_{1x}^{'}\delta_{1y}\delta_{1z}, \delta_{1x}\delta_{1y}^{'}\delta_{1z}, \delta_{1x}\delta_{1y}\delta_{1z}^{'}),$$

wobei die distributiven Ableitungen der eindimensionalen Diracfunktion wie üblich definiert sind durch

$$\int \delta_{1\gamma}^{'} f(\gamma)d\gamma = -f^{'}(\gamma^{(0)}) \tag{3.50}$$

$(\gamma = \tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})$. Somit liefert unsere Laserquelle (3.46) in der Darstellung (3.45) den Beitrag

$$\begin{aligned} S_0(x,t) &:= q_0 - 3D\nabla\cdot q_1 \\ &= \delta(t)\left[\delta(x-x^{(0)}) - 3D\theta^{(0)}\cdot\nabla\delta(x-x^{(0)})\right] \\ &= \delta(t)\delta_3(x-x^{(0)}) - 3D\delta(t)[\theta_x^{(0)}\delta_{1x}^{'}\delta_{1y}\delta_{1z} + \\ &\qquad \theta_y^{(0)}\delta_{1x}\delta_{1y}^{'}\delta_{1z} + \theta_z^{(0)}\delta_{1x}\delta_{1y}\delta_{1z}^{'}]. \end{aligned}$$

Diese Darstellung entpuppt sich aufgrund des stark singulären Charakters der Quelle als recht unhandlich. Erst im Falle einer glatteren Quellverteilung bringt die Hinzunahme dieser zusätzlichen Quellterme einen faßlichen numerischen Beitrag.

Der Term $\frac{\partial}{\partial t}q_0$ in (3.37) berechnet sich analog. Die Zeitableitung macht auch hier nur distributiv Sinn.

Im Falle harmonischer Einstrahlung (sogenannte Frequency Domain)

$$q^{FD} = e^{i\omega t}\delta(x-x^{(0)})\delta(\theta-\theta^{(0)})$$

folgt in derselben Darstellung

$$
\begin{aligned}
q_0(x,t) &= e^{i\omega t}\delta(x - x^{(0)}), \\
q_1(x,t) &= e^{i\omega t}\theta^{(0)}\delta(x - x^{(0)}), \\
\frac{\partial}{\partial t} q_0 &= i\omega e^{i\omega t}\delta(x - x^{(0)}), \\
\nabla \cdot q_1(x,t) &= e^{i\omega t}\theta^{(0)} \cdot \nabla\delta(x - x^{(0)}).
\end{aligned} \tag{3.51}
$$

Sämtliche auftretende Ableitungen sind -wie die Quellfunktion selbst- auf einen Punkt konzentriert, d.h. außerhalb $x = x^{(0)}$, $t = t^{(0)} = 0$ gibt es keine Quellbeiträge.

4.4 Separation der Singularitäten

Wir wollen an dieser Stelle eine (naheliegende) Methode vorschlagen, mit welcher die oben genannten Schwierigkeiten umgangen werden können. Diese Methode ist von der Idee her nicht neu, sie wurde beispielsweise von A. Ishimaru und K. Furutsu bei der Behandlung der Singularitäten im Rahmen der Herleitung der Diffusionsapproximation in den Artikeln [79], [82] und [60] bereits angewendet. Dort wurde vor der Entwicklung der relevanten Größen in Kugelflächenfunktionen der sogenannte „kohärente Anteil“ absepariert. Dieses Vorgehen läßt sich nun erheblich verallgemeinern. Es stellt sich heraus, daß Streuterme beliebig hoher Ordnung vor dem eigentlichen Vorgang der Approximationsbildung von der Lösung absepariert und sodann gesondert behandelt werden können. Gerade in den Fällen stark singulärer Quellterme kann dies bei der Behandlung des *direkten Problems* zu erheblich genaueren Ergebnissen führen.

Auch für das *inverse Problem* kann diese Aufspaltung der Strahlung in singuläre und reguläre Anteile gegebenenfalls von Nutzen sein. Dann nämlich, wenn bei einer gegebenen Parameterkonstellation der Anteil ungestreuter Teilchen meßtechnisch erfaßt werden kann, der verbleibende Anteil gestreuter Strahlung aber zudem auch der Messung zugänglich ist. Es ist in diesen Fällen möglich, zur Rekonstruktion der Parameter sowohl die Verteilung der gestreuten Teilchen -als Lösung der Diffusionsapproximation- als auch die der ungestreuten Teilchen zur Rekonstruktion der gesuchten Größen heranzuziehen. So könnte etwa aus der durch den ungestreuten Anteil bekannten Röntgentransformation der Dämpfung $a(x)$ zunächst diese bestimmt werden, und anschließend durch Lösen des inversen Diffusionsproblems der Absorptionskoeffizient $\sigma_a(x) = a(x) - b(x)$ nach der in Abschnitt 4.6 *Ein spezieller Fall der Rückdiffusion* vorgestellten Rückdiffusionsmethode bestimmt werden. Damit wäre dann auch der Streukoeffizient $b(x)$ bekannt. Dieses Vorgehen kann als Alternative zu dem Vorschlag von A. Bondarenko [30] aufgefaßt werden, in welchem zur gleichzeitigen Rekonstruktion zweier Parameter als zusätzliche Information die Verteilung der genau einfach gestreuten Strahlung verwendet wird. (Vgl. hierzu den Abschnitt 3.7 *Rekonstruktionsverfahren*)

Wir wollen also nun die angekündigte Darstellung herleiten. Ausgangspunkt hierzu ist die zeitabhängige lineare Transportgleichung in der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \theta \cdot \nabla u(x,\theta,t) + a(x) u(x,\theta,t) = b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') u(x,\theta',t) d\theta' + q(x,\theta,t), \tag{4.52}$$

mit homogenen Rand- und Anfangsbedingungen

$$u(x,\theta,t) = 0 \quad \text{auf} \quad \Gamma_-, \tag{4.53}$$

$$u(x,\theta,0) = 0 \quad \text{auf} \quad \mathbf{R}^n \times S^{n-1}. \tag{4.54}$$

Die Integraldarstellung dieser Gleichung stellt eine Volterrasche Integralgleichung zweiter Art dar (vgl. Abschnitt 2.3 *Neumannreihe und Integraldarstellung*). Sie lautet bei gegebener flußunabhängiger Quelle $q(x,\theta,t)$ (vgl. etwa Case und Zweifel [38] oder Dautray und Lions [51])

$$\begin{aligned} u(x,\theta,t) \;=\; & \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a[x+\theta(\tau-t)]\,d\tau\} \qquad (4.55)\\ & \Big[b(x+\theta(\tau'-t))\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x+\theta(\tau'-t),\theta',\tau')\,d\theta'\Big]\,d\tau' \\ & + \int_0^t \exp\{-\int_{\tau'}^t a[x+\theta(\tau-t)]\,d\tau\}\,q(x+\theta(\tau'-t),\theta,\tau')\,d\tau'. \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Notation vereinbaren wir für diesen Abschnitt bei gegebenem (x,θ) die abkürzenden Schreibweisen

$$\begin{aligned} \Gamma(\tau',t) &:= \exp\{-\int_{\tau'}^t a[x+\theta(\tau-t)]\,d\tau\}, \qquad (4.56)\\ x_1(\tau') &:= x+\theta(\tau'-t). \end{aligned}$$

Die Darstellungen (4.52)-(4.54) und (4.55) sind grundsätzlich äquivalent zueinander, vgl. dazu die oben angegebene Literatur. Der erste der beiden in (4.55) aufgeführten Summanden

$$Ku(x,\theta,t) \;:=\; \int_0^t \Gamma(\tau',t)[b(x_1)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x_1,\theta',\tau')\,d\theta']\,d\tau' \tag{4.57}$$

beschreibt dabei den Anteil der sich zur Zeit t im Punkt x in Richtung θ fortbewegenden Teilchen, die direkt aus Streuvorgängen auf der Halbgeraden $x-\theta\mathbf{R}^+$ stammen. Der zweite Summand

$$Q(x,\theta,t) \;=\; (Aq)(x,\theta,t) \;:=\; \int_0^t \Gamma(\tau',t)q(x_1,\theta,\tau')\,d\tau' \tag{4.58}$$

beschreibt dagegen die ungestreut von der Quelle q nach (x,θ,t) gelangten Teilchen. Gleichung (4.55) läßt sich damit schreiben als

$$u(x,\theta,t) \;=\; Ku(x,\theta,t) \;+\; (Aq)(x,\theta,t). \tag{4.59}$$

Wir entwickeln nun die Größe $u(x, \theta, t)$ in ihre Neumannreihe (vgl. dazu auch Abschnitt 2.3)

$$
\begin{aligned}
u(x,\theta,t) &= \sum_{k=0}^{\infty} u^{(k)}(x,\theta,t), && (4.60)\\
u^{(0)}(x,\theta,t) &:= Q(x,\theta,t), && (4.61)\\
u^{(k)}(x,\theta,t) &:= Ku^{(k-1)}(x,\theta,t) \quad \text{für } k \geq 1. && (4.62)
\end{aligned}
$$

Für den Fall einer deltaförmigen Quelle

$$q(x,\theta,t) = \delta(t)\delta(\theta-\theta_0)\delta(x-x_0) \tag{4.63}$$

haben wir $u^{(0)}(x,\theta,t)$, $u^{(1)}(x,\theta,t)$ und $u^{(2)}(x,\theta,t)$ im Kapitel 3 (*Born-Approximation*) bereits explizit berechnet. Dies sind gerade die ungestreuten, einmal und zweimal gestreuten Teilchen, respektive, und bilden zusammen die Bornapproximationen der Transportgleichung.

Wir setzen voraus, daß die Neumannreihe (4.60) gegen die eindeutige Lösung der linearen Transportgleichung (4.52)-(4.54) bzw. (4.55) konvergiert. (Vgl. dazu etwa wieder Case und Zweifel [38].) Dann bekommt (4.55) die Form

$$\sum_{k=0}^{\infty} u^{(k)} = K\,(\sum_{k=0}^{\infty} u^{(k)}) + Q. \tag{4.64}$$

Separation der Singularitäten soll nun bedeuten, die ersten m ($m \in \mathbb{N}$) der Summanden in (4.60), (4.64), z.B. diejenigen mit singulären Anteilen, gesondert zu betrachten. Wir schreiben dazu

$$
\begin{aligned}
u = \sum_{k=0}^{\infty} u^{(k)} &= \sum_{k=0}^{m} u^{(k)} + \sum_{k=m+1}^{\infty} u^{(k)}\\
&=: u_m + \tilde{u}_m. && (4.65)
\end{aligned}
$$

Setzen wir dies in (4.64) ein, so folgt mit der Linearität des Operators K

$$
\begin{aligned}
u_m + \tilde{u}_m &= K(u_m + \tilde{u}_m) + u^{(0)}\\
&= K\tilde{u}_m + Ku_m + u^{(0)}. && (4.66)
\end{aligned}
$$

Es gilt nun offenbar

$$Ku_m = Ku^{(m)} + u_m - u^{(0)}. \tag{4.67}$$

Somit bekommt (4.66) die Gestalt

$$\tilde{u}_m = K\tilde{u}_m + Ku^{(m)}. \tag{4.68}$$

Der Beitrag $Ku^{(m)}$ ist dabei gegeben durch

$$Ku^m = \int_0^t \Gamma(\tau', t)\,[b(x_1(\tau'))\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u^{(m)}(x_1(\tau'),\theta',\tau')\,d\theta']\,d\tau'. \tag{4.69}$$

Definieren wir also

$$q^m(x,\theta,t) := b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u^{(m)}(x,\theta',t)d\theta', \tag{4.70}$$

so erfüllt $\tilde{u}_m$ wieder die lineare Transportgleichung (4.59)

$$\tilde{u}_m(x,\theta,t) = K\tilde{u}_m(x,\theta,t) + (Aq^m)(x,\theta,t) \tag{4.71}$$

mit dem neuen Quellterm q^m. Als Lösung einer linearen Transportgleichung kann nun für $\{\tilde{u}_m, q^m\}$ in der gewohnten Weise die Diffusions- bzw. Telegraphenapproximation berechnet werden. Bezeichnen wir die so erhaltene Diffusionsnäherung mit $\Phi^m(x,t)$, so bekommen wir als Näherung an die Lösung der Transportgleichung den Ausdruck

$$u(x,\theta,t) \doteq \sum_{k=0}^{m} u^{(k)}(x,\theta,t) + \Phi^m(x,t). \tag{4.72}$$

Für den Fall $m = 0$ liefert dies gerade die Summe aus dem Beitrag der ungestreuten Teilchen und dem Diffusionsbeitrag

$$u(x,\theta,t) \doteq u^{(0)}(x,\theta,t) + \Phi^0(x,t). \tag{4.73}$$

Die Darstellung (4.73) der Lösung konnte durch Monte-Carlo-Simulationen anschaulich bestätigt werden, z.B. für den Fall eines Streukoeffizienten $b(x) = 2.5cm^{-1}$, einem Absorptionskoeffizienten $\sigma_a(x) = a(x) - b(x) = 0.001cm^{-1}$ und isotroper Streuung $\eta(\theta\cdot\theta') \equiv 1/2\pi$ in zwei Raumdimensionen. Dort hebt sich der Anteil ungestreut fortschreitender Teilchen deutlich von dem zurückbleibenden diffusionsförmigen Anteil ab (vgl. Abbn. MC6, MC7 in Kapitel 5).

4.5 Randbedingungen in der $\mathcal{P}_1$-Approximation

4.5.1 Allgemeine Formulierung - Die freie Randbedingung

Bislang haben wir uns das zugrundeliegende Gebiet immer als unendlich ausgedehnt vorgestellt. In Anwendungen hat man es allerdings fast immer mit endlichen Gebieten (nennen wir sie Ω mit glattem Rand $\partial\Omega$) zu tun, bei denen man sehr genau die Randbedingungen zu beachten hat. Aufgrund der zusätzlichen Richtungs-Freiheitsgrade können für die Transportgleichung sehr viel kompliziertere Randbedingungen formuliert werden, als dies in den Diffusionsmodellen möglich ist. Drei Standard-Randbedingungen für die Transportgleichung sind
a.) Die *freie Randbedingung*

$$u(x,\theta,t) = 0 \quad \text{für} \quad \nu(x)\cdot\theta < 0\,,\, x \in \partial\Omega. \tag{5.74}$$

Dabei ist $\nu(x)$ die äußere Normale an $\partial\Omega$ im Punkt x.
b.) Die *reflektierende Randbedingung*,
c.) Die *Grenzschicht* zwischen zwei Medien.

Wir wollen hier ausschließlich auf den ersten Fall eingehen, der bei der numerischen Behandlung des inversen Problems in der Lasertomographie auftritt. Physikalisch bedeutet hier die freie Randbedingung , daß -abgesehen von dem durch die Quelle q erfaßten Laserstrahl- keine weitere Strahlung in das zu untersuchende Gebiet eindringen kann. Die Schwierigkeit bei der Approximation der freien Randbedingung (5.74) liegt darin begründet, daß die Richtungsinformation wesentlich bei ihrer Formulierung mit berücksichtigt wird. Gerade diese kann aber durch die Diffusionsmodelle nur sehr grob dargestellt werden.

4.5.2 Approximation der freien Randbedingung

In (1.9) wurde gezeigt, daß in der $\mathcal{P}_1$-Approximation der Fluß $u(x,\theta,t)$ durch die Größe

$$u_{diff}(x,\theta,t) \;:=\; \frac{1}{4\pi}\Phi(x,t) + \frac{3}{4\pi}J(x,t)\cdot\theta \tag{5.75}$$

linear approximiert wird. Für diesen linearisierten Fluß können wir die Netto-Strahlungsmenge, welche die Grenzschicht $\partial\Omega$ des Gebietes Ω am Ort $x \in \partial\Omega$ zum Zeitpunkt t in Richtung θ überquert, charakterisieren durch

$$\nu(x)\cdot\theta\, u_{diff}(x,\theta,t),$$

wobei wieder $\nu(x)$ die äußere Normale an $\partial\Omega$ im Punkt x ist. Insgesamt beträgt die gesamte einfallende Strahlung $I_-(x,t)$ im Punkt x zur Zeit t demnach in dieser Näherung

$$I_-(x,t) \;=\; \int_{\nu(x)\cdot\theta<0} \nu(x)\cdot\theta\left[\frac{1}{4\pi}\Phi(x,t)+\frac{3}{4\pi}J(x,t)\cdot\theta\right]d\theta. \qquad (5.76)$$

Berücksichtigen wir, daß

$$\int_{\nu\cdot\theta<0}\nu\cdot\theta d\theta = -\pi$$

und daß in der Diffusionsnäherung mit dem Fickschen Gesetz (3.39) und wegen (1.3) gilt

$$\begin{aligned}\int_{\nu\cdot\theta<0}(\nu\cdot\theta)(J\cdot\theta)d\theta &= -D\int_{\nu\cdot\theta<0}(\nu\cdot\theta)(\nabla\Phi\cdot\theta)d\theta\\ &= -D\nu\cdot\frac{2\pi}{3}\nabla\Phi,\end{aligned}$$

so vereinfacht sich (5.76) zu

$$I_-(x,t) \;=\; -\frac{1}{4}\left[\Phi(x,t)+2D\nu(x)\cdot\nabla\Phi\right]. \qquad (5.77)$$

Wir erhalten schließlich als approximierte freie Randbedingung für die Diffusionsgleichung

$$\Phi(x,t)+2D\nu(x)\cdot\nabla\Phi = 0, \qquad (5.78)$$

oder in anderer Darstellung

$$\Phi(x,t)+2D\frac{\partial\Phi}{\partial\nu} = 0 \qquad (5.79)$$

($\frac{\partial}{\partial\nu}$ = äußere Normalenableitung). Dieses ist die sogenannte *Marshak-* oder *Robin-Randbedingung.* Sie stellt eine von mehreren Möglichkeiten dar, die freie Randbedingung (5.74) anzunähern. Für alternative Ansätze verweisen wir den Leser z.B. auf Case und Zweifel [38], M. Schweiger [172] oder die bereits genannten Spezialbücher über den Neutronentransport.

4.5.3 Der fiktive extrapolierte Rand

Die Randbedingung (5.78) bzw. (5.79) hat noch eine recht komplizierte Form und kann deshalb insbesondere bei der numerischen Behandlung von Transportphänomenen oft nur schlecht durch das gewählte Verfahren ausgedrückt werden. Man hat deshalb auch hier versucht, diese durch eine noch einfachere Bedingung zu ersetzen. Dazu wurde der Begriff des *extrapolierten Randes* eingeführt. Dies ist ein fiktiver Rand $\partial\tilde{\Omega}$, der außerhalb des realen Randes $\partial\Omega$ liegt und ein größeres Gebiet $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ umschließt. Auf diesem wird die Dirichlet-Randbedingung

$$\Phi(x,t) \equiv 0 \quad \text{auf}\, \partial\tilde{\Omega} \tag{5.80}$$

gefordert. Wir skizzieren kurz die diesem Konzept zugrundeliegende Idee.

Man stelle sich die Randbedingung (5.79) in einer Raumdimension vor. Dort lautet sie zu einer festen Zeit t

$$\Phi(x,t) + 2D\Phi^{'}(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega,$$

$$\text{oder} \qquad \Phi^{'}(x,t) = -\frac{1}{2D}\Phi(x,t). \tag{5.81}$$

Da $\Phi(x,t) > 0$ auf $\partial\Omega$ gilt, ist dort $\Phi^{'}(x,t) < 0$. Wir können also $\Phi(x,t)$ nach außen linear um eine Distanz $\Delta(x)$ derart extrapolieren, daß für den Punkt $x + \Delta(x)$ der Fluß Φ verschwindet:

$$\Phi(x + \Delta(x), t) = 0.$$

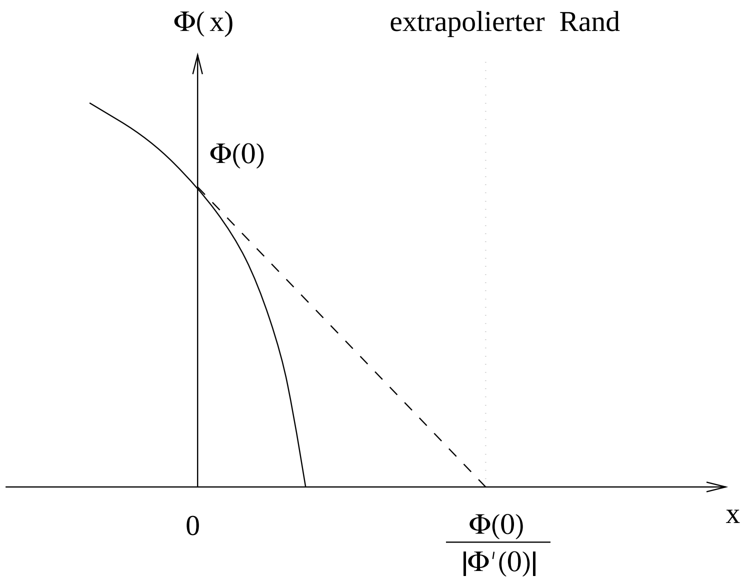
Dieser zu extrapolierende Abstand läßt sich in einer Dimension einfach ausrechnen. Er beträgt

$$\Delta(x) = \frac{\Phi(x)}{|\Phi'(x)|}. \tag{5.82}$$

In unserem speziellen Fall (5.81) können wir daher schreiben

$$\Delta(x) = 2D = \frac{2}{3}\frac{1}{\sigma_{tr}} = \frac{2}{3}\lambda_{tr}, \tag{5.83}$$

wobei $\lambda_{tr} := (\sigma_{tr})^{-1}$ die *mittlere freie Transportweglänge* bezeichnet und gerade gleich $(a - \bar{\mu}_0 b)^{-1}$ ist.



Der Faktor $\frac{2}{3}$ ist unabhängig vom jeweiligen Ort bzw. von den dort vorhandenen Absorptions- und Streukoeffizienten. Allerdings ist er aus der Sicht einer exakteren Rechnung im Rahmen der Transportgleichung noch nicht sehr genau. Wegen seiner fundamentalen Bedeutung bei der numerischen Behandlung von Transportproblemen hat man deshalb versucht, ihn mittels der zugrundeliegenden Transportgleichung genauer zu berechnen. Die dabei gefundenen Werte liegen alle etwa bei $0.71\lambda_{tr}$ als zu extrapolierende Distanz. Dieser Wert ergibt sich zumindest im Falle des berühmten Milne-Problems. Er kann bei anderer Problemstellung sicherlich auch andere Werte annehmen. Eine genauere Untersuchung und Herleitung dieser Größe findet der Leser etwa in [32] oder in [85]. Diese Strecke, um welche der reale Rand $\partial\Omega$ nach außen verschoben werden muß, um auf dem so erhaltenen Rand $\partial\tilde{\Omega}$ die Randbedingung (5.80) zu bekommen, wird in der Literatur als *Extrapolationslänge* bezeichnet. Der dadurch neu gefundene Randpunkt heißt *extrapolierter Endpunkt*.

Es muß darauf hingewiesen werden, daß dieser fiktive Rand mit seinen neuen Randbedingungen lediglich dazu geeignet ist, echt innerhalb des realen Gebietes Ω für eine brauchbare Näherung an Φ zu sorgen, in den Randbereichen von $\tilde{\Omega}$ jedoch keinen Sinn macht, zumal der Wert $\Phi \equiv 0$ auf $\partial\Omega$ in der speziellen Anwendung möglicherweise physikalisch gar nicht auftritt.

Typische Werte in der Lasertomographie sind etwa $a \approx 100.1cm^{-1}$, $b \approx 100cm^{-1}$ und $\bar{\mu}_0 \approx 0.9$ (Henyey-Greenstein). Für diese Werte folgt z.B. $\sigma_{tr} \approx 10.1cm^{-1}$, also $\lambda_{tr} \approx 0.1cm$. Für $a \approx b \approx 10cm^{-1}$ ist mit $\bar{\mu}_0 \approx 0.9$ dieser Wert mit $\lambda_{tr} \approx 1cm$ anzusetzen. Aronson [12] weist darauf hin, daß aufgrund möglicherweise auftretender Reflektionserscheinungen des Lichtes an den Rändern des Gebietes diese zu extrapolierende Distanz gegebenenfalls noch erhöht werden müsse.

4.5.4 Detektormessungen

Auch bei der Messung der auf $\partial\Omega$ ankommenden Strahlung muß bei den Diffusionsmodellen darüber nachgedacht werden, welche Größe in der Terminologie der $\mathcal{P}_1$-Approximation dafür anzusetzen ist. In der Lasertomographie wird im allgemeinen ein Ausdruck der Form

$$g(x,t) \;=\; \int_{S^{n-1}} \nu(x)\cdot\theta\, u(x,\theta,t)d\theta \tag{5.84}$$

für $(x,t) \in \partial\Omega \times \mathbf{R}^+$ als gemessener Wert angesehen (vgl. z.B. Kaltenbach und Kaschke [88] oder auch Ishimaru [82]). Wie schon oben werden wir auch hier zur Approximation dieser Größe versuchen, gemäß (1.9) $u(x,\theta,t)$ durch

$$u_{diff}(x,\theta,t) \;:=\; \frac{1}{4\pi}\Phi(x,t) + \frac{3}{4\pi}J(x,t)\cdot\theta \tag{5.85}$$

zu ersetzen. Dies liefert uns analog zu Gleichung (5.76)

$$g(x,t) \doteq \int_{S^{n-1}} \nu(x)\cdot\theta\,[\frac{1}{4\pi}\Phi(x,t) + \frac{3}{4\pi}J(x,t)\cdot\theta]\,d\theta.$$

Wenden wir wieder das Ficksche Gesetz und (1.4) an, so folgt

$$\int_{S^{n-1}} \nu\cdot\theta\Phi(x,t)d\theta = 0 \qquad \text{und}$$

$$\begin{aligned} \int_{S^{n-1}} (\nu\cdot\theta)(J\cdot\theta)d\theta \;&=\; -D\int_{S^{n-1}}(\nu\cdot\theta)(\nabla\Phi\cdot\theta)d\theta \\ &=\; -D\frac{4\pi}{3}\nu\cdot\nabla\Phi. \end{aligned}$$

Damit also

$$\begin{aligned} g(x,t) &\doteq -D\nu(x)\cdot\nabla\Phi(x,t) \\ &= -D\frac{\partial\Phi}{\partial\nu}(x,t). \end{aligned} \tag{5.86}$$

Dies ist die übliche in den Diffusionsmodellen verwendete Größe für die Beschreibung der gemessenen Daten, vgl. z.B. Arridge [14].

4.6 Ein spezieller Fall der Rückdiffusion

Wir wollen hier kurz darlegen, wie die Verwendung der oben eingeführten Approximationen sich im Rahmen der *adjoint field-Methode* auswirkt. Insbesondere interessiert uns hier die physikalische Deutung der dabei auftretenden adjungierten Gleichung und deren Zusammenhang mit der analogen Vorgehensweise bei der Transportgleichung. Für eine ausführliche Beschreibung der zugrundeliegenden Methode vgl. Natterer [135]. Der Einfachheit halber verwenden wir hier ausschließlich L^2-Räume.

Gemäß Gleichung (5.77) definieren wir als Approximation an die am Ort $x \in \partial\Omega$ zur Zeit $t \in [0,T]$ in Ω einfallende Strahlung die Größe

$$I_-(\Phi)(x,t) := -\frac{1}{4}[\Phi(x,t) + 2D\frac{\partial\Phi}{\partial\nu}(x,t)]. \tag{6.87}$$

Wir betrachten die Diffusionsgleichung für eine Quelle Q_j an dem Ort $s_j \in \partial\Omega$.

$$\frac{\partial\Phi_j}{\partial t} + \sigma_a\Phi_j - \nabla\cdot(D\nabla\Phi_j) = Q_j, \tag{6.88}$$

$$\Phi_j(x,0) = 0 \qquad \text{in } \Omega,$$

$$\Phi_j(x,t) + 2D\frac{\partial\Phi_j}{\partial\nu}(x,t) = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega\times[0,T].$$

Wir setzen also Robin-Randbedingungen voraus. Diese bedeuten nach (6.87), daß für Φ gilt

$$I_-(\Phi)(x,t) = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega. \tag{6.89}$$

Als Meßwerte $G_j(x,t)$ haben wir oben bereits den folgenden Ausdruck berechnet

$$G_j(x,t) \;=\; -D\frac{\partial\tilde{\Phi}_j}{\partial\nu}(x,t) \quad \text{auf } \partial\Omega\times[0,T]. \tag{6.90}$$

$\tilde{\Phi}_j(x,t)$ ist die exakte Lösung von (6.88) bei korrektem Parameterwert σ_a. Unser Ziel ist es, aufgrund der Messung der $G_j(x,t)$ für eine Reihe von Quellstandorten s_j $(j = 1,\ldots,N)$ den uns unbekannten Parameter $\sigma_a(x)$ zu bestimmen. (Ein analoges Verfahren existiert zur Bestimmung von $D(x)$ oder zur simultanen Bestimmung beider Parameter.)

Linearisierung wie in [135] dargestellt liefert mit $\Phi_j \to \Phi_j + w_j$ und $\sigma_a \to \sigma_a + h_j$ für w_j die Differentialgleichung

$$\frac{\partial w_j}{\partial t} + \sigma_a w_j - \nabla\cdot(D\nabla w_j) \;=\; -h_j\Phi_j, \tag{6.91}$$

$$w_j(x,0) \;=\; 0 \qquad \text{in } \Omega,$$

$$w_j(x,t) + 2D\frac{\partial w_j}{\partial\nu}(x,t) \;=\; 0 \quad \text{auf } \partial\Omega\times[0,T].$$

Definieren wir den Operator $R_j : L_2(\Omega) \to L_2(\partial\Omega\times[0,T])$ durch

$$R_j(\sigma_a)(x,t) \;=\; -D\frac{\partial\Phi_j}{\partial\nu}(x,t) - G_j(x,t), \tag{6.92}$$

wobei $G_j(x,t)$ die tatsächlich gemessenen Daten bei Verwendung der Quelle Q_j bezeichnet, so gilt für dessen Fréchet-Ableitung

$$R_j^{'}(\sigma_a)(h)(x,t) \;=\; -D\frac{\partial w_j}{\partial\nu}(x,t). \tag{6.93}$$

Bezeichne $[R_j^{'}(\sigma_a)]^* : L_2(\partial\Omega\times[0,T]) \to L_2(\Omega)$ den zu $R_j^{'}(\sigma_a)$ adjungierten Operator. Dann gilt der folgende

Satz: $[R_j^{'}(\sigma_a)]^*$ ist gegeben durch

$$\left([R_j^{'}(\sigma_a)]^* g\right)(x) \;=\; \int_0^T [-\Phi_j z_j]\,dt. \tag{6.94}$$

Dabei ist z_j Lösung der Gleichung

$$-\frac{\partial z_j}{\partial t} + \sigma_a z_j - \nabla\cdot(D\nabla z_j) \;=\; 0, \tag{6.95}$$

$$z_j(x,T) \;=\; 0 \qquad \text{in } \Omega,$$

$$z_j(x,t) + 2D\frac{\partial z_j}{\partial \nu}(x,t) \;=\; g_j \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0,T],$$

$$\text{mit} \quad g_j(x,t) := -D\frac{\partial \Phi_j}{\partial \nu}(x,t) - G_j(x,t). \tag{6.96}$$

Beweis:
Für allgemeine z, w gilt die Beziehung

$$\int_\Omega \int_0^T \left[\frac{\partial w}{\partial t} + \sigma_a w - \nabla \cdot (D\nabla w)\right] z dxdt \tag{6.97}$$

$$= \int_\Omega \int_0^T w \left[-\frac{\partial z}{\partial t} + \sigma_a z - \nabla \cdot (D\nabla z)\right] dxdt$$

$$+ \int_\Omega [(wz)(x,T) - (wz)(x,0)]dx \; + \int_0^T \int_{\partial\Omega} D[w\frac{\partial z}{\partial \nu} - \frac{\partial w}{\partial \nu}z]\, dtds.$$

Die ersten beiden Terme der rechten Seite verschwinden wegen (6.91) und (6.95). Der dritte Term auf der rechten Seite bekommt mit der Randbedingung (6.91) die Gestalt

$$\int_0^T \int_{\partial\Omega} D\left[(-2D\frac{\partial w_j}{\partial \nu})\frac{\partial z_j}{\partial \nu} - \frac{\partial w_j}{\partial \nu}z_j\right] dtds$$

$$= \int_0^T \int_{\partial\Omega} [-D\frac{\partial w_j}{\partial \nu}][2D\frac{\partial z_j}{\partial \nu} + z_j]dtds \;=\; \int_0^T \int_{\partial\Omega} [R_j^{'}(\sigma_a)(h)][g_j]dtds.$$

Auf der linken Seite dagegen bekommen wir mit Gleichung (6.91) den Ausdruck

$$\int_\Omega \int_0^T (-h_j\Phi_j)z_j dxdt.$$

Also gilt tatsächlich im Sinne der Definition (6.94)

$$\left\langle [R_j^{'}(\sigma_a)]^* g_j \,,\, h_j \right\rangle \;=\; \left\langle g_j \,,\, R_j^{'}(\sigma_a)(h_j) \right\rangle, \tag{6.98}$$

womit der Satz bewiesen ist.

Interpretation: (6.91) stellt die zu (6.88) adjungierte Gleichung dar. Als Randbedingung haben wir auch in der adjungierten Gleichung einen einfallenden Strom von diesmal „adjungierten Teilchen“

$$I_-(z)(x,t) \; = \; -\frac{1}{4}g_j.$$

Den Faktor $(-\frac{1}{4})$ hätten wir auch -anstatt der Randbedingung- der Adjungierten zusprechen können. Somit können wir (6.91) interpretieren als Approximation an den adjungierten Fluß in der Transportgleichung mit der Randbedingung, daß „adjungierte Teilchen“ in das Medium hineingeschickt werden und, in der Zeit rückwärts laufend, an jedem Ort, den sie passieren, ein Maß für dessen Bedeutung für die Detektormessung markieren (die sogenannte *Importance*, vgl. dazu auch den Abschnitt 6.7). Im vorliegenden Fall *diffundieren* diese Teilchen durch das Medium - entgegen der richtungsaufgelösten Fortbewegung in der Transportgleichung. Die Menge adjungierter Teilchen, die an dem Ort eines Detektors eingestrahlt wird, ist gerade die Differenz aus erwartetem und tatsächlich gemessenem Detektorwert. Der update berechnet sich dann durch Multiplikation dieser Importance mit der Flußdichte des direkten Problems und anschließender Integration über die Zeit.

Kapitel 5

Numerische Realisierungen der Transportgleichung

5.1 Vorbemerkungen

Um das direkte Transportproblem (sei es nun für die Beschreibung der Ausbreitung von Photonen in menschlichem Gewebe, oder von Neutronen in einem Kernreaktor, oder aber von Strahlung in den äußeren Schichten von Sternatmosphären) auf einem Rechner zu simulieren, gibt es mehrere mehr oder weniger bewährte Möglichkeiten. Neben der bereits oben beschriebenen Approximation durch benachbarte Diffusionsmodelle kann die komplette Transportgleichung etwa mittels finiter Differenzen oder finiter Elemente diskretisiert und damit der numerischen Rechnung zugänglich gemacht werden. Eine häufig verwendete Alternative besteht in der direkten Beschreibung der physikalischen Vorgänge im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation. Wir wollen auf die einzelnen Modelle hier nur sehr kurz eingehen. Es existiert zu jeder dieser genannten Möglichkeiten eine beträchtliche Anzahl von Veröffentlichungen und relativ leicht zugänglicher software (vgl. etwa NEA Data Bank, [110],[111],[112]). Alle im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Programme sind jedoch vom Autor selbst geschrieben und getestet worden. (Finite-Differenzen-Diskretisierung und Monte-Carlo-Simulation.) Ein wesentlicher Leitfaden dabei war es, möglichst einfache und überschaubare Algorithmen zu entwickeln, um die bei der Behandlung des inversen Problems notwendigen Anpassungen möglichst schnell und unkompliziert durchführen zu können. Dementsprechend sind die verwendeten Realisierungen bei weitem nicht die schnellsten geschweige die genauesten der momentan zugänglichen.

Im folgenden soll zunächst jeweils ein kurzer Überblick über die dem Autor bekannte Literatur zu den einzelnen Verfahren gegeben werden, um sodann die hier verwendeten Realisierungen vorzustellen.

5.2 Diskretisierungen der linearen Transportgleichung

5.2.1 Ausgewählte Literaturhinweise

Als Standardreferenz soll hier das Buch [108] von E. E. Lewis und W. F. Miller, Jr. genannt werden, welches in übersichtlicher Weise sämtliche der oben genannten Realisierungen abhandelt. Einen Überblick über verschiedene numerische Methoden zur Behandlung des linearen Transportproblems bietet der Artikel [166] von R. Sanchez und N. J. McCormick. Diskretisierungen und Approximationen der Transportgleichung in krummlinigen Koordinaten (insbesondere in sphärischen und zylindrischen Geometrien) werden ausführlich beschrieben in der Dissertation [144] von T. S. Palmer.

Sogenannte Diffusionsbeschleunigte Verfahren, welche gerade bei Vorhandensein von Regionen starker Streuung sehr schnell konvergieren, werden z.B. in [101] oder in [19],[34] behandelt. Finite-Elemente Diskretisierungen des räumlichen Anteils der Transportgleichung findet der Leser in [105], [151], [87], [20], [28] und [96]. Eine alternative Zeitdiskretisierung wird in [138] vorgestellt, und sogenannte Splitting-Techniken in dem Buch von G.I. Marchuk [115]. Richtmyer und Morton [163] behandeln Finite-Differenzen-Modelle für die lineare Transportgleichung.

In den vergangenen zehn Jahren sind (besonders von E. W. Larsen) mit Hilfe *asymptotischer Methoden* die Zusammenhänge zwischen der Transportgleichung und deren Diffusionsapproximation erhellt worden. Als Referenzen sind hier z.B. die Artikel [97], [99], [70], [100], [152] und [114] zu nennen. Die bei dem Übergang von der Transportgleichung zu der Diffusionsapproximation im allgemeinen problematischen Bereiche kleiner Zeiten und randnaher Regionen können im Rahmen dieser asymptotischen Theorie in natürlicher Weise durch Anfangsschichten (initial layers), Randschichten (boundary layers) und Anfangs-Rand-Schichten (initial boundary layers) ausgedrückt werden. Analoge Untersuchungen wurden für die entsprechenden diskretisierten Probleme durchgeführt und mit der kontinuierlichen Theorie verglichen. Hier verweisen wir etwa auf die Artikel [102], [104],

[28] und [85]. Auch in der bereits genannten Dissertation [144] von T. S. Palmer wird auf diese asymptotischen Methoden eingegangen. G. C. Papanicolaou untersucht dieses asymptotische Verhalten der Transportgleichung in [145], [146] und [147] aus der Sicht stochastischer Prozesse.

5.2.2 Diskretisierung der Transportgleichung mittels Finiter Differenzen

Wir betrachten die lineare Transportgleichung in zwei räumlichen Dimensionen

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,y,\theta,t) + \theta \cdot \nabla u(x,y,\theta,t) + a(x,y)u(x,y,\theta,t) \tag{2.1}$$

$$= b(x,y) \int_{S^1} f(\theta \cdot \theta^{'})u(x,y,\theta^{'},t)\, d\theta^{'} + q(x,y,\theta,t),$$

mit $x,y,t \in \mathbb{R}$ und $\theta = (\cos\phi, \sin\phi)^T \in S^1$.
Wir betrachten nur I diskrete auf S^1 gleichverteilte Richtungen θ_i, $(i = 1,\ldots,I)$, $\theta_i = (\cos\phi_i, \sin\phi_i)$. Für jede dieser Richtungen gilt eine (2.1) entsprechende Gleichung.

Wir approximieren nun das Integral auf der rechten Seite von (2.1) mittels einer einfachen Integrationsformel. Definieren wir

$$u_i(x,y,t) := u(x,y,\theta_i,t)\ , \quad q_i(x,y,t) := q(x,y,\theta_i,t),$$

so erhalten wir für $i = 1,\ldots,I$ die Gleichungen

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x,y,t) + \theta_i \cdot \nabla u_i(x,y,t) + a(x,y)u_i(x,y,t) \tag{2.2}$$

$$\doteq b(x,y) \sum_{m=1}^{I} f_{m-i} u_m(x,y,t) + q_i(x,y,t),$$

wobei die Streuphasenfaktoren f_{m-i} geeignet zu wählen sind (vgl. unten). Definieren wir weiter durch

$$\mu_i = \theta_{i,x} = \hat{x} \cdot \theta_i\ , \quad \eta_i := \theta_{i,y} = \hat{y} \cdot \theta_i$$

die Projektionen von θ_i auf die entsprechenden kartesischen Achsen, und führen wir die Zeitdiskretisierung durch, so folgt mit

$$u_i^{(l)}(x,y) := u_i(x,y,t_l)\ , \quad t_l = l\Delta t\ , \quad l \in \mathbb{N},$$

die Darstellung

$$\frac{u_i^{(l+1)} - u_i^{(l)}}{\Delta t} + \mu_i \frac{\partial u_i^{(l)}}{\partial x}(x,y) + \eta_i \frac{\partial u_i^{(l)}}{\partial y}(x,y) + a(x,y) u_i^{(l)}(x,y)$$

$$\doteq b(x,y) \sum_{m=1}^{I} f_{m-i} u_m^{(l)}(x,y) + q_i^{(l)}(x,y). \qquad (2.3)$$

Die verbleibenden partiellen Ortsableitungen werden schließlich -abhängig von der betrachteten Richtung θ_i- durch ein Zweipunktschema (upwind scheme) diskretisiert. Um die Kausalität zu erfüllen, werden dabei etwa zur Berechnung der Ableitung $\frac{\partial u_i^{(l)}}{\partial x}(x_j, y_k)$ die beiden Werte $u_i^{(l)}(x_j, y_k)$, $u_i^{(l)}(x_{j'}, y_k)$ mit $j' \in \{j-1, j+1\}$ und $\theta_j \cdot (x_j - x_{j'}, y_k)^T > 0$ verwendet. Analoges gilt für die Ableitungen $\frac{\partial u_i^{(l)}}{\partial y}(x_j, y_k)$ (vgl. Abb.1). Insgesamt bekommt man so für Richtungen θ_i parallel zu den Koordinatenachsen jeweils ein Zweipunktmolekül zur Berechnung von $\theta_i \cdot \nabla u_i^{(l)}$, für alle weiteren Richtungen θ_i dagegen Dreipunktmoleküle (Abb.1).

Bezeichnen wir die Schrittweiten in x- bzw. y-Richtung mit Δx und Δy, so ist (wie man sich mit den üblichen Argumenten leicht überlegt) aus Gründen der Stabilität eine (sogenannte CFL-) Bedingung an die Schrittweiten zu stellen. (Vgl. dazu etwa das Buch von Sewell [173].) Wir haben hier aus diesem Grunde stets (hinreichend großzügig)

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \min\{\Delta x, \Delta y\} \qquad (2.4)$$

angenommen.

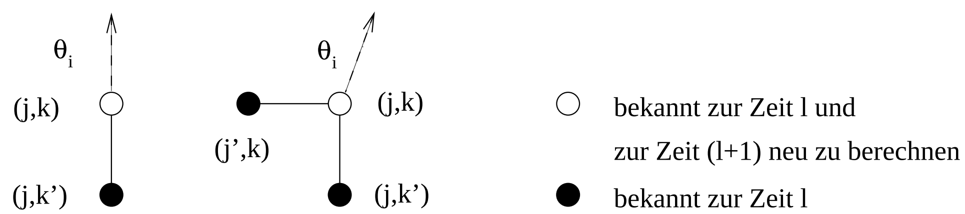


Abb. 1: Diskretisierung der räumlichen Ableitungen nach dem upwind scheme.

Es stellte sich zudem heraus, daß bei sehr großen Werten von $a(x,y)$ bei nicht genügend klein gewählter Schrittweite Δt Oszillationen in den Lösungen auftraten, die durch unphysikalische negative Werte in den Größen $u(x_j, y_k, \theta_i, t_l)$ hervorgerufen wurden. Verantwortlich für dieses Verhalten war die als Faktor in die Diskretisierung eingehende Größe $1 - \Delta t\, a(x)$. Um diese Oszillationen zu vermeiden, wurde stets darauf geachtet, daß dieser Faktor echt positiv blieb, das heißt mit anderen Worten, es wurde an die Zeitkonstante Δt die zusätzliche Bedingung gestellt

$$\Delta t \max_{j,k}\{a(x_j, y_k)\} \; < \; 1. \tag{2.5}$$

Die Streuphasenfaktoren f_{m-i} wurden für den Fall der Henyey-Greenstein-Streuung wie folgt berechnet.
Sei $\theta_k = (\cos\varphi_k, \sin\varphi_k)^T$ mit $\varphi_k = k\frac{2\pi}{I}$, $(k = 1, \ldots, I)$, und seien die Sektoren S_k durch die Vorschrift

$$S_k \; = \; \left\{\theta^{'} = (\cos\varphi^{'}, \sin\varphi^{'})^T \in S^1, \quad -\frac{\pi}{I} < \varphi_k - \varphi^{'} \leq \frac{\pi}{I}\right\}$$

definiert. Dann approximieren wir das Integral in (2.1) durch

$$\begin{aligned} \int_{S^1} f(\theta_i \cdot \theta^{'}) u(\theta^{'}) d\theta^{'} \; &= \; \sum_{k=1}^{I} \int_{S_k} f(\theta_i \cdot \theta^{'}) u(\theta^{'}) d\theta^{'} \\ &\approx \; \sum_{k=1}^{I} u(\theta_k) \int_{S_k} f(\theta_i \cdot \theta^{'})\, d\theta^{'} \; = \; \sum_{k=1}^{I} f_{i-k}\, u(\theta_k), \end{aligned}$$

mit $f_{i-k} := \int_{S_k} f(\theta_i \cdot \theta^{'})\, d\theta^{'}$. Im Falle der Henyey-Greenstein-Streuformel

$$f(\theta \cdot \theta^{'}) \; = \; h(g; \cos\vartheta) \; := \; \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g\cos\vartheta)^{3/2}}, \tag{2.6}$$

mit $\cos\vartheta \; = \; \theta \cdot \theta^{'}$ und $-1 \; < \; g \; < \; 1$, können diese Gewichte f_{i-k} durch analytische Integration explizit berechnet werden.

Es wurde zudem beobachtet, daß -entsprechend der Feinheit der räumlichen Diskretisierung- verglichen mit der analytischen Lösung ein Glättungseffekt in der berechneten Lösung eintritt. Gerade in Fällen sehr schwacher Streuung, in denen man an einer verläßlichen Beschreibung der Fortpflanzung von Singularitäten interessiert ist, kann dieser Vorgang sehr störend sein. Dort muß also entsprechend fein diskretisiert werden.

Eine Erklärung dieses Glättungsphänomens gibt Sewell [173] an. Er weist darauf hin, daß bei der Verwendung des upwind-Schemas in der Diskretisierung der (eindimensionalen) Gleichung

$$u_t = -v(x,t)u_x + a(x,t)u + f(x,t) \tag{2.7}$$

ein künstlicher Diffusionsterm automatisch mit eingebaut wird:

$$u_t = D(x,t)u_{xx} - v(x,t)u_x + a(x,t)u + f(x,t), \tag{2.8}$$

mit $D(x,t) = \frac{1}{2}|v|\Delta x$. Die Diskretisierung der so gewonnenen Konvektions-Diffusions-Gleichung (2.8) mit Hilfe zentrierter Differenzen liefert exakt denselben Algorithmus wie die Diskretisierung von (2.7) mit Hilfe des upwind-Schemas.

Auf eine völlig analoge Weise wie die soeben vorgestellte wurde auch die entsprechende *adjungierte Transportgleichung* diskretisiert, wobei hier die Umkehrung der Ausbreitungsrichtung und der Zeitachse zu berücksichtigen war. Vgl. die entsprechenden Bemerkungen in dem nachfolgenden Kapitel.

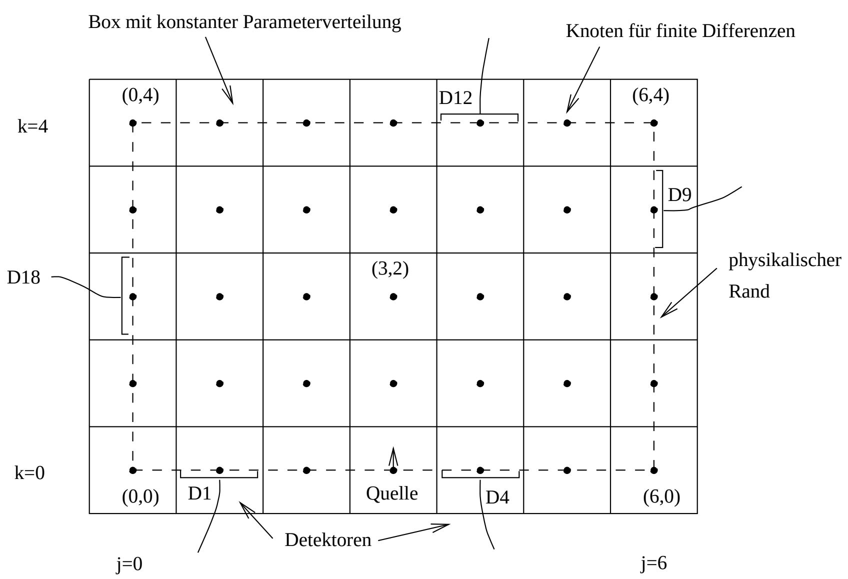


Abb. 2: Gitter für die Finite-Differenzen-Diskretisierung und für die angepaßte Monte-Carlo-Simulation am Beispiel einer 4x6-Diskretisierung.

5.3 Die Monte-Carlo-Methode

Als von Differenzenverfahren unabhängiges Alternativmodell zur Beschreibung von Transportvorgängen in streuenden Medien wurde zusätzlich zu der Diskretisierung mittels Finiter Differenzen eine sogenannte *Monte-Carlo-Simulation* implementiert. Der wesentliche Vorteil dieser Monte-Carlo-Simulationen ist die hohe Flexibilität bei der Beschreibung komplexer Situationen und sicherlich auch der hohe Grad an Anschaulichkeit. Dennoch sind die Verwendungsmöglichkeiten im Rahmen inverser Probleme recht begrenzt. Das Haupteinsatzgebiet in diesem Zusammenhang scheint zum einen die Erzeugung simulierter, von dem verwendeten Vorwärtslöser unabhängiger Daten zu sein, zum anderen können damit recht gut qualitative Aussagen wie beispielsweise das Auftreten von Wellenfronten oder von singulären Strukturen überprüft werden. Der Nachteil der Monte-Carlo-Methode etwa im Rahmen der optischen Tomographie ist der extrem hohe Zeitaufwand, der für die Sammlung hinreichend verläßlicher Daten betrieben werden muß. Immerhin sind für die Historie eines durchschnittlichen von einem Detektor erfaßten Teilchens an die tausend Streuvorgänge und ebensoviele Transportschritte nachzuvollziehen. Die benötigte Zeit zur Berechnung von etwa 10^7 Photonenhistorien -dies ist eine durchaus realistische Zahl bei der Simulation einer Detektormessung- ist somit beträchtlich. (Etwa ein Tag auf einer SUN Sparc ULTRA). Bei dieser Rechnung sind Varianz-Reduktionsmethoden bereits inbegriffen.

5.3.1 Ausgewählte Literaturhinweise

Bei der Implementation der Monte-Carlo-Simulation haben wir uns durchgehend an den in der Literatur beschriebenen und allgemein verwendeten Methoden orientiert. Es wurde lediglich eine Anpassung an das hier generell verwendete schachbrettartige Grundgebiet vorgenommen: Zur Beschleunigung der einzelnen Transportschritte wurde das Gitter vor der eigentlichen Simulation auf ein „Einheitsgitter“ transformiert, welches durch periodisches Aneinanderfügen des Quadrats $[0,1] \times [0,1]$ entsteht. Innerhalb dieser einzelnen Parzellen wurden sämtliche Koeffizienten als konstant angenommen (vgl. dazu Abb.2).

Wir wollen nun als allgemeine Referenzen zu der Monte-Carlo-Methode einige Bücher und Artikel angeben, die sich bei der Entwicklung des hier verwendeten Programms als sehr nützlich erwiesen haben. Als leicht lesbare Einführung in die Monte-Carlo-Methode wollen wir dabei zunächst einmal das Büchlein [71] von J. M. Hammersley und D. C. Handscomb nennen. Eines der ersten mathematisch gut fundierten Werke stellt das Buch [178] von J. Spanier und E. M. Gelbard dar. Die zur Zeit wahrscheinlich neueste und umfassendste Darstellung findet sich in dem Buch [113] von I. Lux und L. Koblinger. Von außerordentlich großem Nutzen für den Autor war der entsprechende Abschnitt über die Monte-Carlo-Simulation des Neutronentransports in dem Buch [170] von Yu. A. Shreider. Die Dokumentation [182] von L. Wang und S. L. Jacques ist aus der Sicht der optischen Tomographie sehr lesenswert. Viele sehr hilfreiche Anregungen insbesondere zur Verwendung von Methoden zur Varianzreduktion hat der Autor aus Gesprächen mit S. Arridge und M. Schweiger und aus dem Artikel [78] erhalten. Last but not least soll hier das sehr lesbare Skript [168] von N. Schmitz und F. Lehmann genannt werden, in welchem unter anderem viele Tips zur Erzeugung gewünschter Zufallszahlenverteilungen zu finden sind.

5.3.2 Grundlegendes zur Simulation

Bei der Monte-Carlo-Simulation wird die Historie eines jeden einzelnen Teilchens einer vorgegebenen Gesamtpopulation nach statistischen Gesetzmäßigkeiten auf einem Rechner nachvollzogen. Ein wesentliches Hilfsmittel dazu ist ein Zufallszahlengenerator, welcher eine Gleichverteilung von Zufallszahlen auf dem Intervall $[0, 1]$ erzeugt. Den bekannten physikalischen Gesetzmäßigkeiten entsprechend werden damit Eintrittswinkel, freie Weglängen, Streuwinkel bzw. Absorptionsereignisse berechnet. Diese direkte Nachbildung der zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge wird als „Analoges Monte-Carlo“ bezeichnet. Da bei dieser Vorgehensweise auch für die jeweilige Anwendung uninteressante Teilchenhistorien komplett nachvollzogen werden, ist dieses Analoge Monte-Carlo in vielen Anwendungen unverhältnismäßig zeitaufwendig. Aus diesem Grunde haben sich sogenannte Varianz-Reduktions-Methoden durchgesetzt, von denen die wichtigste (und in dieser Arbeit verwendete) wohl die „Methode der statistischen Gewichte“ darstellt. Jedem Photon wird dabei zu Beginn seiner Irrfahrt ein „Startgewicht“ mitgegeben. Wird nun ein Photon in einem simulierten Wechselwirkungsprozeß physikalisch betrachtet absorbiert, so wird ihm bei dieser Methode lediglich ein der Absorptionswahrscheinlichkeit entsprechender Anteil seines Gewichtes abgezogen. Gelangt dieses Photon schließlich nach einer Reihe solcher Wechselwirkungen in einen Detektor, so wird es dort auch lediglich mit dem ihm noch verbleibenden Gewicht registriert. Ein weiteres hier verwendetes Verfahren zur Reduktion der Varianz ist das sogenannte „Russische

Roulette“, welches einem Teilchen mit zu geringem verbleibendem Gewicht mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit die Chance gibt, mit neuem Gewicht wiedergeboren zu werden, mit der Komplementärwahrscheinlichkeit dieses jedoch in seiner Irrfahrt stoppt. Für eine mathematisch strenge Rechtfertigung dieser und anderer Methoden der Varianzreduktion verweisen wir auf die angegebene Literatur.

5.3.3 Die modellierte Irrfahrt

Wir wollen diese hier nur skizzieren. Die Irrfahrt eines Photons werde mit der Zuweisung einer Startposition, einer Startzeit und einer Startrichtung an einem Ort innerhalb des Gebietes $\bar{\Omega}$ begonnen. Sei nun l die zu berechnende freie Weglänge des Teilchens. Für diese gilt die *Verteilungsfunktion*

$$P\{l < x\} \;=\; 1 - e^{-\int_0^x a(s)ds}, \tag{3.9}$$

wobei s den Abstand von dem letzten Wechselwirkungsort (bzw. der Startposition) entlang der Flugbahn angibt und das Symbol P die entsprechende Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $\{l < x\}$ bezeichnet (vgl. Shreider [170]). Die entsprechende *Verteilungsdichte* beträgt

$$p_l(x) \;=\; \frac{d}{dx} P\{l < x\} \;=\; a(x)e^{-\int_0^x a(s)ds}. \tag{3.10}$$

Sei $\xi \in [0,1]$ eine auf dem Intervall $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahl. Dann gewinnen wir die aktuelle freie Weglänge $l(\xi)$ eines Photons mittels der Formel (vgl. Shreider [170], S.99)

$$l(\xi) \;=\; (l_1 + l_2 + \ldots + l_{N-1}) + \frac{-\ln\xi - \sum_{i=1}^{N-1} l_i a_i}{a_N}, \tag{3.11}$$

wobei l_i die Weglänge des Photons in dem i-ten vollständig durchquerten Pixel $\Box_i$ bezeichnet und a_i entsprechend den konstanten Wert der Dämpfung $a(\Box_i)$ innerhalb dieses i-ten Pixels. Der Quotient auf der rechten Seite von (3.11) gibt gerade die Weglänge in dem nicht mehr vollständig durchquerten Pixel $\Box_N$ an. Der Index N ist dabei durch die Bedingung $\sum_{i=1}^{N-1} l_i a_i < -\ln\xi < \sum_{i=1}^{N} l_i a_i$ eindeutig festgelegt. Überquert das Teilchen entlang dieses Weges die physikalische Berandung $\partial\Omega$ des zugrundeliegenden Gebietes $\bar{\Omega}$, so wird es in dem dort positionierten Detektor registriert und die Irrfahrt somit beendet.

Anderenfalls wird die neue Position des Teilchens gemäß der Formel (3.11) berechnet. Dort findet nun in jedem Fall eine Wechselwirkung mit dem umgebenden Medium statt, entweder ein Absorptions-, oder aber ein Streuvorgang. Entsprechend der Aufteilung der Dämpfung $a(x) = \sigma_a(x) + b(x)$ in einen Absorptionsanteil $\sigma_a(x)$ und einen Streuanteil $b(x)$ wird nun in einem erneuten Zufallsexperiment entschieden, welches dieser beiden Ereignisse eintritt.

Wird es absorbiert, so wird im Rahmen einer analogen Simulation die Teilchenhistorie damit beendet, während bei Anwendung der Methode der statistischen Gewichte stattdessen das momentane Gewicht des Teilchens mit dem Faktor $\frac{b(x)}{a(x)}$ multipliziert und damit bei echt positiver Absorptionswahrscheinlichkeit $\sigma_a(x) > 0$ herabgesetzt wird. In letzterem Fall kann nun noch bei Erreichen eines zu kleinen Gewichtes (wiederum mittels eines Zufallsexperimentes) darüber entschieden werden, ob dieses Photon mit einem nach einer vorgegebenen Regel wieder erhöhten Gewicht die Irrfahrt fortsetzen darf, oder ob dieses entgültig gestoppt und stattdessen mit der Irrfahrt des nächsten Photons begonnen wird.

Wird das Photon dagegen gestreut, so muß als nächstes gemäß dem vorgegebenen Streugesetz eine neue Flugrichtung berechnet werden. Im Falle isotroper Streuung bedeutet dies einfach, aus einer Gleichverteilung in S^1 eine beliebige neue Richtung zufällig auszuwählen. Für den Fall, daß Henyey-Greenstein-Streuung vorliegt, wird dagegen -etwa mit Hilfe einer sogenannten „Inversionsmethode“, vgl. N. Schmitz [168]- aus der vorgegebenen Streuformel

$$p(\cos\vartheta; g) \;=\; \frac{1}{2}\frac{1-g^2}{(1+g^2-2g\cos\vartheta)^{3/2}} \tag{3.12}$$

und einer vorgegebenen Gleichverteilung auf $[0,1]$ eine Zufallszahl $\xi = \cos\vartheta$ berechnet, die der Verteilung (3.12) genügt. Für nähere Einzelheiten verweisen wir auch hier wieder auf die angegebene Literatur, etwa [168], [182] oder [113]. Entsprechend dem so berechneten Streukosinus ϑ wird sodann die Irrfahrt in die neue Richtung fortgesetzt durch Bestimmung einer neuen freien Weglänge l.

5.4 Einige Monte-Carlo-Simulationen

5.4.1 Beispiel 1: Drei Regimes der Transportgleichung

Bei der Behandlung der verschiedenen Approximationen der Transportgleichung sind wir auf im wesentlichen drei verschiedene Erscheinungsformen

(„Regimes") gestoßen: Dem vorwiegend singulären Verhalten der Ausbreitung (vgl. die Born-Approximation), dem vorwiegend wellenähnlichen Verhalten der Ausbreitung (vgl. die Telegraphenapproximation) und dem vorwiegend diffusionsförmigen Verhalten der Ausbreitung (vgl. die Diffusionsapproximation). Mit der Monte-Carlo-Methode steht uns nun das passende Werkzeug zur Verfügung, diese einzelnen Regimes in Form von Momentaufnahmen der Verteilungsdichte sichtbar zu machen. Wir wollen im folgenden (exemplarisch) einige „Zeitreihen" vorstellen, in denen diese verschiedenen Regimes der Transportgleichung besonders deutlich zutage treten. Für die Simulationen wurden in den meisten Fällen an die 10^7 Photonen verwendet, wobei aber der Schwerpunkt nicht so sehr auf diese quantitativen Aspekte gelegt wurde. Dargestellt werden in den Bildern die über die Richtungen integrierten Photonendichten zu zehn aufeinanderfolgenden Zeitpunkten gleichen Abstandes.

Als Quellterm diente jeweils ein Lichtpuls, welcher deltaförmig in Raum, Zeit und Richtung in das Medium gestrahlt wurde. Bis auf MC7 wurden in allen Fällen über das Gebiet konstante Streukoeffizienten der angegebenen Größe verwendet. Der Absorptionskoeffizient war ebenfalls jeweils konstant und hatte in allen Fällen die Größe $\sigma_a = 0.001cm^{-1}$.

Abb. MC1 zeigt eine Situation mit ausgesprochen kleinem Streuparameter von $b = 0.05cm^{-1}$ bei isotroper Streuung. Deutlich erkennbar ist der singuläre Anteil, der sich mit konstanter Geschwindigkeit geradlinig durch das Medium bewegt.

In Abb. MC2 wurde der Streukoeffizient auf $0.5cm^{-1}$ bei isotroper Streuung angehoben. Der singuläre Anteil ist nach wie vor dominant, aber es läßt sich ansatzweise eine Art Wellenfront erkennen.

In Abb. MC3 wurde die Situation eines Streukoeffizienten der Größe $2.5cm^{-1}$ bei Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$ simuliert. Hier ist nun deutlich eine Wellenfront erkennbar. Eine solche Situation ist also weitaus besser durch die Telegraphenapproximation als durch die Diffusions- oder Bornapproximation darstellbar.

In Abb. MC4 wurde $b = 25.0cm^{-1}$ bei isotroper Streuung gewählt. Die Ausbreitung der Photonen trägt nun klar diffusionsförmigen Charakter. Eine Wellenfront oder ein singulärer Anteil sind mit bloßem Auge nicht erkennbar.

Die gleiche Situation ($b = 25.0cm^{-1}$) wurde in Abb. MC5 noch einmal bei Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$ dargestellt. Auch hier überwiegt der diffusionsförmige Charakter, wenngleich sich anfänglich auch eine Wellenfront andeutet.

In der Abb. MC6 wurde ein mittlerer Streukoeffizient von $b = 2.5cm^{-1}$

bei isotroper Streuung gewählt. Da die Dämpfung $\sigma_a + b$ des ungestreuten Anteils nicht sehr groß ist, ist der singuläre (ungestreute) Anteil relativ stark. Die verbleibenden gestreuten Photonen scheinen sich dagegen eher diffusionsförmig zu verhalten. Der Grund hierfür ist wohl in dem vorliegenden isotropen Streugesetz zu suchen. (Isotropie des Flusses ist eine der Grundvoraussetzungen der Gültigkeit der Diffusionsnäherung.) In dieser Simulation wird zudem deutlich, daß es zuweilen durchaus Sinn macht, vor der Entwicklung der Lösung eines Transportproblems in Kugelflächenfunktionen den singulären Anteil abzuspalten und diesen dann getrennt zu behandeln. (Vgl. dazu den Abschnitt 4.4 *Separation der Singularitäten.*)

Ein ähnliches Verhalten ist in Abb. MC7 zu erkennen, in welcher wiederum gemäßigte Streuung ($b = 1.0cm^{-1}$) bei isotropem Streugesetz angenommen wurde. Außerdem wurde in die Mitte des Gebietes ein stark streuendes (quadratisches) Objekt mit $b = 10.0cm^{-1}$ gesetzt. Deutlich erkennbar ist auch hier der singuläre Anteil der ungestreuten Photonen, der geradlinig das Gebiet durchquert. Dieser erzeugt dabei eine Photonenwolke, die sich weder komplett diffusionsförmig noch komplett wellenförmig verhält. Sobald diese Wolke und der singuläre Anteil das quadratische, stark streuende Objekt durchqueren, erzeugen sie dort eine sich kreisförmig zum Rand hin ausbreitende Wellenfront, die ihrerseits natürlich zudem diffusionsförmigen Charakter hat. Auch ist in dem quadratischen Objekt eine Art „Nachglühen“ zu erkennen, was daraus resultiert, daß dort eingedrungene Photonen aufgrund der hohen Streuung in diesem Objekt eine Zeitlang „gefangen“ bleiben, bevor sie nach und nach wieder an die Umgebung abgegeben werden. Im Vergleich zu der entsprechenden Simulation ohne ein solches quadratisches Objekt erscheint hier die Störung (das Quadrat) im Fluß also als eine Art „Streuquelle“. Diese kann beispielsweise von dem Rücktransportalgorithmus erkannt und lokalisiert werden. (Vgl. die entsprechenden Ausführungen in dem Abschnitt 6.7)

5.4.2 Beispiel 2: Die Struktur der Daten

Als weitere Anwendung der Monte-Carlo-Methode haben wir in ein rechteckiges Gebiet homogener Parameterverteilung jeweils Photonen in Form eines Deltapulses (in Ort, Zeit und Richtung) eingestrahlt, und auf dem Rande des Gebietes die resultierende Detektorantwort gemessen. Dies läßt Rückschlüsse zu auf die Struktur der Daten, wie sie bei der Anwendung des Rücktransportalgorithmus in den verschiedenen Fällen schwacher und starker Streuung vorliegen.

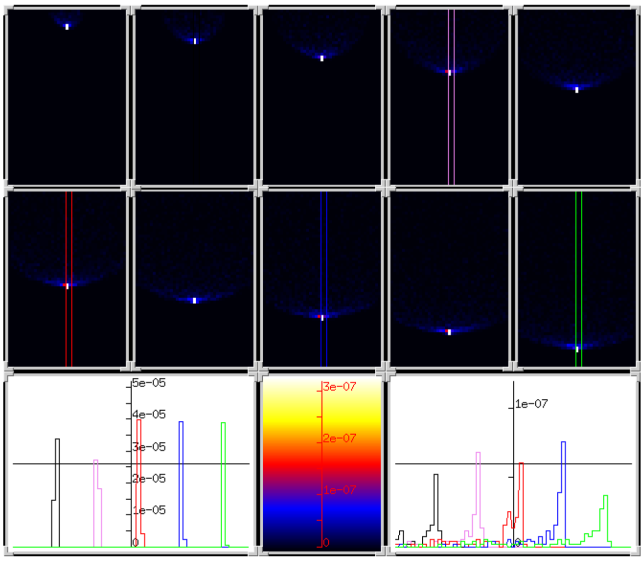
Es wurden drei physikalisch relevante Fälle getestet:
1.) Der schwach streuende Fall: $b = 1.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.025cm^{-1}$, bei isotroper Streuung.
2.) Der sehr stark streuende Fall mit den Parametern, wie sie in etwa bei der optischen Tomographie vorliegen: $b = 100.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.025cm^{-1}$, bei Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$.
3.) Die zu 2.) gehörige Parameterkonstellation, wie sie bei der Näherung durch die Diffusionsapproximation angenommen wird: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.025cm^{-1}$, bei isotroper Streuung.
Die Quelle war jeweils auf der Mitte einer der langen Seiten des $4.0cm \times 6.0cm$ großen Gebietes positioniert und es wurde dort senkrecht in das Gebiet eingestrahlt. Es wurde jeweils eine Zeitspanne von $20s$ bei einer angenommenen Geschwindigkeit von $1cms^{-1}$ gemessen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen MC8, MC9 und MC10 dargestellt. Die Anzahl der zur Simulation verwendeten Photonen betrug dabei jeweils etwa 5.10^7.

Auf der linken Seite der Abbildungen sind jeweils auf der vertikalen Achse nacheinander (im Gegenuhrzeigersinn) die Detektoren aufgetragen, angefangen mit der Seite, an welcher die Quelle positioniert ist. Auf der horizontalen Achse ist entsprechend die Zeitentwicklung für jeden dieser Detektoren aufgetragen.

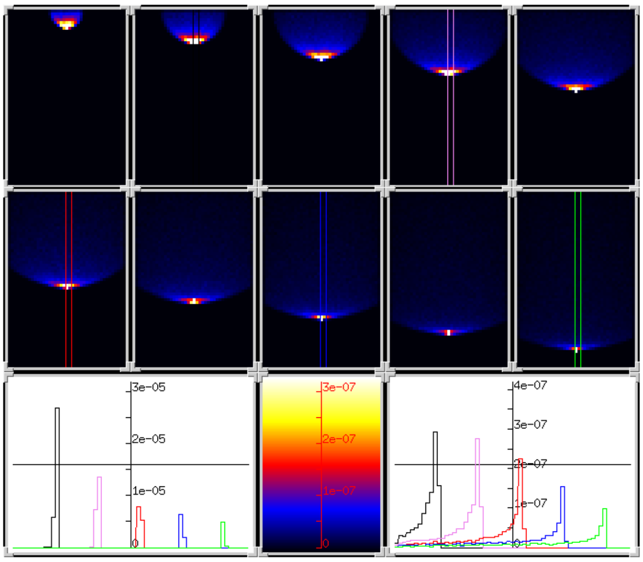
In MC8 sind im oberen Diagramm der rechten Seite die Zeitentwicklungen in jeweils einem quellnahen und in dem der Quelle genau gegenüberliegenden Detektor graphisch dargestellt. Gut erkennbar ist der singuläre peak, der von den zuerst ankommenden ungestreuten Teilchen in dem der Quelle gegenüberliegenden Detektor erzeugt wird. In der unteren Graphik sind für diesen Zeitpunkt (genau $4.0s$ nach dem Start) und für einen kurz darauffolgenden Zeitpunkt sämtliche Detektorausschläge (vertikaler Schnitt) gegeneinander aufgezeichnet. In beiden Graphiken geht dieser singuläre peak weit über die obere Bildkante hinaus (Er liegt in der dortigen Skala bei etwa 800000).

In MC9 und MC10 sind auf der rechten Seite jeweils die Zeitverläufe in einem quellnahen und einem quellfernen Detektor graphisch aufgezeichnet. Sie zeigen die in der optischen Tomographie typische Gestalt einer Meßkurve. Mit dem bloßen Auge ist praktisch kein Unterschied zwischen den Detektorantworten der beiden Simulationen zu erkennen. Dies läßt auf eine gute Approximierbarkeit der Tranportgleichung durch die Diffusionsnäherung in diesem stark streuenden Fall schließen.

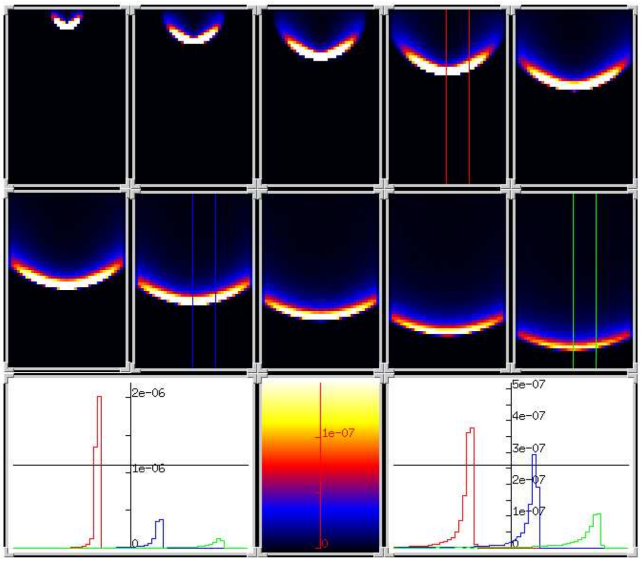
5.4.3 Abbildungen



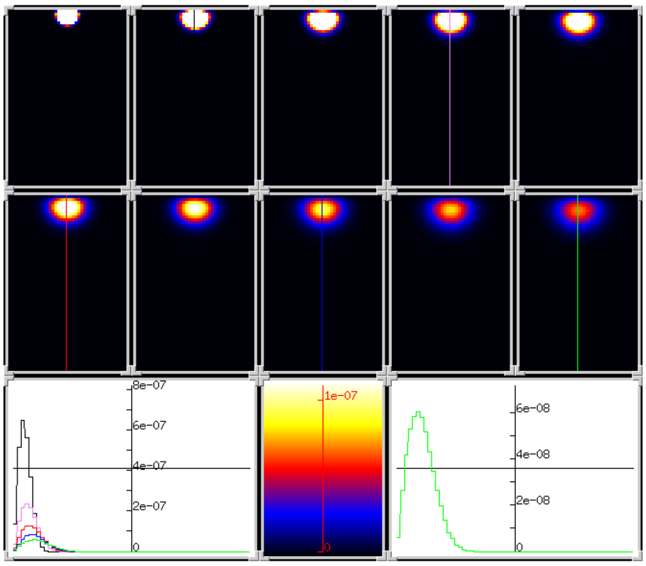
MC1



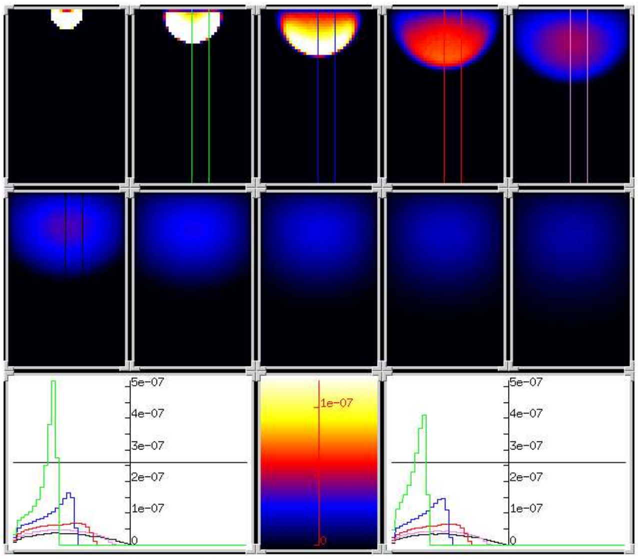
MC2


2e-06
1e-06
0
1e-07
0
5e-07
4e-07
3e-07
2e-07
1e-07
0

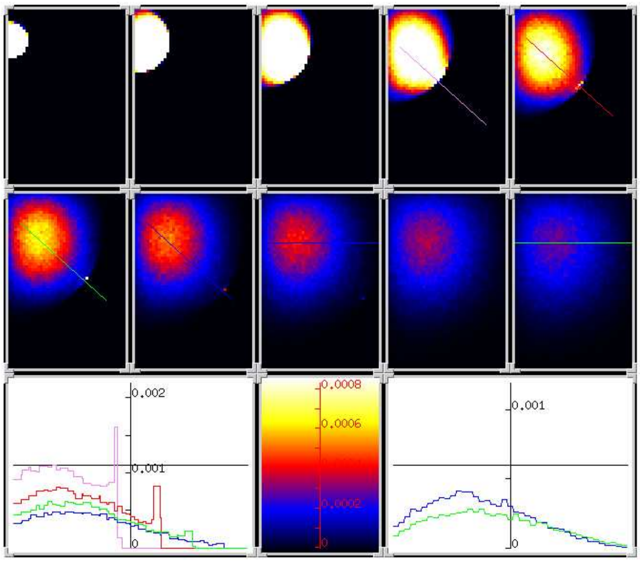
MC3


8e-07
6e-07
4e-07
2e-07
0
1e-07
0
6e-08
4e-08
2e-08
0

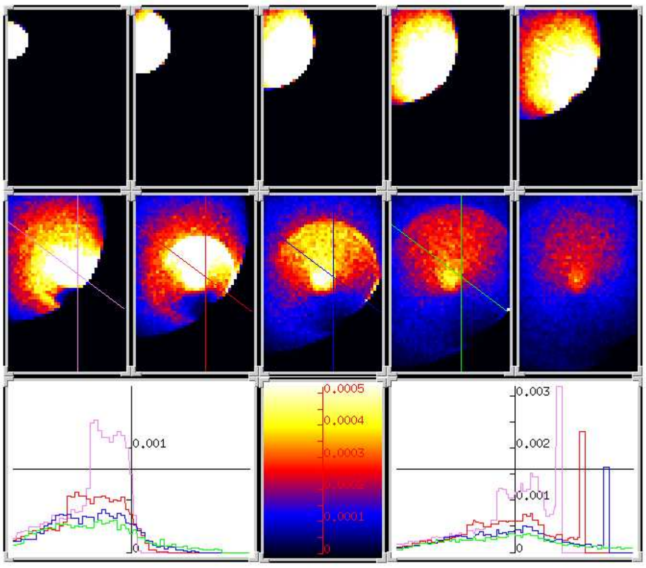
MC4


5e-07
4e-07
3e-07
2e-07
1e-07
0
1e-07
0
5e-07
4e-07
3e-07
2e-07
1e-07
0

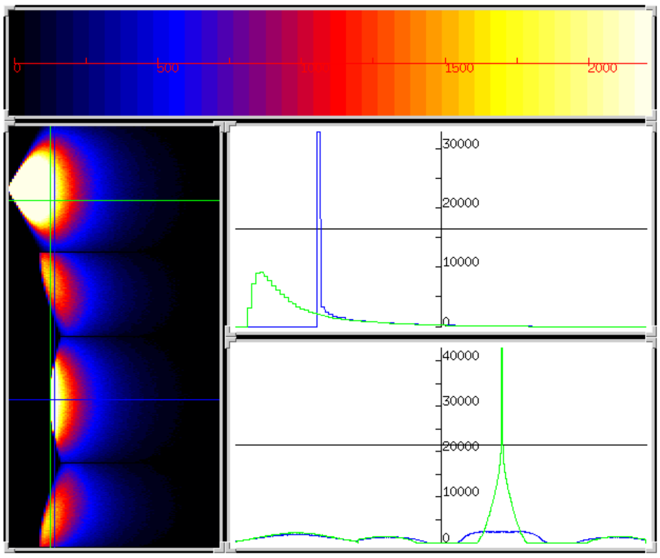
MC5


0.002
0.001
0
0.0008
0.0006
0.0002
0
0.001
0

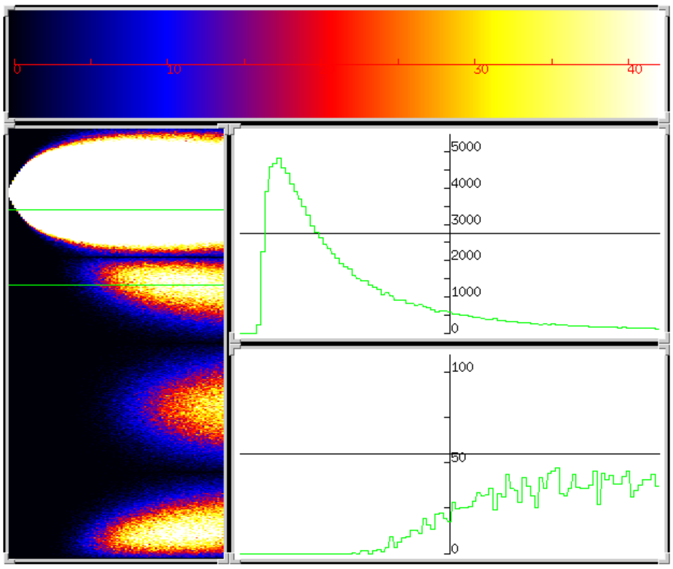
MC6


0.001
0.0005
0.0004
0.0003
0.0001
0
0.003
0.002
0.001
0

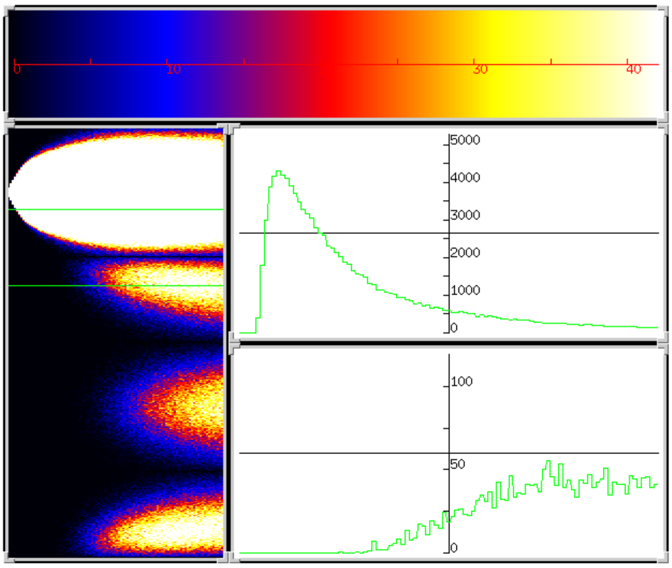
MC7


0
500
1500
2000
30000
20000
10000
0
40000
30000
20000
10000
0

MC8


0
10
30
40
5000
4000
3000
2000
1000
0
100
50
0

MC9


0
10
30
40
5000
4000
3000
2000
1000
0
100
50
0

MC10

Kapitel 6

Der Rücktransportalgorithmus

6.1 Problemstellung

Wir wollen die in [135] vorgestellte Rückpropagationsmethode auf den Fall der Lasertomographie anwenden.
Dazu betrachten wir die zeitabhängige Transportgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \theta \cdot \nabla u(x,\theta,t) + a(x)u(x,\theta,t) - b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta'$$

$$= q(x,\theta,t) \qquad \text{in} \quad \Omega \times S^{n-1} \times [0,T], \tag{1.1}$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(x,\theta,0) = 0 \qquad \text{in} \quad \Omega \times S^{n-1} \tag{1.2}$$

und der Randbedingung

$$u(x,\theta,t) = 0 \qquad \text{auf} \quad \Gamma_-. \tag{1.3}$$

Es ist

$$\Gamma_\pm := \left\{(x,\theta,t) \in \partial\Omega \times S^{n-1} \times [0,T], \quad \pm\nu(x)\cdot\theta > 0\right\}.$$

Ω ist ein konvexes kompaktes Gebiet in $\mathbb{R}^n$ $(n = 2,3)$ mit C^1-glattem Rand $\partial\Omega$, $\nu(x)$ bezeichnet die äußere Normale an $\partial\Omega$ im Punkt x. Die Größe $u(x,\theta,t)$ bezeichnet die Dichte der Photonen, die sich zum Zeitpunkt t am

Ort x in Richtung θ bewegen. Die Geschwindigkeit der Photonen wurde auf $c = 1$ normiert.
$a(x)$ ist der totale Wirkungsquerschnitt (oder die Dämpfung), $b(x)$ der Streuquerschnitt, $\sigma_a(x) := a(x) - b(x)$ der Absorptionsquerschnitt, und $\eta(\theta \cdot \theta')$ gibt die bei einem Streuvorgang resultierende Richtungsverteilung der gestreuten Photonen im Vergleich zur Richtung vor dem Stoß an. Es gilt

$$\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') d\theta \; = \; 1. \tag{1.4}$$

Wir wollen das Problem (1.1)-(1.3) für p verschiedene auf $\partial\Omega$ positionierte Quellen betrachten. Wir werden im Rahmen dieser Arbeit dafür beispielsweise Diracsche Deltapulse in Ort, Zeit und Richtung ansetzen,

$$q_j(x, \theta, t) \; := \; \delta(x - s_j)\delta(t)\delta(\theta - \theta_j) \qquad (j = 1, \ldots, p) \tag{1.5}$$

mit $\nu(s_j) \cdot \theta_j \; = \; -1$ (oder allgemeiner $\nu(s_j) \cdot \theta_j \; < \; 0$). Wir strahlen also an den Orten $s_j \in \partial\Omega$ in Richtung $-\nu(s_j)$ zur Zeit $t = 0$ jeweils einen Lichtpuls in das Medium ein. Es können aber auch nach Belieben andere auf $\partial\Omega$ positionierte Quellen verwendet werden, ja sogar Quellen im Inneren des Gebietes. Gemessen wird dann eine Funktion des jeweils austretenden Flusses $u|_{\Gamma_+}$ auf $\partial\Omega$, siehe weiter unten. Wir setzen die Streuphasenfunktion $\eta(\theta \cdot \theta')$ als bekannt voraus und wollen die Verteilungen $\sigma_a(x)$, $b(x)$ in Ω aufgrund der Messungen rekonstruieren.

6.2 Linearisierung

Wir schreiben die Gleichung (1.1) als

$$T \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} u \; = \; q, \tag{2.6}$$

wobei $T \binom{\sigma_a}{b}$ ein Operator ist, der von einem Raum der Zustände U in einen Raum der Quellfunktionen Y abbildet,

$$T \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \; : \; U \; \to \; Y. \tag{2.7}$$

Liegt eine der speziellen Quellen q_j , $j = 1, \ldots, p$, vor, so versehen wir die entsprechende Lösung mit eben diesem Index j,

$$T \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} u_j \; = \; q_j, \quad j = 1, \ldots, p. \tag{2.8}$$

Wir werden etwas weiter unten die verwendeten Räume U und Y genauer definieren. Hier setzen wir zunächst nur voraus, daß U und Y gewisse Banachräume sind.
Wir definieren den linearen Operator

$$A \,:\, U \to Y, \tag{2.9}$$
$$Au \,:=\, (\frac{\partial}{\partial t} + \theta \cdot \nabla)\, u,$$

und den bilinearen Operator

$$B \,:\, F \times U \to Y, \tag{2.10}$$
$$B((\sigma_a, b)^T, u) \,:=\, (\sigma_a(x) + b(x))u \,-\, b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta')u(x, \theta', t)\, d\theta'.$$

F ist dabei der Banachraum der Parameter,

$$F \,=\, F_1 \times F_2, \tag{2.11}$$

mit $\sigma_a \in F_1$, $b \in F_2$. Auch diese Räume werden im folgenden näher spezifiziert.

Es sei hier angemerkt, daß wir bewußt σ_a und nicht a als zweiten Parameter wählen, da physikalisch gesehen a nicht unabhängig von b ist. Die Wahl von a würde deshalb in der numerischen Realisierung einige Probleme aufwerfen, auf die wir später noch näher eingehen werden. (Vgl. Abschnitt 6.8)

Als zusätzliche Information auf $\partial\Omega \times [0, T]$ sind für $j = 1, \ldots, p$ die Meßwerte

$$\tilde{G}_j(x, t) \,=\, \int_{S^{n-1}} \nu(x) \cdot \theta\, \hat{u}_j(x, \theta, t)\, d\theta \tag{2.12}$$

gegeben, welche Elemente eines Banachraumes Z seien. Der Index j weist hier wieder auf die vorliegende Quelle q_j hin, und $\hat{u}_j$ steht für die physikalisch in (x, θ, t) vorliegende Flußdichte bei Anlegen dieser Quelle q_j. Der Ausdruck (2.12) entspricht dabei den im Rahmen der optischen Tomographie üblicherweise angenommenen Detektorcharakteristiken, vgl. Kaltenbach und Kaschke [88] oder Ishimaru [79], [82]. Die Meßwerte korrespondieren mit den real vorliegenden Parametern $(\tilde{\sigma}_a, \tilde{b})^T$, von denen wir annehmen, daß sie ebenfalls in F liegen. Wir kennen diese Parameter jedoch nicht. Stattdessen steht uns lediglich eine Schätzung $(\sigma_a, b)^T$ zur Verfügung, mit welcher wir das Vorwärtsproblem (2.6) lösen können und damit auf $\partial\Omega \times [0,T]$ die Ausdrücke

$$G_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} (x,t) \;:=\; \int_{S^{n-1}} \nu(x) \cdot \theta u_j(x,\theta,t)\, d\theta \tag{2.13}$$

berechnen können. Die u_j seien dabei Lösungen der Probleme

$$T \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} u_j \;=\; q_j \tag{2.14}$$

für $j = 1, \ldots, p$. Es gelte für alle j

$$u_j \in U\,, \quad G_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \in Z. \tag{2.15}$$

Unser Ziel ist es nun, $(\sigma_a, b)^T$ so zu bestimmen, daß gilt

$$G_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} (x,t) \;=\; \tilde{G}_j(x,t) \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0,T]. \tag{2.16}$$

Bei allgemein vorgegebenen nicht exakten Parametern bleibt uns in der Regel ein nicht verschwindendes „Residuum“

$$R_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} (x,t) \;:=\; G_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} (x,t) \;-\; \tilde{G}_j(x,t), \tag{2.17}$$

welches ebenfalls in dem Raum Z liegt.

Wir wollen mit Hilfe eines iterativen Verfahrens versuchen, diese p Residuen zu minimieren. Wir nehmen also an, daß wir für

$$R_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \;\equiv\; 0 \quad \text{für } j = 1, \ldots, p \tag{2.18}$$

die richtigen (d.h. real vorliegenden) Parameter gefunden haben. (D.h. wir setzen die Eindeutigkeit der Lösung dieses inversen Transportproblems voraus. Hierzu gibt es bislang nur sehr wenige gesicherte Erkenntnisse. Vgl. dazu etwa den oben angeführten Existenz- und Eindeutigkeitssatz von Choulli und Stefanov [47].)
Sei nun $(\sigma_a, b)^T$ eine solche Schätzung. Um im Rahmen eines Newton- oder Gauß-Newton-Verfahrens sämtliche der p Residuen (2.17) gleichzeitig zu bearbeiten, wäre die Berechnung und Invertierung von Matrizen beträchtlichen Ausmaßes erforderlich. Sei etwa $R_j' \binom{\sigma_a}{b}$ die noch genauer zu definierende Fréchet-Ableitung der Abbildung $R_j \binom{\sigma_a}{b}$, so wäre ein Operator der Form

$$\left\{ R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} R_k' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \right\}_{j,k=1,\dots,p} \tag{2.19}$$

zu berechnen und zu invertieren, was hier praktisch kaum durchführbar erscheint. Wir fordern deshalb lediglich, daß eine der Gleichungen (2.18) erfüllt wird. Wir suchen also eine Korrektur (einen „update") $(h,k)_j^T$, für die gilt

$$\begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j \approx \begin{pmatrix} \tilde{\sigma}_a \\ \tilde{b} \end{pmatrix}, \qquad \text{also} \tag{2.20}$$

$$R_j \left(\begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j \right) \approx 0 \quad \text{für ein gegebenes}\, j. \tag{2.21}$$

Sukzessive werden dann in Form eines „sweeps" sämtliche Quellen q_j, $j = 1, \dots, p$, nacheinander in einer frei zu wählenden Reihenfolge jeweils genau einmal für einen solchen update herangezogen. Erst nach Durchlauf eines solchen sweeps wird überlegt, ob die bislang gewonnene Näherung bereits gut genug ist, oder ob ein weiterer sweep durchgeführt werden soll.

Für die Fréchet-Ableitung R_j' der Abbildung R_j gilt nach Definition

$$R_j \left(\begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} \right) - R_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} = R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} + o\left(\left\| \begin{matrix} h \\ k \end{matrix} \right\|_F \right), \tag{2.22}$$

wobei o das Landausche Symbol und $\|\,.\,\|_F$ die Norm im Parameterraum F bezeichnet. R_j wird dabei als Abbildung von dem Parameterraum F in den Raum der Daten Z aufgefaßt,

$$R_j \; : \; F \to Z \quad \text{für}\, j = 1, \dots, p. \tag{2.23}$$

Motiviert durch (2.22) suchen wir also im Rahmen einer Newton-Methode eine Korrektur $(h,k)_j^T$, für die gilt

$$R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j = -R_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

Wir nehmen an, daß die Gleichung (2.24) unterbestimmt ist. Dies erscheint vernünftig, da bei nur einer Messung auf $\partial\Omega \times [0,T]$ „wahrscheinlich" nicht genügend Information zur Verfügung steht, um auf ganz Ω zwei Parameter zu rekonstruieren. (Auch hier gibt es bislang nur sehr wenige Erkenntnisse.) Wir suchen deshalb die Lösung kleinster Norm. Wir stellen uns also die Aufgabe

$$\text{Minimiere} \quad \left\{ \left\| \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j \right\|_2^2 \quad , \quad \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j \text{ löst (2.24)} \right\} \tag{2.25}$$

mit einer geeigneten Norm $\| \, . \, \|_2$ der Parameter. Um diese Minimierungsaufgabe lösen zu können, benötigen wir zunächst einen Ausdruck für die Fréchet-Ableitung $R_j^{'} \binom{\sigma_a}{b}$. Einen solchen wollen wir nun berechnen.

6.3 Beweis der Fréchet-Differenzierbarkeit von R_j

Seien

$$\sigma_a \, , \, b \, \in \, L^\infty(\Omega), \tag{3.26}$$

mit $\sigma_a, b > 0$, $\eta(\, . \, \cdot \theta^{'})$ und $\eta(\theta \cdot \, .) \in L^1(S^{n-1})$ für fast alle $\theta^{'}, \theta \in S^{n-1}$ resp., so daß zudem gilt

$$\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) \, d\theta \;=\; 1 \qquad \text{f.f.a.} \quad \theta^{'} \in S^{n-1}, \tag{3.27}$$

$$\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta^{'}) \, d\theta^{'} \;=\; 1 \qquad \text{f.f.a.} \quad \theta \in S^{n-1}. \tag{3.28}$$

Wir definieren die Räume

$$\begin{aligned} H^1 \;&:=\; \Big\{ u \in L^1(\Omega \times S^{n-1} \times [0,T]) \, , \, (\partial_t \,+\, \theta \cdot \nabla) u \;\in\; L^1(\Omega \times S^{n-1} \times [0,T]) \Big\}, \\ W_1 \;&:=\; \Big\{ u \in H^1 \, , \, u(x,\theta,0) = 0 \text{ auf } \Omega \times S^{n-1} \, , \, u|_{(\Gamma_-, |\nu\cdot\theta| d\sigma d\theta dt)} = 0 \Big\}. \end{aligned}$$

Sei weiter

$$q \;\in\; L^1(\Omega \times S^{n-1} \times [0,T]). \tag{3.29}$$

Dann sind die Voraussetzungen des Existenz- und Eindeutigkeitssatzes des Abschnitts 2.1 erfüllt. Es gilt also der

Satz 5.3.1: *Unter den Voraussetzungen (3.26)-(3.29) besitzt das Transportproblem (1.1)-(1.3) eine eindeutige Lösung $u \in W_1$.*

Für $u \in W_1$ und $u \in H^1$ definieren wir die Norm

$$\|u\|_{W_1} \;=\; \|u\|_{H^1} \;:=\; \|u\|_{L^1} \;+\; \|(\partial_t + \theta \cdot \nabla)u\|_{L^1}. \tag{3.30}$$

Für das Gebiet Ω fordern wir der Einfachheit halber, daß es konvex und endlich ist und einen mindestens C^1-glatten Rand $\partial\Omega$ besitzt. Verallgemeinerungen sind hier aber sicherlich möglich. Genauer definieren wir nun die Räume

$$\begin{aligned} F &:= L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega), & Y &:= L^1(\Omega \times S^{n-1} \times [0,T]), \\ Z &:= L^1(\partial\Omega \times [0,T]), & U &:= W_1, \end{aligned}$$

mit $\|(\sigma_a, b)^T\|_F \;:=\; \|\sigma_a\|_\infty \;+\; \|b\|_\infty$. F wird im folgenden der Raum der Parameter $(\sigma_a, b)^T$ sein, Y der Raum der Quellfunktionen q, Z der Raum der Daten oder Meßwerte G, und U der Raum der Zustände u. Alle diese Räume sind Banachräume, aber keine Hilberträume. Sie stellen die physikalisch sinnvollen Räume für das Vorwärtsproblem der Transportgleichung dar.
Für alle Funktionen $u \in U$ definieren wir auf $\partial\Omega \times [0,T]$ die Funktionen

$$G(x,t) \;:=\; \int_{S^{n-1}} \nu(x) \cdot \theta\, u(x,\theta,t)\, d\theta, \tag{3.31}$$

wobei $\nu(x)$ wieder die äußere Normale auf $\partial\Omega$ im Punkt $x \in \partial\Omega$ bezeichnet. Wie wir zeigen werden, leben diese Funktionen in den Räumen Z. Es gilt genauer der

Satz 5.3.2: *Für $u \in W_1$ und bei C^1-glattem Rand $\partial\Omega$ liegen die durch (3.31) definierten Funktionen G in $L^1(\partial\Omega \times [0,T])$. Die durch (3.31) vermittelte Abbildung*

$$M \;:\; W_1 \;\to\; L^1(\partial\Omega \times [0,T])$$

ist stetig, d.h. es gibt eine Konstante $C_1 > 0$, so daß gilt

$$\|G\|_{L^1(\partial\Omega\times[0,T])} \;\le\; C_1\, \|u\|_{W_1}. \tag{3.32}$$

Beweis des Satzes: Der Beweis dieses Satzes basiert auf einer Idee von V. Palamodov [142]. Wir merken zunächst an, daß aufgrund der Randbedingung $u|_{\Gamma_-} = 0$ das Integral in (3.31) tatsächlich nur Beiträge von Richtungen

θ mit $\nu(x) \cdot \theta > 0$ bekommt.
Sei nun $y \in \partial\Omega$. Für $(y, \theta) \in \Gamma_+$ definieren wir

$$\tau(y, -\theta) \;:=\; \sup\{\, t \,,\, y - \tau^{'}\theta \in \Omega \quad \text{für } 0 \leq \tau^{'} < t \,\}.$$

Die Größe $\tau(y, -\theta)$ stellt die Laufzeit eines Teilchens durch das Gebiet Ω dar, welches an der Stelle y in Richtung $-\theta$ dort eindringt und sich geradlinig ausbreitet.
Wähle nun eine kleine Konstante $\epsilon > 0$ und definiere hierfür die Mengen

$$\begin{aligned} S_\epsilon(y) &:= \{\, \theta \in S^{n-1},\ \nu(y) \cdot \theta > 0 \text{ und } \tau(y, -\theta) \leq \epsilon \,\}, \\ S^{'}_\epsilon(y) &:= \{\, \theta \in S^{n-1},\ \nu(y) \cdot \theta > 0 \text{ und } \tau(y, -\theta) > \epsilon \,\}. \end{aligned}$$

Wir wählen nun für dieses ϵ eine feste Funktion $h \in C^1([-\epsilon, 0])$ mit

$$h(-\epsilon) \;=\; 0, \qquad h(0) \;=\; 1, \qquad 0 \leq h \leq 1. \tag{3.33}$$

Wir greifen uns einen Punkt $y \in \partial\Omega$ heraus und betrachten eine kleine Umgebung $\delta y \subset \partial\Omega$ dieses Punktes in einem kleinen Zeitintervall $\delta t \subset [0, T]$. Sei $t^{'} \in \delta t$. Damit führen wir nun in dieser Umgebung eine Parametertransformation φ durch, welche auf (x, t) folgendermaßen wirkt:

$$(x, t) \;\rightarrow\; (y, t^{'}) \;+\; s\,(\theta, 1), \tag{3.34}$$

mit $x \in \bar{\Omega}$, $y \in \partial\Omega$, $s, t^{'} \in \mathbb{R}$. Sie ist gegeben durch

$$\varphi \;:\; (x, \theta, t) \;\rightarrow\; (y, s, \theta, t^{'}) \tag{3.35}$$

mit

$$\begin{aligned} x &\rightarrow y + s\theta, \\ t &\rightarrow t^{'} + s, \\ \theta &\rightarrow \theta. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Schreiben wir $u = \tilde{u} \circ \varphi$, so folgt

$$u(x, \theta, t) \;=\; \tilde{u}(y, s, \theta, t^{'}). \tag{3.37}$$

Nach der Transformationsformel geht dabei das Volumenelement $dxd\theta dt$ über in

$$dxd\theta dt \;=\; |D\varphi|\, dydsd\theta dt^{'}, \tag{3.38}$$

wobei $|D\varphi|$ den Betrag der Jakobi-Determinante bezeichnet. Für die durch (3.36) gegebene Transformation φ rechnet man leicht nach, daß für $\nu \cdot \theta > 0$ gilt

$$|D\varphi| \;=\; (\nu \cdot \theta)^{-1}. \tag{3.39}$$

Zudem besteht für die Ableitung von $\tilde{u}$ nach der Variable s die Beziehung

$$(\partial_t + \theta \cdot \nabla)\, u(x, \theta, t) \;=\; \frac{\partial}{\partial s}\tilde{u}(y, s, \theta, t^{'}). \tag{3.40}$$

Dies folgt sofort aus der Kettenregel. Wir integrieren nun die Funktion

$$(h\tilde{u})(y, s, \theta, t^{'}) \;:=\; h(s)\tilde{u}(y, s, \theta, t^{'}) \tag{3.41}$$

von $s = -\epsilon$ bis $s = 0$. Wir bekommen dadurch für alle Richtungen $\theta \in S_\epsilon$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} &|\,(h\tilde{u})(y, s = 0, \theta, t^{'}) \;-\; (h\tilde{u})(y, s = -\epsilon, \theta, t^{'})\,| \\ &\quad = \;|\, \int_{-\epsilon}^{0} (h\tilde{u})^{'}_s\, ds \,| \;\leq\; |\, \int_{-\epsilon}^{0} h^{'}_s \tilde{u}\, ds \,| \;+\; |\, \int_{-\epsilon}^{0} h\tilde{u}^{'}_s\, ds\,|. \end{aligned} \tag{3.42}$$

Für Richtungen $\theta \in S^{'}_\epsilon$ integrieren wir dagegen nur von $s = -\tau(y, -\theta)$ bis $s = 0$. Es folgt dort analog

$$\begin{aligned} &|\,(h\tilde{u})(y, s = 0, \theta, t^{'}) \;-\; (h\tilde{u})(y, s = -\tau(y, -\theta), \theta, t^{'})\,| \\ &\quad \leq\; |\, \int_{-\tau(y,-\theta)}^{0} h^{'}_s \tilde{u}\, ds \,| \;+\; |\, \int_{-\tau(y,-\theta)}^{0} h\tilde{u}^{'}_s\, ds\,|. \end{aligned} \tag{3.43}$$

In (3.42) gilt $(h\tilde{u})(y, s = -\epsilon, \theta, t^{'}) = 0$, da $h(-\epsilon) = 0$ vorausgesetzt wurde. In (3.43) gilt $(h\tilde{u})(y, s = -\tau(y, -\theta), \theta, t^{'}) = 0$ aufgrund der Randbedingung $u|_{\Gamma_-} = 0$. In beiden Fällen folgt also

$$|\tilde{u}(y, s = 0, \theta, t^{'})| \;\leq\; \|h\|_{C^1} \left(\int_{-\gamma(y,\theta)}^{0} |\tilde{u}|\, ds \;+\; \int_{-\gamma(y,\theta)}^{0} |\frac{\partial}{\partial s}\tilde{u}|\, ds \right), \tag{3.44}$$

mit $\gamma(y,\theta)=\epsilon$ für $\theta\in S_\epsilon(y)$ und $\gamma(y,\theta)=\tau(x,-\theta)$ für $\theta\in S_\epsilon^{'}(y)$, und

$$\|h\|_{C^1} \;:=\; \sup_{x\in[-\epsilon,0]}|h(s)| \;+\; \sup_{x\in[-\epsilon,0]}|h^{'}(s)|.$$

Integrieren wir also über ein Element $\delta y\delta t^{'}$, so folgt

$$\int_{\delta y}\int_{\delta t'}\left|\int_{S^{n-1}}(\nu\cdot\theta)\,\tilde{u}(y,s=0,\theta,t^{'})d\theta\right|dt^{'}dy$$

$$=\int_{\delta y}\int_{\delta t'}\left|\int_{S_\epsilon}+\int_{S_\epsilon^{'}}(\nu\cdot\theta)\tilde{u}(y,s=0,\theta,t^{'})d\theta\right|dt^{'}dy$$

$$\leq\int_{\delta y}\int_{\delta t'}\|h\|_{C^1}\left(\int_{S_\epsilon\cup S_\epsilon^{'}}(\nu\cdot\theta)\left[\int_{-\gamma(y,\theta)}^{0}|\tilde{u}|\,ds+\int_{-\gamma(y,\theta)}^{0}|\frac{\partial}{\partial s}\tilde{u}|\,ds\right]d\theta\right)dt^{'}dy.$$

Integrieren wir diese (lokalen) Ausdrücke über den gesamten Rand $\partial\Omega$ und das gesamte Zeitintervall $[0,T]$ und transformieren wir zurück, so folgt schließlich

$$\int_{\partial\Omega}\int_{[0,T]}\left|\int_{S^{n-1}}(\nu\cdot\theta)\,u(y,\theta,t)d\theta\right|dtdy$$

$$\leq\;\|h\|_{C^1}\int_{\Omega}\int_{[0,T]}\int_{S^{n-1}}(|u|\;+\;|(\partial_t+\theta\cdot\nabla)u|)\,d\theta dtdx$$

$$=\;\|h\|_{C^1}\,\|u\|_{W_1}\;<\;\infty.$$

Dies aber ist gerade die Abschätzung (3.32) des Satzes, womit dieser schon bewiesen ist.

Wir zitieren nun ein weiteres Ergebnis aus Dautray und Lions [51]

Lemma 1: *Die Lösung von (1.1)-(1.3) erfüllt unter den Voraussetzungen (3.26)-(3.29) für $q\in L^1(\Omega\times S^{n-1}\times[0,T])$ die Volterrasche Integralgleichung zweiter Art*

$$u(x,\theta,t)\;=\;\int_0^t e^{-\int_0^{\tau^{'}}a(x-\tau\theta)d\tau}q_s(x-\tau^{'}\theta,\theta,t-\tau^{'})\,H(\tau_*(x,-\theta)-\tau^{'})\,d\tau^{'},\tag{3.45}$$

mit

$$
\begin{aligned}
q_s(x,\theta,t) &:= b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta' \;+\; q(x,\theta,t) && (3.46)\\
\tau_*(x,-\theta) &:= \sup\{\,t\,;\,x-s\theta\in\Omega \text{ für } 0\le s<t\,\} && (3.47)
\end{aligned}
$$

und H der Heaviside-Funktion.

Dies ist gerade die Integraldarstellung der Lösung der Transportgleichung. Für das Transportproblem

$$T\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix} u \;=\; q \tag{3.48}$$

liefert sie gerade die eindeutig bestimmte Lösung $u \in W_1$,

$$u \;=\; T^{-1}\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix} q. \tag{3.49}$$

In der üblichen Art und Weise zeigt man über die Entwicklung in eine Neumannreihe, daß unter den Voraussetzungen (3.26)-(3.29) gilt

$$\|u\|_{L^1} \;\le\; C_2\,\|q\|_{L^1}, \tag{3.50}$$

mit einer positiven Konstante $C_2 > 0$. Physikalisch bedeutet (3.50) gerade, daß sich in dem System nicht mehr Teilchen befinden können, als durch die Quelle q hineingegeben wurden. Wir können damit nun leicht eine weitere Abschätzung zeigen. Es gilt das

Lemma 2: *Unter den Voraussetzungen (3.26)-(3.29) gilt*

$$\|u\|_{W_1} \;\le\; C_3\,\|q\|_{L^1}, \tag{3.51}$$

mit einer positiven Konstante $C_3 > 0$. Die kleinstmögliche dieser Konstanten C_3 nennen wir $\|T^{-1}\left(\begin{smallmatrix}\sigma_a\\ b\end{smallmatrix}\right)\|_{W_1}$.

Beweis: Direkt aus der Transportgleichung (1.1) folgt für $(x,\theta,t)\in\Omega\times S^{n-1}\times[0,T]$ die Abschätzung

$$|\,(\partial_t+\theta\cdot\nabla)u\,| \;\le\; |-a(x)u + b(x)\int \eta u d\theta'| \;+\; |q|.$$

Integration über $\Omega \times S^{n-1} \times [0,T]$ liefert wegen

$$\int_{S^{n-1}} b(y)\,(\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta')\,d\theta$$

$$= \; b(x)\int_{S^{n-1}} u(x,\theta',t)\,(\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')d\theta)\,d\theta' \;=\; \int_{S^{n-1}} b(x)u(x,\theta',t)\,d\theta'$$

die Beziehung

$$\begin{aligned}\|\,(\partial_t+\theta\cdot\nabla)u\,\|_{L^1} \;&\le\; \int_{[0,T]}\int_\Omega\int_{S^{n-1}} |\,[a(x)-b(x)]u(x,\theta,t)|\,d\theta dx dt \;+\; \|q\|_{L^1}\\ &\le\; \|a-b\|_\infty\,\|u\|_{L^1} \;+\; \|q\|_{L^1}.\end{aligned}$$

Berücksichtigen wir nun noch (3.50), so folgt schließlich

$$\begin{aligned}\|u\|_{W_1} \;&=\; \|u\|_{L^1} \;+\; \|\,(\partial_t+\theta\cdot\nabla)u\,\|_{L^1}\\ &\le\; (\,1+C_2+\|a-b\|_\infty C_2\,)\,\|q\|_{L^1}.\end{aligned}$$

Setze also $C_3 := (1+C_2+\|a-b\|_\infty C_2)$, so folgt das Lemma.

Wir können uns nun dem eigentlichen Beweis der Fréchet-Differenzierbarkeit von R zuwenden.
Dazu betrachten wir die zusammengesetzte Abbildung

$$\begin{array}{rccccc} R\;: & F & \to & U & \to & Z\\ & (\sigma_a,b)^T & \to & u & \to & (\,\int_{S^{n-1}}(\nu\cdot\theta)ud\theta)\;-\;\tilde{G},\end{array}$$

mit einer beliebigen Funktion $\tilde{G}\in Z$. R bildet also die Parameter $(\sigma_a,b)^T$ auf die Differenz zwischen den mittels einer Vorwärtslösung berechneten Meßwerten und einer vorgegebenen Funktion, im allgemeinen den Daten, $\tilde{G}$ ab.
Seien

$$\begin{array}{rcl} A\;:\;U & \to & U, \\ u & \to & (\partial_t+\theta\cdot\nabla)u. \end{array} \tag{3.52}$$

$$\begin{array}{rcl} B\;:\;F\times U & \to & U, \\ ((\sigma_a,b)^T,u) & \to & (\sigma_a+b)u\;-\;b\int\eta u d\theta. \end{array} \tag{3.53}$$

Für $(\sigma_a, b)^T \in F$ gilt dann

$$T\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix} u \;=\; Au \;+\; B((\sigma_a, b)^T, u). \tag{3.54}$$

Seien nun $u, v, w \in U$ und $(\sigma_a, b)^T$, $(h, k)^T \in F$, so daß gilt

$$\begin{aligned} T((\sigma_a, b)^T, u) &= q, & (3.55)\\ T((\sigma_a + h, b + k)^T, v) &= q, & (3.56)\\ T((\sigma_a, b)^T, w) &= -Hu, & (3.57)\end{aligned}$$

$$\text{mit} \qquad Hu \;:=\; (h + k)u \;-\; k\int \eta u d\theta. \tag{3.58}$$

Wegen $u \in L^1$ und $h, k \in L^\infty$ ist auch $Hu \in L^1$, so daß w eindeutig in U bestimmt ist. Selbstverständlich sollen $(\sigma_a, b)^T$ und $(h, k)^T$ die Voraussetzungen $\sigma_a + h > 0$ und $b + k > 0$ erfüllen, um in einem physikalisch sinnvollen Rahmen zu bleiben und die Existenz einer Lösung zu gewährleisten. Die Größen h und k dürfen dagegen durchaus negative Werte annehmen.
Mit (3.54) haben wir also

$$\begin{aligned} Av \;+\; B((\sigma_a + h, b + k)^T, v) &= q, & (3.59)\\ Au \;+\; B((\sigma_a, b)^T, u) &= q, & (3.60)\\ Aw \;+\; B((\sigma_a, b)^T, w) &= -Hu, & (3.61)\end{aligned}$$

$$\text{und} \qquad Hu \;=\; B((h, k)^T, u). \tag{3.62}$$

Lemma 3: *Es gilt*

$$\|v - u\|_U \;\le\; C_4 \,\|(h, k)^T\|_F, \tag{3.63}$$

mit einer Konstante $C_4 > 0$.

Beweis: Bilde die Differenz aus (3.59) und (3.60)

$$A(v - u) \;+\; B((\sigma_a, b)^T, v - u) \;+\; B((h, k)^T, v) \;=\; 0$$

$$\Leftrightarrow \qquad A(v - u) \;+\; B((\sigma_a, b)^T, v - u) \;=\; -B((h, k)^T, v) \;=\; -Hv.$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \qquad \|v-u\|_U &\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} \|Hv\|_{L^1} \\
&\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} 2 \|(h,k)^T\|_F \|v\|_{L^1} \\
&\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} 2 \|(h,k)^T\|_F \, C_2 \|q\|_{L^1}.
\end{aligned}$$

Setze also $C_4 := 2C_2 \| T^{-1} \binom{\sigma_a}{b} \|_{W_1} \|q\|_{L^1}$, so folgt die Behauptung.

Lemma 4: *Setze $z := v - u - w$. Dann gilt*

$$\|z\|_U \leq C_5 \|(h,k)^T\|_F^2, \tag{3.64}$$

mit einer positiven Konstante $C_5 > 0$.

Beweis: Bilde die Differenz „(3.59)−(3.60)−(3.61)“

$$\begin{aligned}
Az + B((\sigma_a, b)^T, z) + B((h,k)^T, v) &= B((h,k)^T, u) \\
\Leftrightarrow \qquad Az + B((\sigma_a, b)^T, z) &= -H(v-u).
\end{aligned}$$

Mit (3.54) und (3.63) folgt also

$$\begin{aligned}
\|z\|_U &\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} \|H(v-u)\|_{L^1} \\
&\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} 2 \|(h,k)^T\|_F \|v-u\|_{L^1} \\
&\leq \| T^{-1} \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \|_{W_1} 2 \|(h,k)^T\|_F \, C_4 \|(h,k)^T\|_F.
\end{aligned}$$

Setze also $C_5 := 2C_4 \| T^{-1} \binom{\sigma_a}{b} \|_{W_1}$, so folgt die Behauptung.

Lemma 5: *Es gilt für z aus Lemma 4*

$$\| \int_{S^{n-1}} (\nu \cdot \theta) z(x, \theta, t) d\theta \|_Z \leq C_6 \|(h,k)^T\|_F^2, \tag{3.65}$$

mit einer positiven Konstante $C_6 > 0$.

Beweis: Mit (3.32) und (3.64) folgt wegen $z \in W_1$

$$\| \int_{S^{n-1}} (\nu \cdot \theta) z d\theta \|_Z \;\leq\; C_1 \|z\|_U \;\leq\; C_1 C_5 \, \|(h,k)^T\|_F^2 .$$

Mit $C_6 := C_1 C_5$ gilt also (3.65).

Damit können wir nun den zentralen Satz dieses Abschnitts formulieren.

Satz 5.3.3: *Die Abbildung*

$$\begin{aligned} R : \quad F \quad &\to \quad Z, \\ (\sigma_a, b)^T \quad &\to \quad \int_{S^{n-1}} (\nu \cdot \theta) u d\theta \;-\; \tilde{G} \end{aligned} \tag{3.66}$$

ist Fréchet-differenzierbar. Ihre Fréchet-Ableitung im Punkt $(\sigma_a, b)^T$ ist gegeben durch

$$R' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} \;=\; \int_{S^{n-1}} (\nu \cdot \theta) w(x, \theta, t) d\theta, \tag{3.67}$$

wobei w das Problem (3.57) löst:

$$T((\sigma_a, b)^T, w) \;=\; -(h+k)u \;+\; k \int \eta u d\theta. \tag{3.68}$$

Beweis: Es gilt mit (3.65), (3.67) und z aus Lemma 4

$$\begin{aligned} &\lim_{\|(h,k)^T\|_F \to 0} \frac{1}{\|(h,k)^T\|_F} \left\| R \begin{pmatrix} \sigma_a + h \\ b + k \end{pmatrix} - R \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} - R' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} \right\|_Z \\ &= \lim_{\|(h,k)^T\|_F \to 0} \frac{1}{\|(h,k)^T\|_F} \left\| \int_{S^{n-1}} (\nu \cdot \theta) z d\theta \right\|_Z \\ &\leq \lim_{\|(h,k)^T\|_F \to 0} C_6 \|(h,k)^T\|_F \;=\; 0. \end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung des Satzes.

6.4 Das Minimierungsproblem

Wir stellen uns nun gemäß (2.25) die folgende Minimierungsaufgabe

$$\text{Min } \|(h,k)_j^T\|_2^2 \quad \text{unter} \quad R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j = -R_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}, \tag{4.69}$$

$$\text{mit} \qquad \|(h,k)_j^T\|_2^2 := \int_\Omega (h_j^2(x) + k_j^2(x))\, dx. \tag{4.70}$$

Den festen Index j in $(h,k)_j$ werden wir der Übersichtlichkeit halber im folgenden nicht mitführen. Sei $g_j := -R_j \binom{\sigma_a}{b}$. Wir verwenden die Methode der Lagrangeschen Parameter, vgl. z.B. [109]. Mit einer Funktion $\lambda \in L^\infty(\partial\Omega \times [0,T])$ als Lagrange-Parameter wollen wir das folgende Funktional stationär machen

$$J((h,k)^T, \lambda) := \frac{1}{2}\|(h,k)^T\|_2^2 + \int_{\partial\Omega\times[0,T]} \lambda \left[R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} - g_j \right] d\sigma dt. \tag{4.71}$$

Setze

$$J_1((h,k)^T, \lambda) := \int_{\partial\Omega\times[0,T]} \lambda R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} d\sigma dt. \tag{4.72}$$

Zunächst zeigen wir, daß es einen Operator $R_j' \binom{\sigma_a}{b}^*$ gibt, mit dem wir den Ausdruck J_1 wie folgt darstellen können

$$\int_{\partial\Omega\times[0,T]} \lambda R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} d\sigma dt = \int_\Omega \left[R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^* \lambda \right] \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} dx. \tag{4.73}$$

Hierfür definieren wir den Raum

$$W_\infty := \Big\{ z \in L^\infty(\Omega\times S^{n-1}\times[0,T]),\ (\partial_t+\theta\cdot\nabla)z \in L^\infty(\Omega\times S^{n-1}\times[0,T]),$$
$$z|_{\Gamma_+} \in L^\infty(\Gamma_+, \nu\cdot\theta d\sigma d\theta dt),\ z(x,\theta,T) = 0 \text{ auf } \Omega\times S^{n-1} \Big\}.$$

Es gilt der

Satz 5.3.4: *Sei $z \in W_\infty$ Lösung der (adjungierten) Transportgleichung*

$$-\frac{\partial z}{\partial t} - \theta \cdot \nabla z(x,\theta,t) + (\sigma_a(x) + b(x))\, z(x,\theta,t) - b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta')\, z(x,\theta',t) d\theta'$$

$$= 0 \qquad in \quad \Omega \times S^{n-1} \times [0,T], \tag{4.74}$$

mit der Anfangsbedingung

$$z(x,\theta,T) = 0 \qquad auf \quad \overset{\circ}{\Omega} \times S^{n-1} \tag{4.75}$$

und der Randbedingung

$$z|_{\Gamma_+} = \tilde{z}(x,t) := \lambda(x,t) \in L^\infty(\partial\Omega \times [0,T]). \tag{4.76}$$

Dann gilt Gleichung (4.73) mit

$$\left[R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^* \lambda\right](x) := \begin{pmatrix} -I_1(u,z;x) \\ I_2(u,z;x) - I_1(u,z;x) \end{pmatrix}, \tag{4.77}$$

$$\begin{aligned} I_1(u,z;x) &:= \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} u(x,\theta,t) z(x,\theta,t)\, d\theta dt, \qquad (4.78) \\ I_2(u,z;x) &:= \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} \left(\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') u(x,\theta',t) d\theta' \right) z(x,\theta,t)\, d\theta dt. \end{aligned}$$

Der durch (4.77) definierte Operator $R_j' \binom{\sigma_a}{b}^*$ ist linear.

Beweis: Die Linearität folgt sofort aus der Linearität von (4.74). Auf Funktionen $z \in W_\infty$ und $w \in W_1$ können wir die Greensche Formel anwenden. Zusammen mit einer partiellen Integration über die Zeit bekommen wir die Darstellung

$$\int_{[0,T]} \int_\Omega \int_{S^{n-1}} \left[\frac{\partial w}{\partial t} + \theta \cdot \nabla w + (\sigma_a + b)(x) w - b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') w d\theta'\right] z\, d\theta dx dt$$

$$= \int_{[0,T]} \int_\Omega \int_{S^{n-1}} \left[-\frac{\partial z}{\partial t} - \theta \cdot \nabla z + (\sigma_a + b)(x) z - b(x) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') z d\theta'\right] w\, d\theta dx dt$$

$$+ \int_{[0,T]} \int_{\partial\Omega} \int_{S^{n-1}} z(x,\theta,t) w(x,\theta,t)\, \nu(x) \cdot \theta\, d\theta d\sigma dt \tag{4.79}$$

$$+\int_\Omega \int_{S^{n-1}} \Big[w(x,\theta,T)z(x,\theta,T) \; - \; w(x,\theta,0)z(x,\theta,0)\Big] d\theta dx.$$

Sei nun w Lösung der linearisierten Gleichung (3.57), d.h.

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \theta\cdot\nabla w(x,\theta,t) + (\sigma_a(x)+b(x))\, w(x,\theta,t) - b(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')w(x,\theta',t)d\theta'$$

$$= \; -(h(x)+k(x))\, u \; + \; k(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta', \tag{4.80}$$

mit der Anfangsbedingung

$$w(x,\theta,0) = 0 \qquad \text{in} \quad \Omega\times S^{n-1} \tag{4.81}$$

und der Randbedingung

$$w(x,\theta,t) = 0 \qquad \text{auf} \quad \Gamma_-. \tag{4.82}$$

Nach dem Satz 5.3.3 ist dann $R_j'\left(\begin{smallmatrix}\sigma_a\\ b\end{smallmatrix}\right)\left(\begin{smallmatrix}h\\ k\end{smallmatrix}\right)$ gegeben durch

$$R_j'\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}h\\ k\end{pmatrix} \; = \; \int_{S^{n-1}} \nu(x)\cdot\theta w(x,\theta,t)d\theta. \tag{4.83}$$

Da nun zusätzlich z Lösung von (4.74) mit der Anfangsbedingung (4.75) und der Randbedingung (4.76) ist, folgt mit (4.79)

$$\int_{[0,T]}\int_\Omega\int_{S^{n-1}} \left[(-h(x)-k(x))u \; + \; k(x)\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u(x,\theta',t)d\theta'\right] z d\theta dx dt$$

$$= \; \int_{[0,T]}\int_{\partial\Omega} g(x,t)\left[\int_{S^{n-1}} \nu(x)\cdot\theta w(x,\theta,t)d\theta\right] d\sigma dt$$

$$= \; \int_{[0,T]}\int_{\partial\Omega} g(x,t)\, R_j'\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}h\\ k\end{pmatrix} \; d\sigma dt.$$

Wir schreiben dies als

$$\left[R_j'\begin{pmatrix}\sigma_a\\ b\end{pmatrix}^* g\right]\begin{pmatrix}h\\ k\end{pmatrix} \; = \; \int_{[0,T]}\int_{S^{n-1}} \Bigg[-huz$$

$$+\, k\left(\int_{S^{n-1}} \eta u d\theta' \; - \; u\right) z\Bigg] d\theta dt.$$

Das ist aber gerade die Behauptung des Satzes.

Mit (4.73) folgt als Bedingung für einen stationären Punkt $((h^*, k^*)^T, \lambda^*)$ von J bezüglich $(h, k)^T$

$$\begin{pmatrix} h^* \\ k^* \end{pmatrix} = R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^* \lambda^*. \tag{4.84}$$

Eine weitere Gleichung erhalten wir aus der Stationaritätsbedingung für J bezüglich des Parameters λ, wenn wir (4.84) berücksichtigen:

$$R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h^* \\ k^* \end{pmatrix} = R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^* \lambda^* = g_j. \tag{4.85}$$

Unsere Aufgabe ist es nun, aus Gleichung (4.85) ein geeignetes λ^* zu bestimmen, und damit aus der Gleichung (4.84) die Größe $(h^*, k^*)^T$ zu berechnen. Von diesem $(h^*, k^*)^T$ nehmen wir dann an, daß es unser Minimierungsproblem (4.69) löst und somit, gegebenenfalls nach einer zusätzlichen Regularisierung, eine geeignete Korrektur an unsere Schätzung der Parameter $(\sigma_a, b)^T$ liefert.

6.5 Der Algorithmus

Wir können die Minimierungsaufgabe (4.69) nicht exakt lösen, schon allein aufgrund des Umstandes, daß wir den Operator

$$\Lambda := C_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} := R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} R_j' \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^* \tag{5.86}$$

aus (4.85) nicht kennen (und dieser auch nicht einfach zu berechnen ist). Stattdessen werden wir für die gesuchten Funktionen λ^* Approximationen verwenden, von denen wir vermuten, daß sie in etwa das Verhalten dieses Operators Λ widerspiegeln. Wir bezeichnen die so approximierte Funktion mit $\tilde{\Lambda}^{-1} g_j$ und setzen dafür je nach Situation eine der folgenden Funktionen an:

$$\tilde{\Lambda}_1^{-1} g_j(y,t) := g_j(y,t) \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \times [0,T], \tag{5.87}$$

$$\tilde{\Lambda}_2^{-1} g_j(y,t) := g_j^F(y,t) \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \times [0,T], \tag{5.88}$$

$$\tilde{\Lambda}_3^{-1} g_j(y,t) := t(t+1) g_j^F(y,t) \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \times [0,T], \tag{5.89}$$

$$\text{mit} \quad g_j^F(y,t) := \begin{cases} g_j(y,t) & \text{für} \quad \text{dist}_{\partial\Omega}(y, s_j) > K_F, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

und einer Konstante $K_F > 0$. In $\tilde{\Lambda}_2^{-1}$ wird also um die Quellposition $s_j \in \partial\Omega$ herum ein „Quellfenster" aus den Residuenwerten g_j herausgeschnitten, dessen Größe geeignet zu wählen ist. $\mathrm{dist}_{\partial\Omega}$ bezeichnet einen Abstand entlang $\partial\Omega$. In $\tilde{\Lambda}_3^{-1}$ wird zudem eine Zeitgewichtung vorgenommen. Wir werden bei der Besprechung der Ergebnisse näher darauf eingehen.

Auch in dem aus (4.84) berechneten Ausdruck $(h^*, k^*)^T$ werden wir gegebenenfalls eine Korrektur in der Form anbringen, daß wir für dessen Wert in jedem Punkt $x \in \Omega$ eine fest vorgegebene obere Schranke ansetzen. Hierdurch wird nicht nur gewährleistet, daß der so berechnete update tatsächlich eine Funktion aus $L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ darstellt, es wird uns zudem (zusammen mit der Wahl von ω, s.u.) eine größere Flexibilität in der Ausnutzung der in den Daten vorhandenen Informationen ermöglicht. Vgl. hierzu auch die Diskussion der Ergebnisse. Nennen wir diesen Abschneideoperator M, so können wir den in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus wie folgt darstellen:

$$
\begin{aligned}
&\text{for} \quad i = 1, \ldots, m \, \{ \\
&\qquad \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_0 = \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^{(i-1)} \\
&\qquad \text{for } j = 1, \ldots, p \, \{ \\
&\qquad\quad g_j = \tilde{\Lambda}^{-1} R_j\left(\begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_{j-1} \right) \\
&\qquad\quad \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j = -R_j'\left(\begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_{j-1} \right)^* g_j \\
&\qquad\quad \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_{j-1} + M\omega \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}_j \\
&\qquad \} \\
&\qquad \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}^{(i)} = \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix}_p \\
&\}
\end{aligned}
\tag{5.90}
$$

Hierbei ist m die Anzahl der durchzuführenden sweeps, $\binom{\sigma_a}{b}^{(0)}$ irgendeine

Startnäherung für $\binom{\sigma_a}{b}$, $\omega = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{pmatrix}$ eine Relaxations- oder Skalierungsmatrix, wobei die Faktoren $\omega_1, \omega_2 \in \mathbf{R}$ die Größe der einzelnen updates regulieren.

6.6 Das Verhalten bei schwacher und bei starker Streuung

Anmerkung: Die rechte Seite von (4.77) läßt sich mit (4.78) auch schreiben als

$$\int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} \begin{pmatrix} -u_j(x,\theta,t) \\ \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta')u_j(x,\theta',t)d\theta' \; - \; u_j(x,\theta,t) \end{pmatrix} z_j(x,\theta,t)\, d\theta dt.$$

Für den jeweiligen update folgt somit, wenn wir den Operator M vernachlässigen

$$\begin{aligned} \sigma_{a,j}(x) &= \sigma_{a,j-1}(x) \; - \; \omega_1 \, I_1(u_j, z_j; x) \qquad (6.91) \\ &= \sigma_{a,j-1}(x) \; - \; \omega_1 \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} u_j(x,\theta,t) z_j(x,\theta,t)\, d\theta dt, \\ b_j(x) &= b_{j-1}(x) \; + \; \omega_2 \left[I_2(u_j, z_j; x) - I_1(u_j, z_j; x) \right] \\ &= b_{j-1}(x) + \end{aligned}$$

$$\omega_2 \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} \left[\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'}) u(x,\theta^{'},t) d\theta^{'} \; - \; u_j(x,\theta,t) \right] z_j(x,\theta,t)\, d\theta dt,$$

mit geeigneten Parametern ω_1, ω_2.
Es fällt auf, daß für den Fall einer winkelunabhängigen Dichteverteilung

$$u_j(x,\theta,t) \; = \; \tilde{u}_j(x,t) \qquad (6.92)$$

der update für b_j wegen

$$\int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'}) \tilde{u}_j(x,t) d\theta^{'} \; = \; \tilde{u}_j(x,t) \int_{S^{n-1}} \eta(\theta\cdot\theta^{'})\, d\theta^{'} \; = \; \tilde{u}_j(x,t)$$

verschwindet. Dies deutet darauf hin, daß für den Fall exakter Gültigkeit der Diffusionsapproximation (Übereinstimmung von $u(x,\theta,t)$ mit seinem nullten Moment $\Phi(x,t)$) der Streukoeffizient $b(x)$ mit dem hier verwendeten Algorithmus (d.h. durch bevorzugte Verwendung der Richtungsinformation) praktisch nicht rekonstruiert werden kann. Für den Fall der Lasertomographie ist also zu prüfen, inwieweit die Flußdichte von der winkelunabhängigen Form (6.92) abweicht. Je ausgeprägter dies der Fall ist, umso einfacher wird die simultame Rekonstruktion der beiden Parameter σ_a und b gelingen.

Für den in einem vorangegangenen Kapitel diskutierten Fall einer in Ω vorhandenen singulären Struktur der Lösung u_j ist diese Forderung nach Anisotropie der Flußdichte $u(x, \theta, t)$ in der Regel erfüllt. Gerade in diesen Fällen sollte das Problem der simultanen Bestimmung von b und σ_a (und damit auch von a) -wenn überhaupt- mit dem vorliegenden Algorithmus besonders gut lösbar sein.

6.7 Physikalische Deutung einiger im Rücktransportalgorithmus auftretender Größen

Für die bei der Herleitung des Rüchtransportalgorithmus gewonnenen linearisierten Größen $R_j^{'}$ und $R_j^{'*}$ läßt sich eine sehr schöne physikalische Deutung angeben. Bei der Berechnung des Operators $R_j{}' \binom{\sigma_a}{b}$ ist eine Transportgleichung mit neuem Quellterm zu lösen (Glg. 4.80). Dies läßt sich wie folgt erklären. Angenommen, an einer gegebenen Position A des Gebietes Ω ist unsere Schätzung der Parameter nicht ganz korrekt. Wir schicken nun Photonen durch das Gebiet Ω und berechnen deren Ausbreitung mit Hilfe des (inkorrekten) Vorwärtsmodells. An der Stelle A werden wir deshalb einen Fehler machen. Angenommen, wir haben dort den Absorptionsparameter unterschätzt, so daß wir mehr Photonen diesen Punkt passieren lassen, als dies bei korrekt gewähltem Parameter der Fall gewesen wäre. Im Gedanken markieren wir uns diese Photonen und verfolgen ihren weiteren Weg mit. Einige von ihnen werden irgendwann dennoch absorbiert werden, ein gewisser Teil jedoch gelangt in die einzelnen von uns am Rande von Ω aufgestellten Detektoren. Dort werden sie entsprechend der Detektorcharakteristik registriert und erzeugen gerade das von uns berechnete Residuum in den Detektorwerten. Die Verteilungsdichte dieser Photonen, die an der Stelle A markiert wurden, wird gerade durch die Lösung der angegebenen Transportgleichung mit neuem Quellterm beschrieben. Dieser neue Quellterm (Wir nennen ihn aufgrund der hier beschriebenen Interpretation „Absorptionsquelle“ bzw. „Streuquelle“) gibt uns gerade den durch die Fehleinschätzung des Absorptions- und des Streuparameters erzeugten Anteil markierter Photonen an.

Nehmen wir nun weiter an, daß auch an einem weiteren Punkt $B \neq$

A eine Fehleinschätzung der Parameter vorliegt. Dann bedeutet die in R_j' eingebaute Linearisierung gerade, daß aus A stammende markierte Photonen diesen weiteren Fehler, der bei dem Passieren des Punktes B entsteht, „nicht sehen" (und umgekehrt). Dieser Fehler höherer Ordnung wird durch die Linearisierung also vernachlässigt. (Terme, in denen sowohl w_j als auch $\binom{h}{k}_j$ vorkamen, wurden bei der Linearisierung ignoriert.)

Auch der bei der Berechnung des updates $\binom{h}{k}_j$ auftretende adjungierte Operator $R_j'^*$ läßt sich physikalisch deuten. Angenommen, wir haben ein nicht verschwindendes Residuum in den Detektorwerten erhalten und fragen uns, an welcher Stelle des Gebietes und in welchem der Parameter die entsprechende Fehleinschätzung vorlag. Um den Ort dieser Fehleinschätzung aufzuspüren, ist es sicher eine gute Idee zu fragen, mit welcher Wahrscheinlichkeit die das Residuum erzeugenden Photonen denn überhaupt die einzelnen Punkte von Ω durchwandert haben. Ist diese groß, so nehmen wir an, daß dann auch die Wahrscheinlichkeit groß ist, daß an diesem Ort die Ursache für das Residuum zu finden ist. Entsprechend stark werden wir dort unsere Einschätzung der Parameter korrigieren.

Genau diese Zuordnung der Wahrscheilichkeit, daß ein im Detektor D registriertes Photon den Ort $x \in \Omega$ durchquert hat, leistet nun die adjungierte Transportgleichung. Diese Eigenschaft ist seit langem bekannt und wird beispielsweise in der Reaktortechnik oder bei der Varianzreduktion in Monte-Carlo-Simulationen ausgenutzt. (Vgl. beispielsweise [24], [113], [178], [49], [107].) Die gesuchte Wahrscheinlichkeit („Wichtigkeit" eines Ortes $x \in \Omega$ für ein Ereignis am Ort $y \in \Omega$) trägt dort die Bezeichnung „*Importance*", die Lösung der adjungierten Transportgleichung entsprechend „*importance function*". Genau diese importance function berechnen wir in unserem Rücktransport-Algorithmus automatisch, wenn wir die adjungierte Transportgleichung mit dem beobachteten Residuum als Randdaten lösen. Aus der Struktur der adjungierten Transportgleichung geht auch hervor, wie dies bewerkstelligt wird: Zu ihrem Detektionszeitpunkt werden die einzelnen markierten Photonen rückwärts laufend (beachte die Umkehrung des Vorzeichens vor dem Richtungsvektor θ im Advektionsterm) zurück in das Medium geschickt und breiten sich dort wieder entsprechend der lokal vorliegenden Streu- und Absorptionswahrscheinlichkeiten aus. Der Unterschied zum direkten Problem ist nun, daß wirklich alles „rückwärts" abläuft (Ausbreitungsrichtung, Streuverteilung), ja sogar die Zeit läuft rückwärts (Umkehrung des Vorzeichens vor der Zeitableitung). Nur Absorptionsvorgänge resultieren auch hier in tatsächlichen Absorptionen. (Dies macht Sinn: Man stelle sich einen beinahe totalen Absorber vor, der praktisch keine Photonen durchläßt. Dann wird auch die Importance der Wege durch diesen Absorber für eine Detektormessung verschwindend gering sein.)

An jedem Ort, den ein solches adjungiertes Photon durchquert, deponiert es ein Quantum dieser Importance. Durchqueren sehr viele Photonen einen Ort, so bekommt dieser also eine sehr hohe Importance. Es bleibt nun noch die Frage zu klären, ob die Herkunft dieser markierten Photonen letztlich aus einer Fehleinschätzung des Absorbers oder einer solchen des Streuers resultiert. Diese Entscheidung wird durch die relativ komplizierte update-Formel getroffen. Der zurückverfolgte adjungierte Fluß wird an jeder Stelle mit dem dort zu dem gegebenen Zeitpunkt vorhandenen direkten Fluß verglichen. Wichtig ist hier in unserem Algorithmus die Richtungsverteilung der entsprechenden Flußdichten. Daraus wird nun eine Wahrscheinlichkeit dafür berechnet, daß dort Streu- bzw. Absorptionsvorgänge der markierten Teilchen stattgefunden haben. Ist beispielsweise die Richtungsverteilung der adjungierten Lösung grundlegend anders als die Richtungsverteilung der direkten Lösung, so deutet dies auf einen Fehler im Streukoeffizienten hin. An dieser Stelle wird sofort deutlich, wieso der hier verwendete Algorithmus bei schwacher Streuung so gut zwischen Streuer und Absorber unterscheiden kann, bei starker Streuung dagegen nur sehr schlecht einen Streuer erkennen kann: Im Falle starker Streuung werden sowohl die direkte Flußdichte als auch die adjungierte Flußdichte praktisch isotrop. Ein Unterschied in der Richtungsverteilung existiert nicht. Im Falle schwacher Streuung dagegen werden Richtungsinformationen sehr weit durch das Medium hindurchgetragen. Bei Verwendung deltaförmiger Quellen sind somit sowohl der direkte Fluß als auch der adjungierte Fluß stark richtungsabhängig.

Abschließend soll noch erwähnt werden, daß mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen die erwähnten Absorptions- bzw. Streuquellen sehr schön sichtbar gemacht werden können. In Abb. MC7 haben wir beispielsweise ein stark streuendes Objekt (ein kleines Quadrat) in ein sonst homogenes Medium gesetzt. Deutlich ist zu erkennen, wie bei Passieren der „Wellenfront“ der Photonen durch dieses Objekt eine Kugelwelle erzeugt wird, die sich kreisförmig zum Rand hin ausbreitet.

6.8 Warum wir σ_a und nicht a rekonstruieren

Wir haben uns in der Herleitung des Rücktransportalgorithmus an der Rekonstruktion der beiden Parameter σ_a und b orientiert. Diese Wahl ist nicht zwingend. Völlig analog können wir einen entsprechenden Algorithmus für die simultane Rekonstruktion der Parameter a und b herleiten, wobei $a = \sigma_a + b$ die Dämpfung innerhalb des Gebietes Ω bezeichnet. Wenn wir dies tun, erhalten wir für den update dieser beiden Koeffizienten mit den gleichen Bezeichnungen wie im Abschnitt 6.6 die Vorschrift

$$\begin{aligned}
a_j(x) &= a_{j-1}(x) - \omega_1 I_1(u_j, z_j; x) \\
&= a_{j-1}(x) - \omega_1 \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} u_j(x,\theta,t) z_j(x,\theta,t)\, d\theta dt, \\
b_j(x) &= b_{j-1}(x) + \omega_2 I_2(u_j, z_j; x) \\
&= b_{j-1}(x) + \\
&\omega_2 \int_{[0,T]} \int_{S^{n-1}} [\int_{S^{n-1}} \eta(\theta \cdot \theta') u_j(x,\theta',t) d\theta']\, z_j(x,\theta,t)\, d\theta dt,
\end{aligned} \tag{8.93}$$

mit geeigneten Parametern ω_1, ω_2. Diese Ausdrücke entsprechen gerade den Ausdrücken (6.91). Wie im Abschnitt 6.6 können wir hier nun argumentieren, daß im Falle einer winkelunabhängigen Dichteverteilung

$$u_j(x,\theta,t) = \tilde{u}_j(x,t)$$

die beiden Größen $I_1(u_j, z_j; x)$ und $I_2(u_j, z_j; x)$, und damit die beiden updates (8.93), ineinander übergehen. Dies hat zur Folge, daß ein Fehler in der Schätzung des physikalisch vorliegenden Absorptionskoeffizienten automatisch zu einem update sowohl in der Dämpfung a als auch in dem Streukoeffizienten b führt. Während das Verschwinden des updates von b, wie es im Abschnitt 6.6 beschrieben wurde, durchaus physikalisch Sinn machte, ist das nun vorliegende Verhalten des Algorithmus physikalisch gesehen nicht mehr einsehbar. Der Grund für diese Diskrepanz zwischen physikalischer Anschauung und dem Verhalten des Algorithmus liegt darin, daß dieser die durch die Versuchsanordnung vorgegebene Interpretation des Residuums gar nicht kennt. Er kann lediglich Quellen bzw. Senken „markierter Teilchen“ (vgl. Abschnitt 6.5) erkennen. Um eine Zuordnung zu einer der in der Gleichung auftretenden Größen durchführen zu können, müssen wir ihm gewissermaßen einen „Hinweis“ auf die möglichen physikalischen Ursachen dieser Teilchen geben. Dieser Hinweis besteht in einer korrekten Verwendung der physikalisch vorgegebenen Größen. Man beachte hierzu, daß wir ebenso gut hätten versuchen können, eine zusätzliche (richtungsabhängige) Quelle $\delta Q(x,\theta)$ aus den Residuen zu rekonstruieren, mit der das beobachtete

Residuum zum Verschwinden gebracht wird. Für diese Aufgabe können wir in völlig analoger Weise einen Rücktransportalgorithmus herleiten, dessen „updates“ (Korrekturen) in dem Raum Y der Quellfunktionen liegen. Dies würde in der hier vorliegenden Problemstellung keinen Sinn machen, da wir ja wissen, daß die virtuellen Teilchen aus Fehlern in dem Streu- oder Absorptionskoeffizienten stammen. In anderen Situationen kann aber gerade diese Interpretation des Residuums als Folge einer nicht genügend bekannten Quellverteilung die physikalisch sinnvolle Aufgabenstellung darstellen (etwa im Rahmen der Emissionstomographie). Bei der Annahme einer exakt bekannten Verteilung des Absorptionskoeffizienten wäre beispielsweise der oben genannte Rekonstruktionsalgorithmus zur simultanen Bestimmung von a und b eine physikalisch sinnvolle Aufgabenstellung. (Sicherlich wäre es in diesem Fall sinnvoller, sich für eine der beiden möglichen update-Formeln (8.93) zu entscheiden, und diesen update dann mit einem einheitlichem Faktor ω in beiden Parametern gleichzeitig durchzuführen. Denn physikalisch gesehen ist in diesem Fall nur *ein* Parameter zu rekonstruieren.)

Aus numerischer Sicht tritt bei der Vermischung der physikalisch vorgegebenen Koeffizienten das Problem auf, daß die Parameter ω_1, ω_2 nicht mehr unterschiedlich gewählt werden können. (Es macht beispielsweise keinen Sinn, eine Korrektur in dem Streukoeffizienten in einer völlig anderen Größenordnung in der Dämpfung durchzuführen, wenn man weiß, daß dieser komplett in der Dämpfung enthalten ist.) Dadurch geht dem Algorithmus ein großes Stück an Flexibilität verloren, welches die ohnehin schwierige Aufgabe der simultanen Bestimmung zweier Parameter zusätzlich erschwert.

Kapitel 7

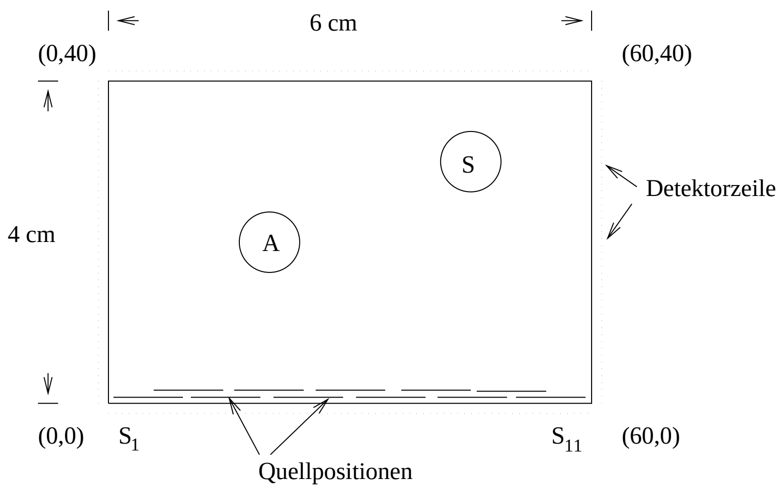
Einige Rekonstruktionen des Rücktransportalgorithmus

Wir wollen nun anhand von sechs ausgewählten Rekonstruktionsaufgaben das grundsätzliche Verhalten des Rücktransportalgorithmus bei schwacher Streuung und bei starker Streuung untersuchen. Insbesondere interessiert uns die Frage, ob und wie gut mit dieser Methode zwei Koeffizienten der Transportgleichung simultan bestimmt werden können.

7.1 Das Grundgebiet und die Diskretisierung

Wir betrachten dazu ein rechteckiges Grundgebiet D der Größe $4.0cm \times 6.0cm$ (vgl. Abb.). Dieses ist in 40×60 Pixel der Größe $1mm \times 1mm$ unterteilt. Die Mittelpunkte der Pixel sind die Knoten der Finite-Differenzen-Diskretisierung. Innerhalb der einzelnen Pixel werden sämtliche Parameter als konstant vorausgesetzt. Für die Richtungsdiskretisierung wählen wir einen Satz von acht in S^1 gleichverteilten Richtungen, wobei vier von ihnen (dies sind zugleich die Einstrahlrichtungen) parallel zu den Seiten des Rechtecks verlaufen. Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir in den Fällen schwacher Streuung ($b \leq 5.0cm^{-1}$) 60 oder 80 Zeitschritte à $0.2s$, in den Fällen starker Streuung aber auch 100 Zeitschritte à $0.2s$. Der Grund hierfür ist die tendenziell mit wachsender Streuung zunehmende Verweildauer der Photonen im Gewebe. Bei diesen Zeitangaben ist zu beachten, daß wir die Geschwindigkeit auf $c = 1.0cms^{-1}$ normiert haben. Dies entspricht einer Transformation in der Zeitvariable. Bei einem Vergleich mit real gemessenen physikalischen Daten ist also zuvor diese Zeittransformation durchzuführen. Wir messen insgesamt eine Zeitspanne von $16.0s$ bzw. $20.0s$ in dieser transformierten Zeit. Dies entspricht in etwa dem in den Monte-Carlo-Simulationen MC9 und MC10 erfaßten Zeitbereich von $20.0s$ bei ebenfalls $c = 1cms^{-1}$. In diesen Simulationen wird die Struktur unserer Daten sehr gut dargestellt. Gemessen werden jeweils die bereits oben diskutierten Funktionen $\tilde{G}(x,t)$ in ihrer diskretisierten Form, und zwar auf dem gesamten Rand ∂D und für jede der Quellen q_j. Uns stehen somit für jede Quellposition Daten z.B. des Formats „200 Randpunkte $\times$ 80 Zeitschritte“ für die Rekonstruktionen zur Verfügung.

Die Quellen q_j sind jeweils deltaförmig in der Zeit und in der Richtung, aber sie erstrecken sich jeweils über zehn Pixel des Randes ∂D. Es wird also an zehn benachbarten Randpunkten gleichzeitig zur Zeit $t = 0$ ein Lichtpuls senkrecht in das Gebiet D hineingegeben und die resultierenden Detektorwerte werden auf dem gesamten Rand gemessen. Die Mittelpunkte dieser Quellen q_j auf dem Rand seien mit s_j bezeichnet. Diese haben einen Abstand von fünf Pixeln oder $5mm$, so daß sich die Quellzeilen gegenseitig jeweils zur Hälfte überlappen.



Ⓐ Absorber Ⓢ Streuer

——— Quellpositionen, eingezeichnet nur an der unteren Berandung.

Die Verwendung ausgedehnter Quellen hat insbesondere im Falle schwacher Streuung den Vorteil, daß jeder Punkt des Gebietes D im Verlaufe eines sweeps in etwa gleich oft von dem singulären Anteil ungestreuter Strahlung erfaßt wird. Dadurch werden unphysikalische Oszillationen in den Rekonstruktionen vermieden. Durch die Überlappung der Quellen tritt der zusätzliche Effekt auf, daß ein durch den Anteil ungestreuter Strahlung hervorgerufener update entlang der Einstrahlgeraden durch den update der nachfolgenden Quelle noch korrigiert bzw. verstärkt werden kann. Für den Fall starker Streuung bietet diese Form der Quellen wohl weder Vor- noch Nachteile. Dennoch wurde sie auch dort beibehalten, um eine einheitliche Versuchsanordnung zu gewährleisten und so die Ergebnisse der einzelnen Rekonstruktionen besser vergleichbar zu machen. Wir hätten im Falle starker Streuung jedoch auch ohne weiteres Quellen verwenden können, die auch deltaförmig in ihrer Ausdehnung auf dem Rande sind. Wir werden in der Diskussion der Ergebnisse darauf noch näher eingehen.

7.2 Die allgemeine Rekonstruktionsaufgabe

Entsprechend der Abbildung geben wir uns in dem Gebiet eine homogene Hintergrundverteilung der Parameter σ_a, b vor, in welcher zwei in etwa kreisförmige Objekte eingebettet sind. Diese beiden Objekte unterscheiden sich in jeweils einem der Parameter von der Hintergrundverteilung. Bei dem weiter links positionierten Objekt (dem „Absorber“ A) ist dies der Absorptionskoeffizient σ_a, bei dem weiter rechts positionierten (dem „Streuer“ S) ist dies der Streukoeffizient b. Als Anfangsnäherung geben wir uns eine auf dem Gebiet homogene Verteilung der Parameter mit den Hintergrundwerten vor. Unser Ziel ist es, von dort ausgehend aus den Daten die tatsächliche Parameterverteilung innerhalb des Gebietes D zu rekonstruieren. Besonderer Wert wird dabei darauf gelegt, die Position, Anzahl, Größe und Höhe der im Inneren eingebetteten Objekte zu bestimmen, da diesen in tatsächlichen medizinischen Anwendungen eine große Bedeutung zukommt. Zudem interessiert uns die Frage, ob und wie gut die beiden Koeffizienten σ_a und b in den Rekonstruktionen voneinander unterschieden werden können. Wünschenswert wäre es dabei, daß ein Objekt, welches sich von der Hintergrundverteilung ausschließlich im Streukoeffizienten unterscheidet, auch in den Rekonstruktionen lediglich im Streukoeffizienten wiederzufinden ist, nicht aber im Absorptionskoeffizienten. Analoges sollte auch für den Absorptionskoeffizienten gelten. Wir werden sehen, daß dies im Falle schwacher Streuung recht gut von dem hier verwendeten Algorithmus bewerkstelligt wird, im Falle starker Streuung jedoch nicht vollständig gelingt. Dennoch werden wir auch im Falle starker Streuung in der Lage sein, ein Objekt mit Streucharakter von einem Objekt mit Absorptionscharakter zu unterscheiden. Wir werden dies in der anschließenden Diskussion dann eingehender erläutern.

7.3 Zwei Rekonstruktionsaufgaben bei Vorliegen schwacher Streuung

Als „schwach streuend“ wollen wir hier (etwas willkürlich) diejenigen Situationen bezeichnen, in denen der Streukoeffizient b im Mittel kleiner oder gleich einer Größe von etwa $5cm^{-1}$ ist. Wir untersuchen zwei Fälle.

Rekonstruktionsaufgabe 1: Die Hintergrundsubstanz habe einen Absorptionskoeffizienten von $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$ und einen Streukoeffizienten von $b = 1.0cm^{-1}$. Es liege durchweg isotrope Streuung vor. Das erste der beiden eingebetteten Objekte (der „Absorber“, vgl. dazu die Abbildung) habe einen Streukoeffizienten identisch mit dem der Hintergrundsubstanz, aber einen Absorptionskoeffizienten von $0.6cm^{-1}$. Das zweite (der „Streuer“) habe einen Absorptionskoeffizienten identisch mit dem der Hintergrundsubstanz, aber einen Streukoeffizienten von $b = 5.0cm^{-1}$. Es werden 60 Zeitschritte in den Detektoren mitverfolgt. Zu rekonstruieren sind aus diesen Daten simultan die Verteilungen des Streu- und des Absorptionskoeffizienten.

Rekonstruktionsaufgabe 2: Hier habe die Hintergrundsubstanz ebenfalls einen Absorptionskoeffizienten von $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$, aber einen Streukoeffizienten von $b = 5.0cm^{-1}$. Es liege nun Henyey-Greenstein-Streuung mit einem mittleren Streukosinus von $g = 0.9$ vor. Der Absorber hat einen Absorptionskoeffizienten von $\sigma_a = 1.0cm^{-1}$, bei einem mit dem Hintergrundwert identischen Streukoeffizienten. Das Streuobjekt hat nun einen Streukoeffizienten von $15.0cm^{-1}$, bei einem mit dem Hintergrundwert identischen Absorptionskoeffizienten. Es werden 80 Zeitschritte von den Detektoren mitverfolgt.

7.4 Vier Rekonstruktionsaufgaben bei Vorliegen starker Streuung

Hier wollen wir vier Situationen untersuchen, in denen innerhalb des Gebietes D ein Streukoeffizient von $b = 10.0cm^{-1}$ oder höher vorliegt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon das Gebiet ungestreut durchquert, ist also nun kleiner als e^{-40}. Es ist anzunehmen, daß in diesem stark streuenden Fall der singuläre Anteil ungestreuter Strahlung keinen wirklich großen Anteil zu den Rekonstruktionen beisteuern wird.

Rekonstruktionsaufgabe 3: Die Hintergrundsubstanz habe einen Streukoeffizienten von $b = 10.0cm^{-1}$ und einen Absorptionskoeffizienten von $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$. Es liege Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$ vor. Der Absorber habe einen Streukoeffizienten identisch mit dem des Hintergrundes und einen Absorptionskoeffizienten von $0.6cm^{-1}$. Der Streuer habe einen Absorptionskoeffizienten identisch mit dem des Hintergrundes und einen Streukoeffizienten von $20.0cm^{-1}$. Es werden 80 Zeitschritte von den Detektoren mitverfolgt.

Rekonstruktionsaufgabe 4: Hier liege die Situation der Rekonstruktionsaufgabe 3 vor, mit dem einzigen Unterschied, daß wir nun Henyey-Greenstein-Streuung mit einem mittleren Streukosinus von $g = 0.6$ zugrundelegen.

Rekonstruktionsaufgabe 5: Auch hier liege die Situation der Rekonstruktionsaufgabe 3 vor, jedoch sei nun isotrope Streuung vorhanden und es werden 100 Zeitschritte von den einzelnen Detektoren mitverfolgt. Diese Situation entspricht im wesentlichen derjenigen, die in der optischen Tomographie vorzufinden ist, wenn die Diffusionsnäherung angewendet wird. Die dazugehörige ungenäherte Version werden wir in der folgenden Rekonstruktionsaufgabe untersuchen.

Rekonstruktionsaufgabe 6: Hier wollen wir die Situation untersuchen, die in der optischen Tomographie vorzufinden ist. Die Hintergrundsubstanz hat hier einen recht hohen Streukoeffizienten von $b = 100cm^{-1}$ und einen Absorptionskoeffizienten von $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$. In dem streuenden Objekt seien $b = 200cm^{-1}$ und $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$ vorausgesetzt, in dem absorbierenden Objekt dagegen $\sigma_a = 0.6cm^{-1}$ und $b = 100cm^{-1}$. Als Streugesetz werde Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$ angenommen. Es werden in den Detektoren 100 Zeitschritte mitverfolgt.

7.5 Das Ausbreitungsverhalten in den einzelnen Rekonstruktionsaufgaben

Die *Rekonstruktionsaufgabe 1* simuliert im wesentlichen eine Computertomographie mit vier Einstrahlrichtungen und mit Berücksichtigung von Streustrahlung. Der größte Anteil der Strahlung breitet sich ungestreut entlang der Einstrahlgeraden aus. Einen Eindruck des Ausbreitungsverhaltens gibt die Abbildung MC2 des fünften Kapitels.

In der *Rekonstruktionsaufgabe 2* ist ebenfalls der singuläre Anteil der ungestreuten Strahlung dominant, es ist aber zudem schon eine ausgeprägte Wellenfront erkennbar. Vgl. etwa die Abbildung MC3 des fünften Kapitels.

In der *Rekonstruktionsaufgabe 3* tritt trotz des schon recht hohen Streukoeffizienten von $10cm^{-1}$ aufgrund der starken Vorwärtsstreuung ($g = 0.9$) eine ausgeprägte Wellenfront auf. Vgl. ebenfalls die Abbildung MC3. Es ist also zu erwarten, daß auch hier in den Rekonstruktionen der Streuer und der Absorber noch recht gut getrennt werden können.

In der *Rekonstruktionsaufgabe 4* wurde der mittlere Streukosinus auf $g = 0.6$ reduziert, so daß die einzelnen Streuvorgänge einen weniger ausgeprägt vorwärtsstreuenden Charakter haben. Dadurch ändert sich das Erscheinungsbild des Vorwärtsproblems grundlegend: Die Ausbreitung ist nun eher diffusionsförmig, ein ungestreut oder wellenartig fortschreitender Anteil ist nicht mehr zu erkennen. Vgl. hierzu etwa die Abbildungen MC4, MC5. Mit wachsender Tiefe wird der Fluß hier zunehmend richtungsunabhängig, so daß eine Trennung von Streuer und Absorber zunehmend schwieriger wird.

In der *Rekonstruktionsaufgabe 5* wurde nun vollständig isotrope Streuung angenommen. Bei einem Streukoeffizienten von $b = 10cm^{-1}$ bedeutet dies, daß der Fluß schon in geringer Tiefe annähernd isotrop ist. Richtungsinformation geht bei jedem Streuvorgang komplett verloren, d.h. ein Teilchen hat nach einem Stoßvorgang keinerlei Information mehr darüber, in welche Richtung es sich vor dem Stoß fortbewegt hatte. Eine Trennung von Streuer und Absorber erscheint deshalb ausgesprochen schwierig. Das diffusionsförmige Verhalten der Ausbreitung wird in der Abbildung MC4 sehr gut dargestellt.

Ein zur Rekonstruktionsaufgabe 5 völlig analoges Verhalten der Strahlung tritt in der *Rekonstruktionsaufgabe 6* auf, in welcher die Verhältnisse der optischen Tomographie nachgebildet sind. Zwar sind die einzelnen Streuvorgänge ausgesprochen vorwärtsgerichtet, aufgrund der hohen Anzahl von Stößen verliert ein Teilchen dennoch innerhalb einer vergleichsweise kurzen Distanz komplett seine ursprüngliche Orientierung. Auch hier ist die Ausbreitung der Strahlung ausgeprägt diffusionsförmig, vgl. wieder Abbildung MC4.

7.6 Wahl der Parameter

Rekonstruktionsaufgabe 1: Hier haben wir mit den Parametern $\omega(\sigma_a) = 0.1$, $\omega(b) = 0.5$ hundert sweeps durchgeführt. Es wurde nur ein sehr kleines Quellfenster der Größe $2 * 5$ Pixel ($10mm$) verwendet. Es wurde keine Zeitgewichtung vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 2: Es wurden insgesamt 70 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.1$, $\omega(b) = 0.5$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 5$ Pixel ($10mm$) durchgeführt. Es wurde keine Zeitgewichtung vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 3: Es wurden 23 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.2$, $\omega(b) = 50.0$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 5$ Pixel ($10mm$) durchgeführt. Es wurde keine Zeitgewichtung vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 4, erster Versuch: Es wurden 15 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 2.0$, $\omega(b) = 100.0$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 15$ Pixel ($30mm$) durchgeführt. Es wurde keine Zeitgewichtung vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 4, zweiter Versuch: Es wurden 35 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.001$, $\omega(b) = 1.0$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 15$ Pixel ($30mm$) durchgeführt. Es wurde eine Zeitgewichtung mit $t(t+1)$ vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 5: Es wurden zunächst 35 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.02$, $\omega(b) = 80.0$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 40$ Pixel ($80mm$) durchgeführt. Sodann wurden weitere 15 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.0002$, $\omega(b) = 0.8$ und einem Quellfenster der Größe $2 * 15$ Pixel ($30mm$) durchgeführt. Schließlich wurden noch 65 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.0001$, $\omega(b) = 0.4$ und einem Quellfenster der Größe $2*8$ Pixel ($16mm$) durchgeführt. Es wurde generell eine Zeitgewichtung mit $t(t+1)$ vorgenommen.

Rekonstruktionsaufgabe 6: Zunächst wurden 40 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.02$, $\omega(b) = 1000$ und einem Quellfenster der Größe $2*40$ Pixel ($80mm$) durchgeführt. Schließlich wurden noch 100 sweeps mit $\omega(\sigma_a) = 0.0002$, $\omega(b) = 50.0$ und einem Quellfenster der Größe $2*15$ Pixel ($30mm$) durchgeführt. Es wurde generell eine Zeitgewichtung mit $t(t+1)$ vorgenommen.

Grundsätzlich wurde bei allen Rekonstruktionen für den update in einem Punkt $x \in \Omega$ eine vorgegebene obere Schranke von etwa 5% des jeweiligen Hintergrundwertes angesetzt. Bei Überschreiten dieses Wertes wurde dieser Maximalwert als update verwendet.

7.7 Abbildungen

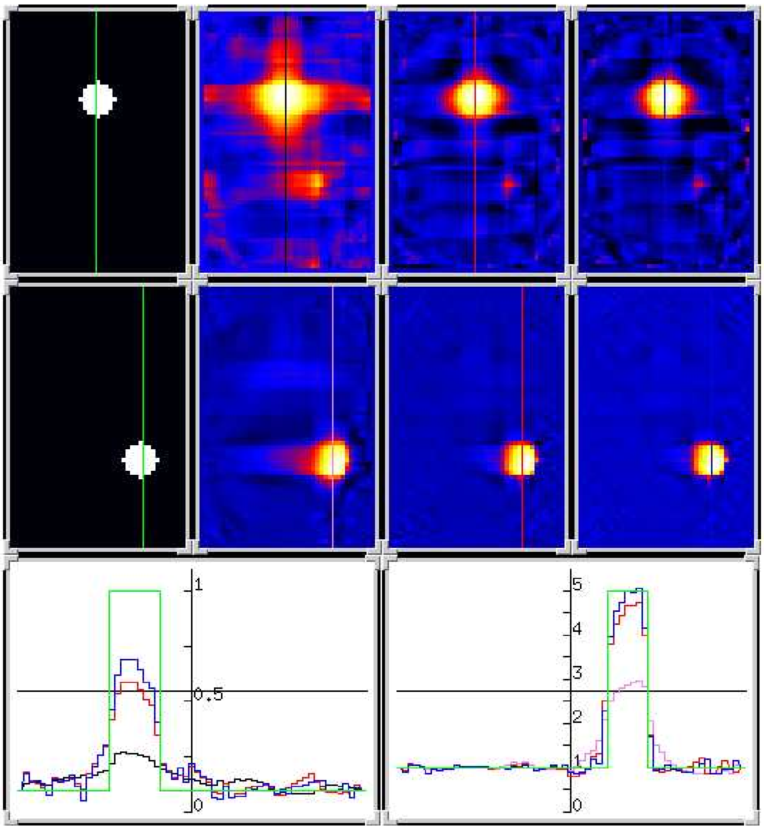


Bild RT1: Isotrope Streuung

Hintergrund:	$b = 1.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Absorber:	$b = 1.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 1.0cm^{-1}$
Streuer:	$b = 5.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Von links nach rechts:
Original, nach 5 sweeps, nach 50 sweeps, nach 100 sweeps.

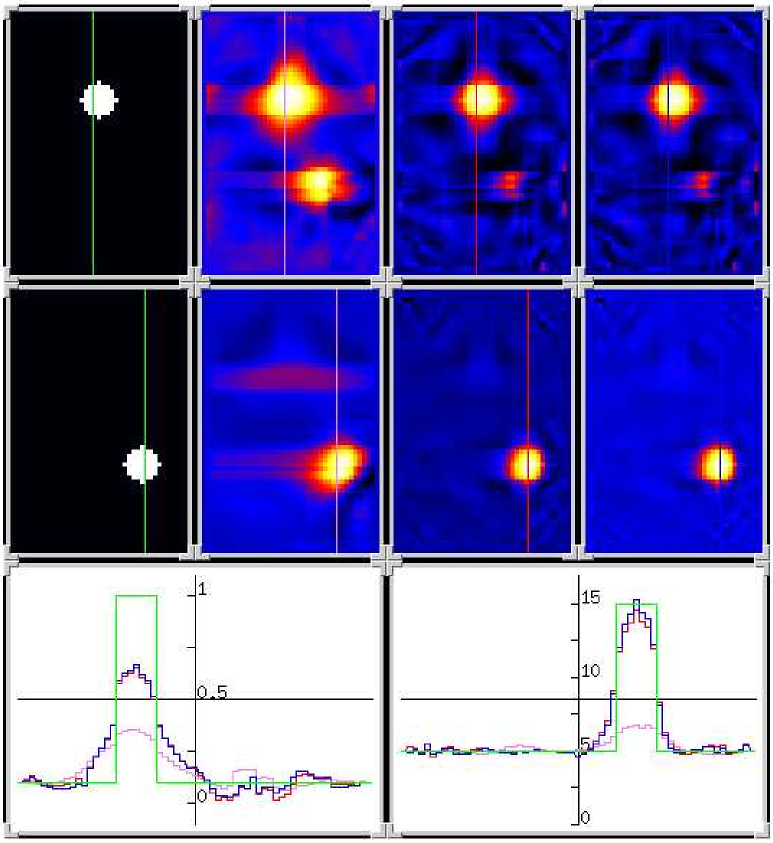


Bild RT2: Henyey-Greenstein-Streuung, $g = 0.9$
Hintergrund: $b = 5.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Absorber: $b = 5.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 1.0cm^{-1}$
Streuer: $b = 15.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Von links nach rechts:
Original, nach 5 sweeps, nach 50 sweeps, nach 70 sweeps.

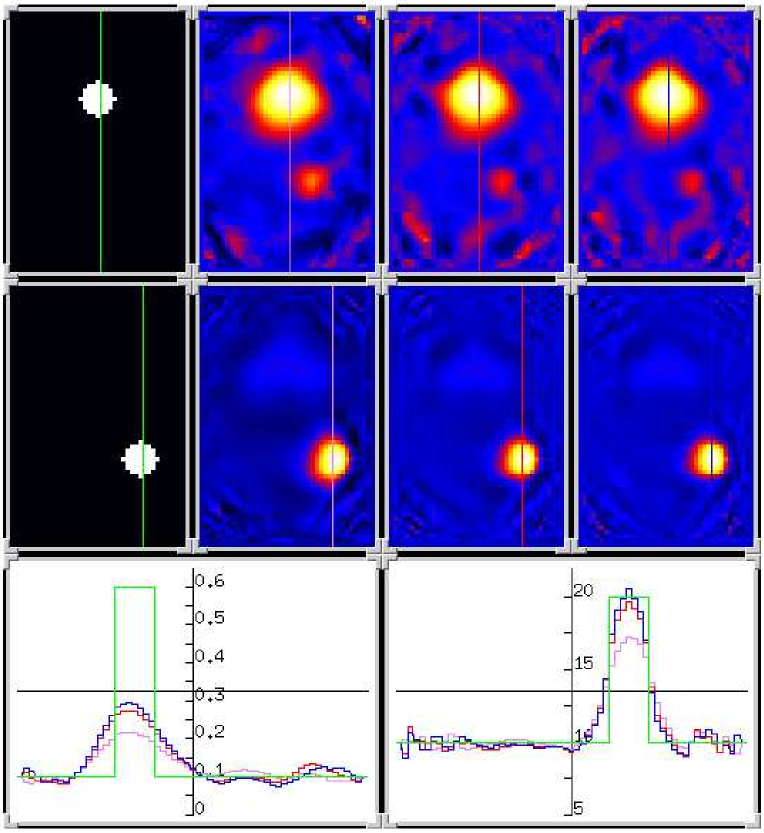


Bild RT3: Henyey-Greenstein-Streuung, $g = 0.9$
Hintergrund: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Absorber: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.6cm^{-1}$
Streuer: $b = 20.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Von links nach rechts:
Original, nach 5 sweeps, nach 15 sweeps, nach 23 sweeps.

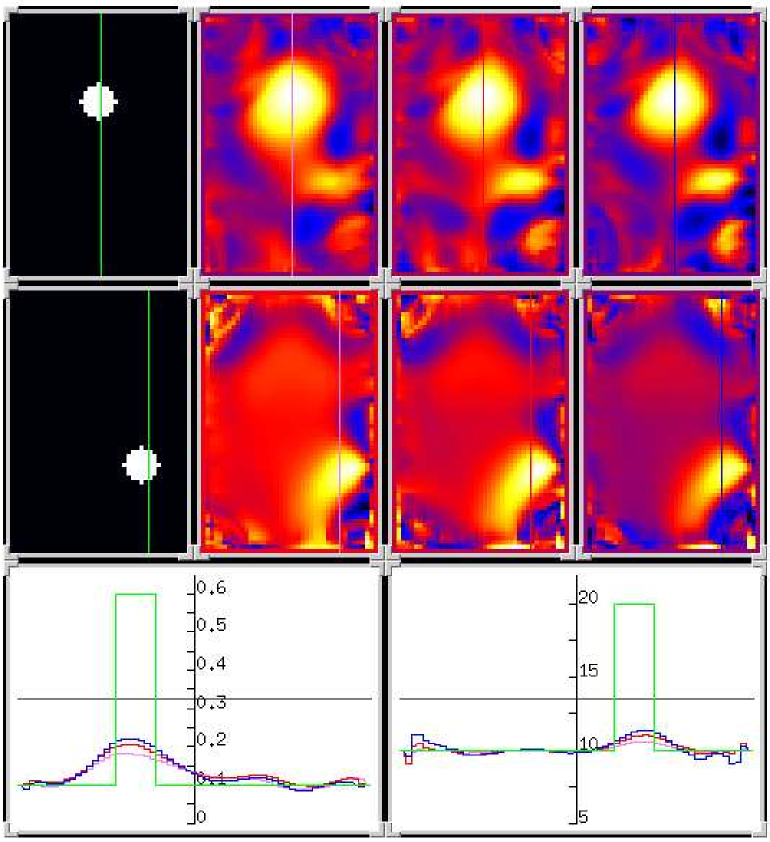


Bild RT4a: Henyey-Greenstein-Streuung, $g = 0.6$
Hintergrund: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Absorber: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.6cm^{-1}$
Streuer: $b = 20.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Von links nach rechts:
Original, nach 5 sweeps, nach 10 sweeps, nach 15 sweeps.

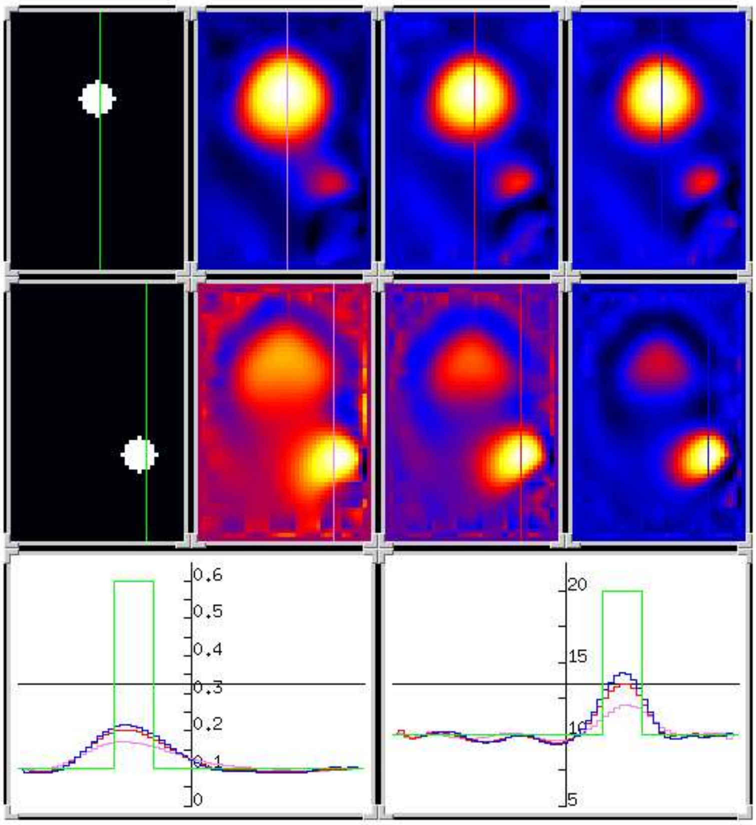


Bild RT4b: Henyey-Greenstein-Streuung, $g = 0.6$

Hintergrund:	$b = 10.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 0.1cm^{-1}$
Absorber:	$b = 10.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 0.6cm^{-1}$
Streuer:	$b = 20.0cm^{-1}$,	$\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Von links nach rechts:

Original, nach 5 sweeps, nach 20 sweeps, nach 35 sweeps.

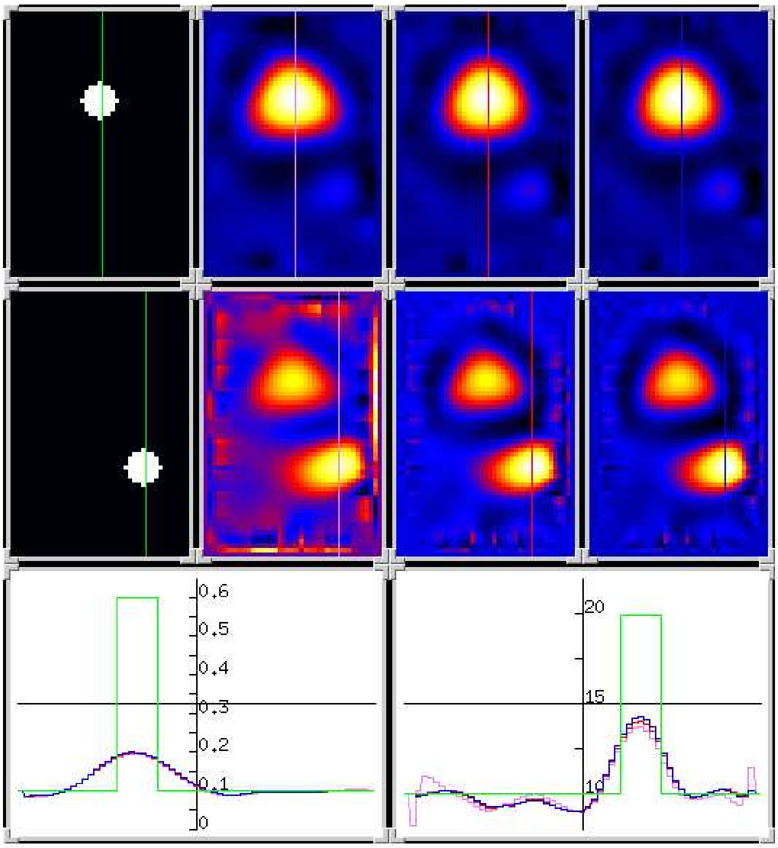


Bild RT5: isotrope Streuung

Hintergrund: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Absorber: $b = 10.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.6cm^{-1}$

Streuer: $b = 20.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Von links nach rechts:

Original, nach 35 sweeps, nach 50 sweeps, nach 115 sweeps.

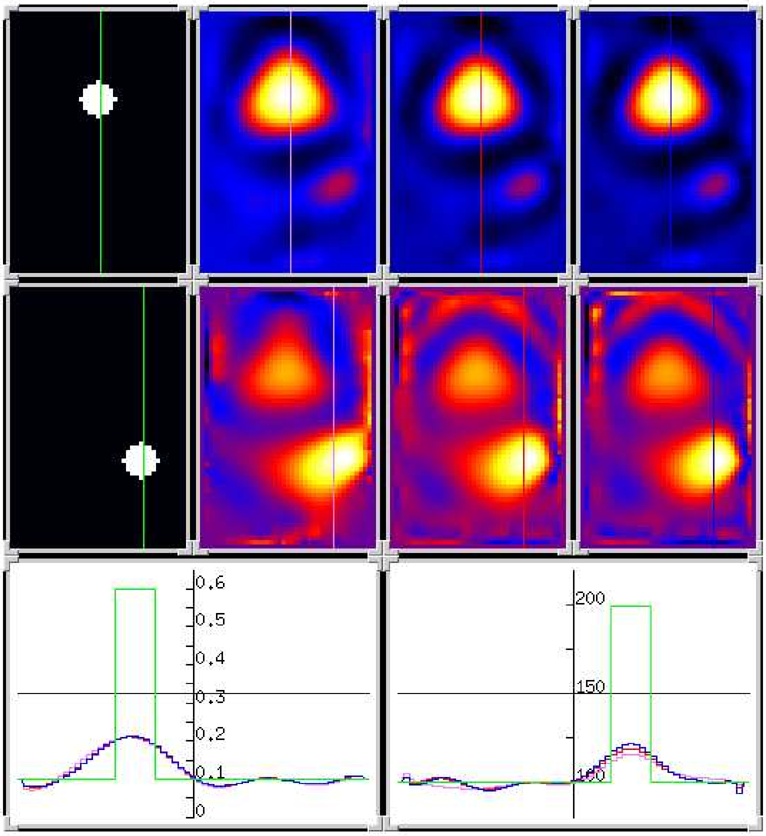


Bild RT6: Henyey-Greenstein-Streuung, $g = 0.9$

Hintergrund: $b = 100.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Absorber: $b = 100.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.6cm^{-1}$

Streuer: $b = 200.0cm^{-1}$, $\sigma_a = 0.1cm^{-1}$

Von links nach rechts:

Original, nach 40 sweeps, nach 90 sweeps, nach 140 sweeps.

7.8 Diskussion der Ergebnisse

Wir wollen nun die in den Abbildungen RT1-RT6 dargestellten Rekonstruktionen zu den entsprechenden Rekonstruktionsaufgaben 1-6 eingehender diskutieren. Die Abbildung RT1 korrespondiert dabei mit der Rekonstruktionsaufgabe 1, und analoge Zuordnungen gelten für alle anderen Abbildungen.

Abbildung RT1: Wie bereits erwähnt wurde, entspricht dieser Fall in etwa einer Computertomographie mit vier Einstrahlrichtungen unter Berücksichtigung der Streustrahlung mittels einer Diskretisierung durch acht Richtungen.
Der Fluß innerhalb des Gebietes ist aufgrund der Singularität in der Quelle und aufgrund der geringen Streuung stark anisotrop. Dies begünstigt die simultane Bestimmung von Absorptions- und Streukoeffizienten. Die beiden eingebetteten Objekte werden sehr gut von dem Rücktransportalgorithmus erkannt, wobei der Streuer praktisch in voller Höhe rekonstruiert wird, der Absorber in einer Höhe von etwa 70% des tatsächlichen Kontrastes. Ein Quellfenster wäre in diesem Fall eigentlich nicht notwendig gewesen, da nur sehr wenige Photonen zurückgestreut werden.
Der singuläre Anteil der ungestreuten Strahlung ist ohne Zweifel dominant bei der Berechnung der einzelnen updates, so daß eine Beschränkung der Höhe der updates und die Wahl von etwas angehobenen Parametern $\omega(\sigma_a)$, $\omega(b)$ sinnvoll erscheinen. Dadurch bekommt auch der Anteil der einfach (und mehrfach) gestreuten Strahlung ein merkliches Gewicht in den updates. In den frühen sweeps ist noch sehr deutlich die Bevorzugung der Einstrahlrichtungen in den updates und somit in den Rekonstruktionen erkennbar. Diese vorwiegend streifenförmigen updates, die im Falle komplett deltaförmiger Quellen zu vorwiegend linienförmigen updates entarten, entsprechen im wesentlichen den Rückprojektionen der Computertomographie. Bei dem Rücktransportalgorithmus gesellt sich jedoch noch ein aus der Streustrahlung resultierender räumlich verteilter Anteil in den einzelnen updates hinzu. Dieser zusätzliche Anteil bewirkt hier schließlich, daß die streifenförmigen Artefakte der Rekonstruktionen aus nur vier Einstrahlrichtungen im Verlaufe der nachfolgenden sweeps wieder abgebaut werden.

Abbildung RT2: Da auch in der Rekonstruktionsaufgabe 2 der singuläre Anteil der ungestreuten Strahlung ein recht hohes Gewicht hat, trifft das zur Abbildung RT1 Gesagte gleichsam auch hier zu. Die Rekonstruktionen sehen demzufolge ähnlich aus wie im vorhergenannten Fall. In den frühen sweeps wird zunächst noch ein Phantom im Absorptionskoeffizienten an der Stelle aufgebaut, an welcher sich der Streuer befindet. Dieses wird aber mit zunehmender Übereinstimmung dieses Streuobjekts mit dem Original in den Rekonstruktionen wieder abgebaut. Hieraus ist erkennbar, daß der Rücktransportalgorithmus bei wachsender Streuung in einem einzelnen update nicht eindeutig zwischen einem Streuer und einem Absorber unterscheidet, sondern daß sich vielmehr einer von beiden im Laufe der sweeps „gegen den anderen durchsetzt". Dies gelingt im vorliegenden Fall schwacher Streuung noch recht gut, wird aber mit wachsendem Hintergrundwert des Streuparameters zunehmend schwieriger. Insbesondere in den Rekonstruktionen RT6 und RT7 werden wir sehen, daß diese anfänglich aufgebauten Phantome nicht mehr vollständig in den nachfolgenden sweeps wieder abgebaut werden.

Abbildung RT3: In der Rekonstruktionsaufgabe 3 ist bei einem Hintergrundwert des Streuparameters von $b = 10.0cm^{-1}$ der singuläre Anteil ungestreuter Strahlung nicht mehr dominant, er macht vielmehr dem Anteil wenig gestreuter Strahlen Platz. Aufgrund der starken Vorwärtsstreuung bildet sich im Vorwärtsproblem eine ausgeprägte Wellenfront aus, die sich durch das Medium fortpflanzt. Wir sehen an der Abbildung RT3, daß auch in diesem Fall vom Rücktransportalgorithmus Streuer und Absorber rekonstruiert und getrennt werden können. Allerdings ist die Gestalt des Absorbers nicht mehr genau erkennbar, sie verschmiert vielmehr zu einem etwas flacheren, ausgedehnteren Objekt im Vergleich zu dem Original. Bei dem etwas näher am Rande positionierten Streuer kann die ursprüngliche Form des Objekts noch einigermaßen rekonstruiert werden. Wir verwenden bei diesen Rekonstruktionen wie schon zuvor ein nur sehr kleines Quellfenster, da aufgrund der starken Vorwärtsstreuung der Anteil der in der Umgebung der Quelle austretenden Strahlung noch relativ gering ist. Vermutlich wäre auch hier überhaupt kein Quellfenster notwendig.

Abbildungen RT4a, RT4b: Die Abbildung RT4a zeigt das typische Verhalten des Rückransportalgorithmus im Falle einer ausgeprägt diffusionsförmigen Ausbreitungscharakteristik des Vorwärtsproblems. Aufgrund des nun recht hohen Anteils „zurückgestreuter" Strahlung vergrößern wir das Quellfenster auf eine Breite von $30mm$. Schon in geringer Tiefe ist der Fluß stark isotrop und die Rekonstruktion eines Streuers im Inneren des Gebietes wirft somit große Probleme auf. Um einen merklichen update im Streukoeffizienten zu erreichen, müssen sehr hohe Parameter $\omega(b)$ verwendet werden, wodurch zugleich aber auch Artefakte in den äußeren Bereichen des Gebietes hervorgerufen und verstärkt werden. Auch im Absorptionskoeffizienten verwenden wir einen recht großen Parameter $\omega(\sigma_a)$, was sich auch dort in Artefakten in den äußeren Bereichen des Gebietes wiederspiegelt. In den inneren Bereichen findet praktisch kein update im Streukoeffizienten statt.

In der Abbildung RT4b multiplizieren wir nun bei der gleichen Situation wie der soeben beschriebenen vor dem eigentlichen Rücktransport die Residuenwerte $R_j(x,t)$ mit einem Faktor $t(t+1)$. Entsprechend passen wir die Parameter $\omega(\sigma_a)$ und $\omega(b)$ an. Die Rekonstruktionen sind nun weitaus besser als die vorangegangenen, und die Artefakte treten praktisch nicht mehr auf. Der Grund für diese Verbesserung liegt möglicherweise darin, daß nun spätere Zeitpunkte in der Detektion stärker gewichtet werden und somit auch die Informationen über die eigentlich gesuchten Objekte ein größeres Gewicht bekommen.

Vermutlich wird durch eine solche Zeitgewichtung zusammen mit der Wahl eines passenden Quellfensters eine etwas bessere Approximation an die Lösung der bei der Herleitung des Algorithmus auftretenden Gleichung

$$C_j \begin{pmatrix} \sigma_a \\ b \end{pmatrix} \lambda = g_j$$

geliefert, als dies ohne die Verwendung dieser Kunstgriffe der Fall wäre. Wir werden in den nachfolgenden Rekonstruktionen diese Werkzeuge (insbesondere das des Quellfensters) aber auch noch gezielter zur Verbesserung der Rekonstruktionen einsetzen. Die Wirkung des Quellfensters liegt in der vorliegenden Rekonstruktion lediglich darin, daß der stark zur Quellposition hin konzentrierte adjungierte Fluß nach oben beschränkt wird. (Beachte, daß der Rücktransportalgorithmus L^∞-Funktionen für den Rücktransport benötigt!) Da wir in diesem Anteil ohnehin nur sehr wenig verwertbare Information über die von uns gesuchten Objekte vermuten, ignorieren wir diese Randpunkte einfach.

Die typische Form eines updates hat sich ebenfalls gegenüber dem Fall sehr schwacher Streuung geändert. Diese hat nun die Form einer flächig verteilten Wolke, die sich tendenziell von der Quelle über das gesuchte Objekt zu einem weiteren Punkt des Randes erstreckt. Es treten auch zwei oder mehrere solcher Wolken mit gegebenenfalls wechselnden Vorzeichen auf, je nach Verteilung der Quellen, Objekte und der Gestalt der bislang gewonnenen Rekonstruktion.

Abbildung RT5: Die Abbildung RT5 zeigt nun Rekonstruktionen bei Parameterwerten, wie sie bei der Verwendung der Diffusionsapproximation in der optischen Tomographie auftreten, vgl. z.B. [42]-[45]. Die physikalisch gegebene Situation $b = 100cm^{-1}$ bei Henyey-Greenstein-Streuung mit $g = 0.9$ wird dort in etwa durch die Konstellation $b = 10cm^{-1}$ bei isotroper Streuung approximiert. In dieser Situation treten in noch höherem Maße die Schwierigkeiten auf, die in der vorangegangenen Rekonstruktionsaufgabe 4 angesprochen wurden. Deshalb haben wir hier etwas raffiniertere Methoden bei der Rekonstruktion verwendet. Neben der schon zuvor erfolgreich erprobten Methode der Zeitgewichtung der Residuen ist dies insbesondere eine geschickte Verwendung von Quellfenstern unterschiedlicher Größe.

Zunächst versuchen wir mit einem sehr großen Quellfenster der Breite $80mm$ (dies ist beinahe die Hälfte des Gesamtumfangs des Gebietes), die inneren Bereiche des Gebietes zu rekonstruieren. Die wolkenförmigen updates erstrecken sich dabei von der Quellposition zu den weit entfernten Randbereichen, in denen das gewichtete Residuum seinen größten Wert hat. Die randnahen Bereiche werden dadurch natürlich nur sehr ungenügend berücksichtigt. Dort bauen sich vielmehr kleine Artefakte auf, die durch die auf das Innere gerichteten updates zunächst nicht kompensiert werden können. Die gesuchten Objekte werden gut lokalisiert, wenngleich in den Abbildungen sichtbar wird, daß Streuer und Absorber nicht mehr vollständig getrennt werden können. Um die Artefakte in den Randbereichen wieder abzubauen, verkleinern wir anschließend die Größe des Quellfensters drastisch auf $30mm$. Die wolkenförmigen updates erstrecken sich nun vorwiegend von der Quelle zu den Rändern des Quellfensters. Man sieht, daß tatsächlich die Artefakte am Rande wieder abgebaut werden, und daß zudem der relativ randnahe Streuer noch etwas besser rekonstruiert wird. Bei dem tief im Inneren gelegenen Absorber ändert sich praktisch nichts mehr, da die updates nicht so tief in das Gebiet eindringen.

Schließlich werden noch einige sweeps bei weiter verkleinertem Quellfenster mit einer Breite von $16mm$ durchgeführt. Dadurch werden die randnahen Bereiche in der Rekonstruktion noch einmal verbessert.

Wir können in diesen Rekonstruktionen also feststellen, daß durch die Wahl eines passenden Quellfensters die Sensitivität der updates auf Objekte unterschiedlicher Tiefe bis zu einem gewissen Grade gesteuert werden kann. Hierdurch wird es möglich, gleichsam nach Art eines „layer-stripping"-Verfahrens sukzessive verschiedene Schichten des zu untersuchenden Gebietes zu rekonstruieren. Dieses Vorgehen kann selbstverständlich auch in einer anderen als der hier verwendeten Reihenfolge angewandt werden, z.B. von außen nach innen fortschreitend oder auch in noch komplizierteren Variationen.

Abbildung RT6: In der Rekonstruktonsaufgabe 6 liegen nun die Verhältnisse der optischen Tomographie vor: Der Streuparameter ist extrem hoch ($b = 100cm^{-1}$), die Streuung ist aber stark vorwärtsgerichtet (Henyey-Greenstein mit $g = 0.9$). Im Grunde überträgt sich alles, was zu der Rekonstruktionsaufgabe 5 gesagt wurde, auf diesen vorliegenden Fall. Wie die Abbildungen zeigen, können durchaus noch Streuer und Absorber voneinander getrennt werden, es bleiben aber Phantome dieser Objekte in dem jeweils anderen Koeffizienten sichtbar. Auch hier rekonstruieren wir zunächst mit Hilfe eines sehr großen Quellfensters der Breite $80mm$ die inneren Bereiche des Gebietes, um sodann bei einem stark verkleinerten Quellfenster von $30mm$ die randnahen Bereiche zu untersuchen. Wenngleich die so gewonnenen Rekonstruktionen sehr vielversprechend sind, muß auch erwähnt werden, daß die zugehörigen Vorwärts- und Rückwärtsrechnungen mit wachsendem Streukoeffizienten zunehmend zeitaufwendiger werden. Es bedarf also schon recht leistungsfähiger Rechenmaschinen, um die Rekonstruktionen in einer akzeptablen Zeit durchführen zu können.

7.9 Das grundsätzliche Verhalten des Rücktransportalgorithmus

Wir wollen im folgenden noch einmal das grundsätzliche Verhalten des Rücktransportalgorithmus zusammenfassen. Insbesondere werden wir dabei das Verhalten bei dem Übergang von schwacher zu starker Streuung erläutern.

Wir betrachten zunächst (idealisiert) den Fall, daß überhaupt keine streuende Substanz in dem Medium vorhanden ist. Lediglich in einem Punkt des Gebietes befinde sich ein Hindernis, welches sowohl ein Streuer als auch ein Absorber sein kann. Hier wie auch im folgenden nehmen wir an, daß es genau eine deltaförmige Quelle an der Stelle $s_j \in \partial\Omega$ gibt.

Im diesem Falle fehlender Streuung liegen im Prinzip die Verhältnisse der Computertomographie vor. Ein *absorbierendes* Hindernis wird von einem Detektor „gesehen", wenn es genau auf der Verbindungsstrecke zwischen der Quelle und diesem Detektor liegt. Der update, den der Rücktransportalgorithmus erzeugt, beschränkt sich ebenfalls auf diese Verbindungsstrecke. Dieser update ist entlang der Geraden jedoch nicht gleichverteilt. Ähnliche Verhältnisse gelten für den Fall eines punktförmigen *Streuers*, wobei dort aufgrund der in dem Objekt vorhandenen Streuung ein Residuum in sämtlichen Detektorpositionen hervorgerufen wird. Da die Lösung des Vorwärtsproblems auf einer Geraden konzentriert ist, kann jedoch auch nur dort ein update erfolgen.

Nehmen wir nun an, daß in dem gesamten Gebiet ein schwacher Streukoeffizient vorhanden ist. Neben dem nach wie vor dominanten Anteil ungestreuter Strahlung tritt nun die (einfach und) mehrfach gestreute Strahlung in Erscheinung. Da diese beiden Terme von unterschiedlicher Größenordnung sind, bietet es sich an, diese in konkreten Anwendungen getrennt zu behandeln. In den von uns durchgeführten Rekonstruktionen haben wir diesem Umstand dadurch Rechnung getragen, daß wir etwas ausgedehntere Quellen verwendet haben. Zudem konnten wir durch die Wahl geeigneter Skalierungsparameter $\omega(\sigma_a), \omega(b)$ und einer passenden oberen Schranke M für den einzelnen update das Verhältnis dieser beiden Anteile in gewissem Maße regulieren.

Bei zunehmendem Streukoeffizienten innerhalb des Mediums verringert sich mehr und mehr die relative Bedeutung des Anteils ungestreuter Strahlung und es wächst der Anteil der mehrfach gestreuten Strahlung. Da sich nun die Pfade der Information über das gesuchte Objekt nicht mehr vorwiegend auf Geraden konzentrieren, sondern mit wachsender Wahrscheinlichkeit die umliegenden Bereiche des Gebietes durchqueren, wird sich auch der von uns berechnete update mehr und mehr über größere Bereiche des Gebietes verteilen. Entsprechend der durch die update-Formel berechneten Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein am Ort x positioniertes Objekt das beobachtete Residuum in dem Detektor D erzeugt hat, wird dort auch der update vorgenommen. Es resultieren die für die optische Tomographie typischen wolkenförmigen updates (vergleichbar etwa mit den „banana shapes“ oder „photon measurement density functions“ in [18], oder den „Photon hitting densities“ in [169]). Diese erstrecken sich tendenziell von der Quelle über das Objekt in Richtung des Detektors und liefern somit zumindest eine verschwommene Information über die genaue Position des gesuchten Hindernisses.

Es ist eigentlich nicht zu erwarten, daß aufgrund dieser wolkenförmigen updates im Falle starker Streuung ein scharf begrenztes Objekt rekonstruiert wird. Die beiden Beispiele im letzten Abschnitt bestätigen dies. Offen ist bislang die Frage, ob dies prinzipiell unmöglich ist, oder ob dies lediglich in der zur Verfügung stehenden Zeit nicht zu schaffen ist. (Vergleiche den entsprechenden Existenz- und Eindeutigkeitssatz des Inversen Transportproblems im zweiten Kapitel.) Ein kleiner Vorteil dieser flächenhaften

Form des updates ist allerdings, daß an die räumliche Verteilung der Quell- und Detektorpositionen keine allzu rigiden Forderungen gestellt zu werden brauchen. Zwanzig bis dreißig über die Oberfläche einigermaßen gleichmäßig verteilte Quellpositionen haben in den von uns gerechneten Beispielen in der Regel schon recht befriedigende Ergebnisse geliefert. Ebenfalls ungeklärt ist bislang die Frage, wieviele Quellen und Detektoren (und in welcher Verteilung) zu einer optimalen Rekonstruktion der im Gebiet verborgenen Objekte benötigt werden.

Abschließend wollen wir auf die Unterscheidbarkeit von Streuer und Absorber im stark streuenden Fall eingehen. Wir haben bei der physikalischen Deutung des Rücktransportalgorithmus bereits erwähnt, daß bei dessen Anwendung im Falle starker Streuung nur sehr schlecht ein streuendes Objekt als solches ausgemacht werden kann. Die dazu notwendige Richtungsinformation, soweit sie in dem praktisch isotropen Fluß überhaupt vorhanden ist, geht bei der Durchquerung der angrenzenden Gebiete schnell wieder verloren. Wir haben diese Schwierigkeit in unseren Rekonstuktionen ein wenig dadurch lindern können, daß wir die Residuenwerte mit der Zeit gewichtet haben. Dennoch erscheint in unseren Rekonstruktionen nach wie vor etwa ein Streuer auch als Phantom in dem Absorptionskoeffizienten. Das Auftreten eines Streuers als physikalischer Absorber ist in gewissem Sinne plausibel: Da Photonen, die in einen solchen Streuer eindringen, dort eine Zeitlang gefangen gehalten werden („umherirren“), erreichen sie in der Regel erst mit einer gewissen Verspätung die einzelnen Detektoren. Da wir aber zumeist nur eine sehr begrenzte Zeitdauer messen, gehen somit einige dieser Photonen für die Detektion verloren. Der Algorithmus interpretiert diesen Verlust als Absorption.

Eine weitere Ursache für das Auftreten eines Streuers als Absorber in den von uns gerechneten Beispielen stellt der global tatsächlich vorhandene Absorber dar. Durch die längere Verweilzeit der Photonen in den streuenden Objekten steigt schlicht und einfach deren Gesamtweglänge und damit die Wahrscheinlichkeit, tatsächlich absorbiert zu werden. Im Falle starker Streuung können diese in den frühen sweeps aufgebauten Phantome nur sehr schlecht von den späteren sweeps wieder abgebaut werden.

Literaturverzeichnis

[1] Adams, R.A.: *Sobolev Spaces*, Academic Press, New York, (1975).

[2] Ahnesjö, A.: Analytic modelling of photon scatter from flattening filters in photon beams, *Med. Phys.* **21** (8), (1994), S. 1227-1235.

[3] Alper, J.: Biomedicine in the Age of Imaging, *Science* **261**, Juli 1993, S.554ff.

[4] Anikonov, D.S.: Uniqueness of Simultaneous Determination of Two Coefficients of the Transport Equation, *Soviet Math. Dokl.* **30** (1), (1984), S.149-151.

[5] Anikonov, D.S.: Uniqueness of Determination of a Coefficient of the Transport Equation for a special Type of Source, *Soviet Math. Dokl.* **32** (2), (1985), S.511-515.

[6] Anikonov, D.S. - Prokhorov, I.V. - Kovtanyuk, A.E.: Investigation of scattering and absorbing media by the methods of X-ray tomography, *J. Inv. Ill-posed Problems* **1** (4), (1993), S.259-281.

[7] Anikonov, D.S.: *A few formulas for X-tomography*, Report, Japan-Novosibirsk joint seminar, Kyoto University, (1994).

[8] Anikonov, D.S.: Forward and Inverse Problems of the Transport Theory, Report für die *Pacific Mathematical Modelling Conference (PMMC-95), Vladivostok*, (1995).

[9] Anikonov, Yu.E.: Some results of the theory of inverse problems for kinetic equations, *J. Inv. Ill-Posed Problems* **1** (1), (1993), S.1-16.

[10] Antyufeev, V. - Bondarenko, A.: X-ray tomography in scattering media, *SIAM J. Appl. Math.* **64**, (1996).

[11] Arianfar, P. - Emamirad, H.: *Relation between scattering and albedo operators in linear transport theory*, Transport Theory and Stat. Physics, **23**(4), (1994), S.517-531.

[12] Aronson, S.: Extrapolation distance for diffusion of light, in *Proceedings SPIE* **1888**, (1993).

[13] Arridge, S.R. - van der Zee, P. - Cope, M. - Delpy, D.T.: New Results for the development of infra-red absorption imaging, in *Proc. SPIE* **1245**, (1990).

[14] Arridge, S.R. - Cope, M. - Delpy, D.T.: The theoretical basis for the determination of optical pathlengths in tissue: temporal and frequency analysis, *Phys. Med. Biol.* **37** (7), (1992).

[15] Arridge, S.R. - Schweiger, M. - Delpy, D.T.: Iterative Reconstruction of Near Infra-Red Absorption Images, in *Proc. SPIE* **1767**, (1992).

[16] Arridge, S.R.: The Forward and Inverse Problems in Time Resolved Infra-Red Imaging, in: *Medical Optical Tomography, Functional Imaging and Monitoring*, G. Müller (ed.), SPIE, Bellingham, (1993), S. 35-64.

[17] Arridge, S.R. - Schweiger, M. - Hiraoka, M. - Delpy, D.T.: A finite element approach for modeling photon transport in tissue, *Med. Phys.* **20** (2), (1993).

[18] Arridge, S.R.: Photon Measurement Density Functions: Part I, Analytical Forms, und Part II: Finite Element Method Calculations, submitted to *Applied Optics: Lasers, Photonics and Environmental Optics*, (1995).

[19] Ashby, S.F. - Brown, P.N. - Dorr, M.R. - Hindmarsh, A.C.: A Linear Algebraic Analysis of Diffusion Synthetic Acceleration for the Boltzmann Transport Equation, *SIAM J. Numer. Anal.* **32** (1), (1995), S.128-178.

[20] Asadzadeh, M.: Analysis of a Fully Discrete Scheme for Neutron Transport in Two-Dimensional Geometry, *SIAM J. Num. Anal.* **23** (3), (1986), S.543-561.

[21] Babovsky, H.: An Inverse Model Problem in Kinetic Theory, *Inverse Problems* **11**, (1995), S.555-570.

[22] Bardos, C. - Santos, R. - Sentis, R.: Diffusion Approximation and Computation of the Critical Size, *Trans. Amer. Math. Soc.* **284** (2), (1984), S.617-649.

[23] Barrett, H.H. - Swindell, W.: *Radiological Imaging*, 2 Bde., Academic Press, New York, 1981.

[24] Bell, G.I. - Glasstone, S.: *Nuclear Reactor Theory*, Van Nostrand-Reinhold, Raleigh, North Carolina, (1970).

[25] Benaron, D. - Stevenson, D.K.: Optical Time-of-Flight and Absorbance Imaging of Biologic Media, *Science* **259**, März 1993, S.1463ff.

[26] Bensoussan, A. - Lions, J.L. - Papanicolaou, G.C.: Boundary Layers and Homogenization of Transport Processes, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.*, **15**, (1979), S.53-157.

[27] Boas, D.A.- Liu, H. - O'Leary, M.A. - Chance, B. - Yodh, A.G.: Photon Migration within the P3 Approximation, in: *Proc. SPIE* **1888**, (1995).

[28] Börgers, C. - Larsen, E.W. - Adams, M.L.: The Asymptotic Diffusion Limit of a Linear Discontinuous Linear Transport Equation, *J. Comp. Phys.* **98**, (1992), S.285ff.

[29] Bondarenko, A.N.: Structure of singularities of the fundamental solution of the transport equation, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **322**, (1992), S.274-276.

[30] Bondarenko, A.N.: X-Ray Tomography in Scattering Media, *SIAM J. Appl. Math.* **56** (2), (1996), S. 573-587.

[31] Bondarenko, A.N.: On the Structure of the Fundamental Solution of the Time-Independent Transport Equation, Preprint **31**, Sobolev Institute of Mathematics, (1996).

[32] Bardos, C. - Santos, R. - Sentis, R.: Diffusion Approximation and Computation of the Critical Size, *Trans. Am. Math. Soc.* **284** (2), (1984), S.617-649.

[33] Bouchard, V. - Cinquin, Ph. - Desbat, L.: First Compton Scatter Correction in SPECT unsing PVM, Proc. Intern. Meeting on Fully Three-Dim. Image Reconstruction in Radiology and Nuclear Medicine, Aix-les-Bains (1995), S.109-111.

[34] Brown, P.N.: A Linear Algebraic Development of Diffusion Synthetic Acceleration for Three-Dimensional Transport Equations, *SIAM J. Numer. Anal.* **32** (1), (1995), S.179-214.

[35] Bui, H.D.: *Inverse Problems in the Mechanics of Materials*, CRC Press, London, (1994).

[36] Carter, C. - Rowlands, G.: Some Topics in One-Velocity Neutron Transport Theory, *React. Sci. Technol.* **15**, (1960), S.1ff.

[37] Case, K.M. - de Hoffman, F. - Placzek, G.: *Introduction to the Theory of Neutron Diffusion*, Los Alamos Scientific Laboratory, (1953).

[38] Case, K.M. - Zweifel, P.F.: *Linear Transport Theory*, Plenum Press, New York, (1967).

[39] Cercignani, C.: *Theory and Applications of the Boltzmann Equation*, Elsevier, New York, (1975).

[40] Cessenat, M.: *Théorèmes de trace L^p pour des espaces de fonctions de la neutronique*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I **299**, (1984), S.831-834.

[41] Cessenat, M.: *Théorèmes de trace pour des espaces de fonctions de la neutronique*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I **300**, (1985), S.89-92.

[42] Chance, B.(ed.): *Photon Migration in Tissues*, Plenum Press, New York, (1989).

[43] Chance, B.(ed.): it Time-Resolved Spectroscopy and Imaging of Tissues, Proc. SPIE **1431**, (1991).

[44] Chance, B. - Alfano, R.R.(eds.): *Photon Migration and Imaging in Random Media and Tissues*, Proc. SPIE **1888**, (1993).

[45] Chance, B. - Alfano, R.R.(eds.): *Optical Tomography, Photon Migration, and Spectroscopy of Tissue and Model Media: Theory, Human Studies, and Instrumentation*, Proc. SPIE **2389**, (1995).

[46] Chandrasekhar, S.: *Radiative Transfer*, Oxford Univ. Press, London, (1950). Auch: Dover, New York, (1960).

[47] Choulli, M. - Stefanov, P.: *Inverse Scattering and Inverse Boundary Value Problems for the Linear Boltzmann Equation*, Comm. Part. Diff. Equ. **21**(5&6), (1996), S. 763-785.

[48] Corones, J.P. - Kristensson, G. - Nelson, P. - Seth, D.L. (Eds.): Invariant Imbedding and Inverse Problems, *SIAM Proceedings Series*, (1992).

[49] Coveyou, R.R. - Cain, V.R. - Yost, K.J.: Adjoint and Importance in Monte Carlo Application, *Nucl. Sci. Eng.* **27**, (1967), S.219ff.

[50] Dautray, R. - Lions, J.L.: *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*, Vol.1, Springer, Berlin, (1990).

[51] Dautray, R. - Lions, J.L.: *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*, Vol.6, Springer, Berlin, (1993).

[52] Davison, B.: *Neutron Transport Theory*, Oxford Univ. Press, London, (1957).

[53] Delpy, D.T. - Cope, M. - van der Zee, P. - Arridge, S. - Wray, S. - Wyatt, J.: Estimation of optical pathlength through tissue from direct time of flight measurement, *Phys. Med. Biol.* **33** (12), (1988).

[54] Delpy, D.: Optical spectroscopy for diagnosis, *Physics World* Aug. 1994, S. 34ff.

[55] Dressler, K.: *Inverse Probleme in der Linearen Transporttheorie - Ein neuer Zugang*, Dissertation, Kaiserslautern, 1988.

[56] Dressler, K.: *Inverse problems in linear transport theory*, Eur. J. Mech., B/Fluids **8** (4), (1989), S. 351-372.

[57] Dressler, K. - Mook, H.: *A Constructive Solution Method for Linear Transport Problems*, Transp. Theory Stat. Physics **19** (6), (1990), S. 459-487.

[58] Duderstadt, J.J. - Martin, W.R.: *Transport Theory*, Wiley, New York, (1979).

[59] Friedrich, V.: Backscattered Photons - Are they useful for a Surface-near Tomography? in: Herman, G. - Louis, A. - Natterer, F.: *Lect. Notes in Mathem.* **1497** *Proc. Oberwolfach*, Springer, (1990).

[60] Furutsu, K.: Diffusion equation derived from space-time transport equation, *J. Opt. Soc. Am.* **70** (4), (1980), S.360ff.

[61] Gelfand, I.M. - Shilow, G.E.: Verallgemeinerte Funktionen (Distributionen), 4 Bde., VEB Verlag der Wissenschaften, Berlin, (1960).

[62] Golse, F. - Lions, P.L. - Perthame, B. - Sentis, R.: Regularity of the Moments of the Solution of a Transport Equation, *Journ. Funct. Anal.* **76**, (1988), S.110-125.

[63] Greenberg, W. - Polewczak, J.: *Modern Mathematical Methods in Transport Theory*, Birkhäuser, Basel, 1991.

[64] Grünbaum, F.A.: Renormalization of Exit Probabilities and a Theorem of Poincaré, *Phys. Lett. A* **146** (9), (1990), S.486-491.

[65] Grünbaum, F.A.: Relating Microscopic and Macroscopic Parameters for a 3-Dimensional Random Walk, *Commun. Math. Phys.* **129**, (1990), S.95-102.

[66] Grünbaum, F.A.: Backscattering comes to the rescue, *Contemp. Math.* **113**, (1990), S.137-139.

[67] Grünbaum, F.A.: Diffuse Tomography: A Refined Model, in *Mathematical Methods in Tomography*, Proc. Oberwolfach 1990, ed. G.T.Herman, A.K. Louis and F. Natterer, Springer-Verlag.

[68] Grünbaum, F.A. - Zubelli, J.P.: Diffuse Tomography: computational aspects of the isotropic case, *Inverse Problems* **8**, (1992), S.421-433.

[69] Grünbaum, F.A.: Diffuse Tomography: the isotropic case, *Inverse Problems* **8**, (1992), S.409-419.

[70] Habetler, G.J. - Matkowsky, B.J.: Uniform asymptotic expansions in transport theory with small mean free paths, and the diffusion approximation, *Journ. Math. Phys.* **16** (4), (1975), S.846ff.

[71] Hammersley, J.M. - Handscomb, D.C.: *Monte Carlo Methods*, Methuen & Co LTD, London, (1965).

[72] Hebden, J. - Delpy, D. - Arridge, S.: Infrared lasers muscle in on medical imaging, *Physics World*, August 1993, S.23f.

[73] Hejtmanek, J.: *Scattering Theory of the Linear Boltzmann Operator*, Comm. Math. Phys. **43**, (1975), S. 109-120.

[74] Hejtmanek, J.: *The Problem of Reconstructing Objects from Projections as an Inverse Problem in Scattering Theory of the Linear Transport Operator*, Lecture Notes in Medical Informatics, Proc. Oberwolfach, Eds. G.T. Herman und F.Natterer, (1981).

[75] Hejtmanek, J.: Time-Dependent Linear Transport Theory, in: *Kinetic Theories and the Boltzmann Equation*, Lecture Notes in Mathematics **1048**, Eds. A.Dold, B. Eckmann, (1981).

[76] Helgason, S: *The Radon Transform*, Birkhäuser, Boston, Basel, (1980).

[77] Herman, G.T.: *Image Reconstruction from Projections*, Springer, Berlin Heidelberg, (1979).

[78] Hiraoka, M. - Arridge, S.R. - Delpy, D.T.: A New Monte Carlo Algorithm for the Description of Light Transport in Tissue, (1994).

[79] Ishimaru, A.: Diffusion of a pulse in densely distributed scatterers, *J. Opt. Soc. Am.* **68** (8), (1978), S.1045ff.

[80] Ishimaru, A.: *Wave Propagation and Scattering in Random Media*, 2 Bde., Academic Press, New York, (1978).

[81] Ishimaru, A. - Kuga, Yasuo - Cheung, R.L.T. - Shimizu, K.: Scattering and diffusion of a beam wave in randomly distributed scatterers, *J. Opt. Soc. Am.* **73** (2), (1983), S.131-136.

[82] Ishimaru, A.: Diffusion of light in turbid material, *Appl. Opt.* **28** (12), (1989), S.2210ff.

[83] Jackson, D.J.: *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, New York, (1962).

[84] Jacques, S.: *Tissue Optics*, Short Course Notes SC29, SPIE-Conference Photonics West '95, San Jose, (1995).

[85] Jin, Shi - Levermore, C.D.: Fully-Discrete Numerical Transfer in Diffusive Regimes, *Transp. Theory. Stat. Phys.* **22** (6), (1993), S.739-791.

[86] Jöbsis, F.F.: Noninvasive Infrared Monitoring of Cerebral and Myocardial Oxygen Sufficiency and Circulatory Parameters, *Science* **198**, (1977).

[87] Johnson, C. - Pitkäranta, J.: Convergence of a Fully Discrete Scheme for Two-Dimensional Neutron Transport, *SIAM J. Num. Anal.* **20** (5), (1983), S.951-966.

[88] Kaltenbach, J.M. - Kaschke, M.: Frequency- and Time-Domain Modelling of Light transport in Random Media, in: *Medical Optical Tomography*, ed. Potter, SPIE Optical Engineering Press, Vol. IS11, (1993), S.65-86.

[89] Kanal, M. - Davies, J.A.: A Multidimensional Inverse Problem in Transport Theory, *Transp. Theory and Statist. Physics* **8** (2), (1979), S.99-115.

[90] Kaper, H.G. - Lekkerkerker, C.G. - Hejtmanek, J.: *Spectral Methods in Linear Transport Theory*, Birkhäuser, Basel, (1982).

[91] Kato, T.: *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer Verlag, New York, (1966).

[92] Klibanov, M.V. - Gutman, S. - Barbour, R.L. - Chang, J. - Malinsky, J. - Alfano, R.R.: Consideration of solutions to the inverse scattering problem for biomedical applications, in: *Proc. SPIE* **1887**, (1993).

[93] Kovtanyuk, A.E.: Special boundary conditions for transport equation, Vladivostok, (1995).

[94] Kuga, Y. - Ishimaru, A. - Bruckner, A.P.: Experiments on picosecond pulse propagation in a diffuse medium, *J. Opt. Soc. Am.* **73** (12), (1983), S.1812-1815.

[95] Lale, P.G.: The examination of internal tissues using gamma-ray scatter with a possible extension for megavoltage therapy, *Phys. Med. Biol.* **4**, (1959), S.159.

[96] Lang, J. - Walter, A.: An Adaptive Discontinuous Finite Element Method for the Transport Equation, *Journ. Comp. Phys.* **117**, (1995), S.28-34.

[97] Larsen, E.W. - Keller, J.B.: Asymptotic solution of neutron transport problems for small mean free paths, *J. Math. Phys.* **15** (1), (1974), S.75ff.

[98] Larsen, E.W.: *Solution of Neutron Transport Problems in L_1* Comm. Pure Appl. Math. **28**, (1975), S.729-746.

[99] Larsen, E.W.: Asymptotic Theory of the Linear Transport Equation for small mean free Paths, II, *Siam J. Appl. Math.* **33**, (1976), S.427ff.

[100] Larsen, E.W. - Pomraning, G.C. - Badham, V.C.: Asymptotic Analysis of Radiative Transfer Problems, *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer* **29** (4), (1983), S.285ff.

[101] Larsen, E.W.: Diffusion-Synthetic Acceleration Methods for Discrete-Ordinates Problems, *Transp. Theor. Stat. Phys.* **13** (1&2), (1984), S.107-126.

[102] Larsen, E.W. - Morel, J.E. - Miller Jr., W.F.: Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes, *Journ. Comp. Phys.* **69**, (1987), S.283ff.

[103] Larsen, E.W.: Solution of three Dimensional Inverse Transport Problems, *Transp. Theory and Statist. Physics* **17** (2&3), (1988), S.147-167.

[104] Larsen, E.W. - Morel, J.E.: Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes II, *Journ. Comp. Phys.* **83**, (1989), S.212ff.

[105] Lasaint, P. - Raviart, P.A.: On a finite Element Method for Solving the Neutron Transport Equation, in: *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, de Boor (ed.), Academic Press, New York, (1974), S.89-123.

[106] Lax, P.D. - Phillips, R.S.: *Scattering Theory*, Acad. Press, New York und London, (1967).

[107] Lewins, J.: *Importance - The Adjoint Function*, Pergamon Press, Oxford, (1965).

[108] Lewis, E.E. - Miller Jr., W.F.: *Computational Methods of Neutron Transport*, Wiley, New York, (1984).

[109] Lions, J.L.: *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations*, Springer, Berlin Heidelberg, (1971).

[110] MCNP 4A: Monte Carlo N-Particle Transport Code System, RSIC Computer Code Collection, contributed by Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, (1994).

[111] TORT-DORT: Two- and Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport, Version 2.8.14, contributed by Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, and Experimental and Mathematical Physics Consultants, Gaithersburg, Maryland.

[112] NEA Data Bank, OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Montineaux, France.

[113] Lux, I. - Koblinger, L.: Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations, CRC Press, (1991).

[114] Malgavi, F. - Pomraning, G.C.: Initial and boundary conditions for diffusive linear transport problems, *J. Math. Phys.* **32** (3), (1991), S.805ff.

[115] Marchuk, G.I.: *Methods of Numerical Mathematics*, Springer, New York, (1975).

[116] McCormick, N.J. - Veeder, J.A.R.: On the inverse problem of transport theory with azimuthal dependence, *J. Math. Phys.* **19** (5), (1978), S.994-998.

[117] McCormick, N.J. - Sanchez, R.: Inverse problem transport calculations for anisotropic scattering coefficients, *J. Math. Phys.* **22** (1), (1981), S.199-208.

[118] McCormick, N.J.: Inverse methods for remote determination of properties of optically thick atmospheres, *Applied Optics* **22** (17), (1983), S.2556-2558.

[119] McCormick, N.J.: Recent Developments in Inverse Scattering Transport Methods, *Transp. Theory and Statist. Physics* **13** (1&2), (1984), S. 15-28.

[120] McCormick, N.J.: Methods for solving Inverse Problems for Radiation Transport - An update, *Transp. Theory and Stat. Physics* **15** (6&7), (1986), S. 759-772.

[121] McCormick, N.J.: Inverse Radiative Transfer Problems: A Review, *Nucl. Sci. Eng.* **112**, (1992), S.185-198.

[122] Messiah, A. *Quantenmechanik*, Bd. 1, De Gruyter, Berlin, (1976).

[123] Mitic, G. - Kölzer, J. - Otto, J. - Plies, E. - Sölkner, G. (Siemens AG) - Zinth, W.: Time-gated transillumination of biological tissues and tissuelike phantoms, *Appl. Opt.* **33** (28), (1994), S.6699ff.

[124] Model, R. - Hünlich, R. - Richter, D. - Rinneberg, H. - Wabnitz, H. - Walzel, M.: Imaging in Random Media: Simulating Light Transport by Numerical Integration of the Diffusion Equation, *Proc. BiOS Europe '94*, SPIE, Vol. 2326, (1995), S.11-22.

[125] Müller, G. J. (ed.): Medical Optical Tomography: functional imaging and optical technologies, *SPIE series Vol. IS11*, (1993).

[126] Natterer, F.: The Identification Problem in Emission Tomography, in: *Herman, G.T. - Natterer, F. (eds.): Mathematical Aspects of Computerized Tomography. Lecture Notes in Medical Informatics*, Vol. **8**, Springer-Verlag, (1981).

[127] Natterer, F.: Computerized Tomography with unknown sources, *SIAM J. Appl. Math.* **43**, S.1201-1212.

[128] Natterer, F.: *The Mathematics of Computerized Tomography*, B.G. Teubner, Stuttgart, (1986).

[129] Natterer, F.: Identifying a coefficient in a stationary Boltzmann Equation, Serie *Problemi non ben posti ed inversi* **38**, Firenze, (1988).

[130] Natterer, F.: An Inverse Problem for a Transport Equation and Integral Geometry, *Contemporary Mathematics* **113**, (1990), S.221-231.

[131] Natterer, F.: Determination of Tissue Attenuation in Emission Tomography of Optically Dense Media, *Inverse Problems* **9**, (1993), S.731-736.

[132] Natterer, F.: Solution of some inverse evolution problems in the Born approximation, Münster, (1993).

[133] Natterer, F.: Das Inverse Problem der Transportgleichung in der Bornschen Näherung, Münster, (1994).

[134] Natterer, F.: Finite Difference Methods for Inverse Problems, Münster, (1995).

[135] Natterer, F.: Numerical Solution of Bilinear Inverse Problems, Preprints „Angewandte Mathematik und Informatik“ 19/96 - N, Münster, (1996).

[136] Nazarov, V.G.: Heterogeneity Indicator for Medium Radiography, Vladivostok, (1995).

[137] Newton, R.G.: *Scattering Theory of Waves and Particles*, Springer, New York, (1982).

[138] Nkaoua, J. - Sentis, R.: A New Time Diskretization for the Radiative Transfer Equations: Analysis and Domparision with the Classical Discretization, *SIAM J. Numer. Anal.* **30** (3), (1993), s. 733-748.

[139] Nuyts, J. - Bosmans, H. - Suetens, P.; An analytical Model for Compton Scatter in a Homogeneously Attenuating Medium, *IEEE Trans. Med. Im.* **12** (3), (1993), S. 421-429.

[140] Ogawa, K: A Practical Method for Position-Dependent Comption-Scatter Correction in Single Photon Emission CT, *IEEE Trans. Med. Im.* **10** (3), (1991), S.408-412.

[141] Pachenko, A.N.: Inverse source problem of radiative transfer: a special case of the attenuated Radon transform, *Inverse Problems* **9**, (1993), S.321-337.

[142] Palamodov, V.: persönliche Mitteilung.

[143] Palamodov, V.: Distributions and Harmonic Analysis, in: Encyclopaedia of Mathematical Sciences, *Commutative Harmonic Analysis III*, Vol. 72, Springer, (1995).

[144] Palmer, T.D.: Curvilinear Geometry Transport Discretizations in Thick Diffusive Regions, dissertation in the University of Michigan, (1993).

[145] Papanicolaou, G.: Stochastic Differential Equations with Applications to Random Harmonic Oscillators and Wave Propagation in Random Media, *SIAM J. Appl. Math.* **21** (2), (1971), S.287-305.

[146] Papanicolaou, G.: Asymptotic Analysis of Transport Processes, *Bull. Am. Math. Soc.* **81** (2), (1975), S.330-392.

[147] Papanicolaou, G.: *Boundary Layers and Homogenization of Transport Processes*, Publ. RIMS, Kyoto Univ. **15**, (1979), S. 53-157.

[148] Patch, S.: Recursive Recovery of Markov Transition Probabilities from Boundary Value Data, Ph.D. Thesis in the University of California, Berkeley, (1994).

[149] Patch, S.: Consistency conditions in diffuse tomography, *Inverse Problems* **10**, (1994), S.199-212.

[150] Pazy, A: *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Lecture Notes of the University of Maryland, **10**, (1974).

[151] Pitkäranta, J.: On the Spatial Differencing of the Discrete Ordinate Neutron Transport Equation, *SIAM J. Num. Anal.* **15** (5), (1978), S. 859-869.

[152] Pomraning, G.C.: Near-Infinite-Medium Solutions of the Equation of Transfer, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **44** (3), (1990), S.317ff

[153] Potthast, R.: Fréchet differentiability of boundary integral operators and its application to an inverse acoustic scattering problem, *Inverse Problems* **10**, (1994), S. 431-447.

[154] Potthast, R.: Fréchet differentiability of the solution to the acoustic Neumann scattering problem with respect to the domain, *J. Inv. Ill-Posed Problems*, **4** (1), (1996), S. 67-84.

[155] Prilepko, A.I. - Ivankov, A.L.: *Inverse Problems for the time-dependent Transport-Equation*, Soviet Math. Dokl. **29** (3), (1984), S.559-564.

[156] Prilepko, A.I. - Ivankov, A.L.: *Inverse Problems of Finding a Coefficient, the Scattering indicatrix, and the right side of a nonstationary many-velocity Transport Equation* Differential Equations **21**, (1985), S.598-609.

[157] Prilepko, A.I. - Volkov, N.P.: *Inverse Problems of Finding Parameters of a Nonstationary Transport Equation from Integral Overdetermination* Differential Equations, **23**, S.91-101.

[158] Prilepko, A.I. - Volkov, N.P.: *Inverse problems for determining the parameters of nonstationary kinetic transport equation from additional information on the traces of the unknown function*, Differentsialnye Uravneniya **24**, (1988), S.136-146.

[159] Prokhorov, I.V.: Use of jump in external source for solution of problem in X-ray tomography, Vladivostok, (1995).

[160] Reed, M. - Simon, B.: *Methods of Modern Mathematical Physics*, Vol. 3, Academic Press, New York, (1979).

[161] Riauka, T.A. - Gortel, Z.W.: Photon Propagation and Detection in Single-Photon Emission Computed Tomography-An analytical approach, *Med. Phys.* **21** (8), (1994), S. 1311-1321.

[162] Ribarič, M. - Šušteršič, L.: Asymptotic Approximation to a Linear Transport Equation, *Transp. Theory and Statist. Physics* **23** (6), (1994), S.815-843.

[163] Richtmyer, R.D. - Morton, K.W.: *Difference Methods for Initial-Value Problems*, John Wiley, New York, (1967).

[164] Romanov, V.G. - Kabanikhin, S.I. - Boboev, K.: An Inverse Problem for $\mathcal{P}_n$-Approximation of the Kinetic Transport Equation, *Soviet Math. Dokl.* **29** (3), (1984), S.496-499.

[165] Sanchez, R. - McCormick, N.J.: General Solutions to inverse transport problems, *J. Math. Phys.* **22** (4), (1981), S.847-855.

[166] Sanchez, R. - McCormick, N.J.: A Review of Neutron Transport Approximations, *Nucl. Sci. Eng.***80**, (1981), S.481-535.

[167] Sanchez, R. - McCormick, N.J.: Numerical Evaluation of optical Single-Scattering Properties using Multiple-Scattering Inverse Transport Methods, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **28** (3), (1982), S.169-184.

[168] Schmitz, N. - Lehmann, F.: *Monte-Carlo-Methoden I: Erzeugen und Testen von Zufallszahlen*, Skripten zur Mathematischen Statistik, Nr.2, Institut für Mathematische Statistik der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, (1982).

[169] Schotland, J.C. - Haselgrove, J.C. - Leigh, J. S.: Photon hitting density, *Appl. Opt.* **32** (4), (1993), S.448-453.

[170] Shreider, Yu.A.: *Method of Statistical Testing: Monte Carlo Method*, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, (1964).

[171] Schuster, A.: Radiation through a foggy atmosphere, *Astrophys. Journal* **21**, (1905).

[172] Schweiger, M.- Arridge, S.R. - Hiraoka, M. - Delpy, D.T.: The finite element method for the propagation of light in scattering media: Boundary and source conditions, *Med. Phys.* **22** (11), (1995), S.1-14.

[173] Sewell, G.: *The Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations*, Academic Press, San Diego, (1988).

[174] Singer, J.R. - Grünbaum, F.A. - Kohn, P. - Zubelli, J.P.: Image Reconstruction of the Interior of Bodies That Diffuse Radiation, *Science* **248**, (1990), S.990-993.

[175] Siewert, C.E.: *On the Singular Components of the Solution to the Searchlight Problem in Radiative Transfer* J. Quant. Radiat. Transfer, **33** (6), (1985), S.551-554.

[176] Smith, M.F. - Jaszczak, R.J.: Generalized dual-energy-window scatter compensation in spatially varying media for SPECT, *Phys. Med. Biol.* **39**, (1994), S. 531-546.

[177] Sobolev, V.V.: *A Treatise on Radiative Transfer* (aus dem Russischen übersetzt), Princeton, New Jersey, (1963).

[178] Spanier, J. - Gelbard, E.M.: *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*, Addison-Wesley, Reading, (1969).

[179] Van de Hulst, H.C.: *Light Scattering by Small Particles*, Wiley, New York, (1957).

[180] Van de Hulst, H.C.: *Multiple Light Scattering*, 2 Bde., Academic Press, New York, (1980).

[181] Volkov, N.P.: On some Inverse Problems for the Time-Dependent Transport Equation, in *Ill-Posed Problems in Natural Sciences*, Proc. of the International Conference Held in Moscow, 1991, ed. A.N.Tikhonov, VSP BV Utrecht, 1992, S.431-438.

[182] Wang, L. - Jacques, S.L.: Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues in Standard C, Programm-Dokumentation, University of Texas, (1992).

[183] Weinberg - Wigner: *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*, University Chicago Press, (1958).

[184] Welch, A. - Clack, R. - Gullberg, G.T. - Natterer, F.: Accurate Attenuation Correction in SPECT Without Transmission Measurements, preprint: *IEEE NSS-MIC Conference, San Fransisko*, (1995).

[185] Welch, A. - Gullberg, G.T. - Christian, P. E. - Datz, F.L.: A transmission-map-based scatter correction technique for SPECT in inhomogeneous media, *Med. Phys.* **22** (10), (1995), S.1627-1635.

[186] Wenzel, L.: *Die Boltzmann-Gleichung mit zeitunabhängigen Operatoren in einem Raum von Distributionen*, Math. Nachr. **131**, (1987), S.321-333.

[187] Williams, M.M.R.: *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*, Butterworths, London, (1971).

[188] Wing, G.M.: *An Introduction to Transport Theory*, Wiley, New York, (1962).

[189] Ying, J.P. - Wu, F. - Sun, W.: *Simultaneous Reconstruction of two Parameters for Transport Equation in a stratified half space*, Journ. Comp. Physics **125** (2), (1996), S.434-439.

[190] Yodh, A. - Chance, B.: Spectroscopy and Imaging with Diffusing Light, *Physics Today*, **48** (3), März 1995, S.34ff.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name:	Oliver Dorn
geboren:	15. April 1965 in Bad Oeynhausen
Familienstand:	ledig
Name der Eltern:	Helmut Dorn und Vilja Dorn, geb. Wachtmann

Schulbildung

1971 - 1975	Grundschule Rothenuffeln
1975 - 1984	Ratsgymnasium Minden
5. Juni 1984	Abitur ebendort

Studium

WS 1984	Beginn des Studiums der Mathematik (Diplom) und der Physik (Diplom) an der Westfälischen Wilhelms-Universität (WWU) Münster
Oktober 1987	Vordiplome in Mathematik und in Physik
März 1992	Erfolgreicher Abschluß der mündlichen Diplomprüfungen im Studienfach Physik (Diplom) Beginn der Diplomarbeit am Mathematischen Institut der WWU unter der Betreuung von Prof. Dr. G. Bengel
15. April 1993	Diplom im Studienfach Mathematik
Mai 1993	Beginn der Dissertation am Institut für Numerische und instrumentelle Mathematik der WWU Betreuer: Prof. Dr. F. Natterer

Tätigkeiten

SS 1988 - WS 1991	Studentische Hilfskraft am Mathematischen Institut der WWU Münster
Seit Mai 1993	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Numerische und instrumentelle Mathematik der WWU Münster

Preprints
"Angewandte Mathematik und Informatik"

12/96 - N	A. Klawonn: Triangular Preconditioners for Saddle Point Problems with a Penalty Term.
13/96 - S	G. Alsmeyer: Some Notes on Harris Recurrence and Regeneration.
14/96 - S	G. Alsmeyer: The Ladder Variables of a Markov Random Walk.
15/96 - S	G. Alsmeyer: The Markov Renewal Theorem and Related Results.
16/96 - I	M. Weske: Event-Based Modeling and Analysis of Distributed Workflow Executions.
17/96 - I	J. Döllner: Guiding Principles for Object-Oriented Programming in C++
18/96 - I	J. Döllner: An Object-Oriented Architecture for an Interactive, Animated 3D Wedget Tookit
19/96 - N	F. Natterer: Numerical Solution of Bilinear Inverse Problems.
20/96 - N	F. Natterer: Resolution and Reconstruction for a Helical CT-Scanner.
21/96 - N	K. Malanowski, H. Maurer: Sensitivity Analysis for State Constrained Optimal Control Problems.
22/96 - I	C. Fahrner, G. Vossen: A Modular Approach to Relational Reverse Engineering.
23/96 - I	G. Vossen, M. Weske, G. Wittkowski: Prototypische Realisierung von WASA: Flexibles und plattformunabhngiges Workflow-Management.
24/96 - I	G. Vossen, M. Weske, G. Wittkowski: Dynamic Workflow-Management on the Web.
25/96 - I	G. Vossen: The CORBA Specification for Cooperation in Heterogeneous Information Systems.
1/97 - I	E. Niehaus: Innerneurale Lernprozesse.
2/97 - I	L. Becker, K. Hinrichs, A. Voigtmann: Physical Design Aspects of an Object-Oriented Geo-Database Kernel.
3/97 - I	L. Becker, H. Ditt, K. Hinrichs, A. Voigtmann: Constraints and Triggers in an Object-Oriented Geo Database Kernel.
4/97 - N	A. Klawonn, G. Starke: Block Triangular Preconditioners for Nonsymmetric Saddle Point Problems: Field-of-Values Analysis.
5/97 - S	A. Hawix, N. Schmitz: Remarks on the modified Kiefer-Weiss-problem for exponential families
6/97 - I	G. Vossen: Object Data Models: Ten Years After.
7/97 - N	O. Dorn: Das inverse Transportproblem in der Lasertomographie.