

К разработке численных методов для применений когерентного излучения в исследованиях внутренней структуры предметов (часть II)

А.С.Бусаров, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов, И.А.Артюков

Рассматривается однокурсная 3D визуализация – подход к восстановлению комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(x, y, z)$ исследуемого образца с помощью обработки данных, считываемых с детектора, при последовательном просвечивании неподвижного объекта различными гауссовыми пучками вдоль одного и того же направления (ракурса). Описание распространения гауссовых пучков через объект проводится на основе параболического волнового уравнения. Приводится вывод уравнения однокурсной объёмной визуализации, связывающего данные, полученные на детекторе, со значениями диэлектрической проницаемости $\epsilon(x, y, z)$. В качестве примера решения этого уравнения оптимизационными методами рассмотрен упрощённый случай чисто действительной проницаемости $\epsilon(x, z)$ в двумерном пространстве.

Ключевые слова: когерентная микроскопия, 3D изображения, гауссовы пучки, структурированный свет, однокурсная визуализация.

1. Введение

Безлинзовые методы*, использующие когерентное освещение образца, с начала 21-го века постепенно превращаются из объекта исследований в рабочий инструмент микроскопии [1–3]. Такие технологии, как дифракционная микроскопия (coherent diffraction imaging, CDI) и птихография, всё чаще применяются в широком диапазоне электромагнитного спектра – от терагерцевого до жёсткого рентгеновского [4–6]. Возможность обойтись без линз особенно важна, если оптические элементы слишком сложны и дороги, а также если из-за аббераций они не обеспечивают необходимого пространственного разрешения вплоть до дифракционного предела. Однако следует иметь в виду, что о надёжных измерениях можно говорить лишь в случае двумерных объектов, т. е. при получении изображений плоских поверхностей или достаточно тонких предметов. В то же время существует устойчивый запрос на использование упомянутых методов в исследованиях трёхмерных объектов, в том числе изучение их внутренней структуры [2]. Другой доступный и надёжный безлинзовый метод – компьютерная томография (КТ) – не всегда может служить альтернативой, поскольку имеет свои фундаментальные ограничения. Они связаны с пренебрежением дифракцией и показателем преломления материала образца. Работы, направленные на преодоление этих ограничений, начались в 60-е годы прошлого столетия с дифракционной томографии (ДТ) [7, 8]

*Здесь и далее предполагается, что линзы и оптические элементы не используются на пути от образца до детектора. При формировании падающего на образец пучка оптические элементы могут использоваться.

А.С.Бусаров, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов, И.А.Артюков. Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53; e-mail: albusarov@mail.ru

Поступила в редакцию 27 ноября 2024 г.

и продолжают в настоящее время [9]. В предыдущих работах [10, 11] для определения пространственного распределения комплексной диэлектрической проницаемости предлагается использовать последовательное облучение трёхмерного образца гауссовыми пучками. При этом показано, что можно свести к решению задачу трёхмерной реконструкции $\epsilon(\mathbf{r})$, вообще говоря, бесконечной системы нелинейных уравнений для коэффициентов разложения $\epsilon(\mathbf{r})$ по полному набору гауссовых функций. Эта система уравнений компактно записывается в матричном виде. В настоящей работе рассматриваются примеры её приближённого решения методом градиентного спуска и сходимость результатов, связанная с конечностью числа членов в используемых в задаче рядах.

2. Однокурсная 3D визуализация. Основные уравнения

Математической основой CDI и птихографии является волновое уравнение Гельмгольца или параболическое волновое уравнение (ПВУ) для света и описание образца амплитудно-фазовым экраном. Математической основой КТ служит лучевая оптика и идентификация образца единственным оптическим параметром – показателем поглощения, зависящим от длины волны освещающего источника. Математическая основа ДТ – это волновое уравнение (Гельмгольца или ПВУ) для света и описание образца двумя оптическими константами – показателями поглощения и преломления, зависящими от длины волны.

В работе [11] мы исходили из ПВУ, описывая образец зависящей от длины волны комплексной диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{r})$, которую и требуется отыскать, решая коэффициентную обратную задачу для ПВУ. Связь $\epsilon(\mathbf{r})$ с показателями поглощения и преломления в рентгеновском диапазоне определяется элементарным составом образца [12–14]. Входными данными служит распределение поля гауссовых пучков, рассеянных на об-

разце. Предполагается, что распределение поля регистрируется амплитудным детектором.

Чтобы сохранить наглядное соответствие с квантовой механикой, следуя [11], будем использовать вместо диэлектрической проницаемости потенциал

$$V(x, z) = \frac{k^2}{2} [1 - \varepsilon(x, z)], \quad (1)$$

где k – волновое число. Подразумевается, что падающие на образец пучки $E_l(x, z)$ распространяются вдоль оси z , а x означает совокупность поперечных координат. Далее будем использовать представление поля $E_l(x, z)$ в виде медленной амплитуды $u_l(x, z)$, которая связана с $E_l(x, z)$ соотношением $u_l(x, z) = E_l(x, z)\exp(-ikz)$.

Медленная амплитуда (далее для краткости – поле) $u_l(x, z)$, $l = 1, 2, \dots, L$ при распространении от входной апертуры в точке $z = -Z$ к детектору, $z = Z$, подчиняется ПВУ

$$ik \frac{\partial u_l(x, z)}{\partial z} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, z) \right] u_l(x, z), \quad (2)$$

$$u_l(x, -Z) = \varphi_l(x, -Z), \quad -Z < z < Z,$$

где $\varphi_l(x, -Z)$ – набор функций гауссовых пучков, которые являются решениями ПВУ в свободном пространстве.

2.1. Решение прямой задачи

Вначале решается прямая задача – нахождение поля на детекторе $u_l(x, Z)$ по заданному полю на входной апертуре $u_l(x, -Z)$. Для этого поле пучка $u_l(x, z)$ раскладывается по полному набору гауссовых функций $\varphi_n(x, z)$, а потенциал $V(x, z)$ – по произвольному полному набору функций $\psi_m(x, z)$. Обрывая эти разложения и проводя дискретизацию по продольной координате z потенциала $V(x, z)$, сводим ПВУ (2), т.е. прямую задачу, к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с кусочно-постоянной матрицей потенциала, которая допускает точное решение. После чего начальное $u_l(x, -Z)$ и конечное $u_l(x, Z)$ распределения полагаем известными, тогда остаётся разрешить полученные нелинейные уравнения относительно коэффициентов разложения потенциала. Назовём для краткости коэффициент разложения при гауссовой функции проекцией, а всё множество проекций спектром. Тогда по своему спектру потенциал (т.е. диэлектрическая проницаемость) восстанавливается однозначно, что и позволяет далее решать обратную задачу.

В дальнейшем будем считать, что все бесконечные спектры обрываются на M -м члене, т.е. M – это максимальный номер гауссова пучка в разложении. Спектр функции $u_l(x, -Z)$ на входе содержит единственную ненулевую, l -ю, проекцию, однако под действием потенциала $V(x, z)$ функция $u_l(x, Z)$ на выходе содержит уже, вообще говоря, бесконечное число ненулевых проекций. При этом для больших l , как следует из (2), влияние потенциала мало по сравнению с 2-й производной, а значит, спектр имеет выраженный центр, равный l . Таким образом, в общем случае должно быть $L < M$.

Подстановка разложения

$$u_l(x, z) = \sum_{m=1}^M c_{ml}(z) \varphi_m(x, z), \quad (3)$$

$$\int \varphi_m^*(x, z) \varphi_n(x, z) dx = \delta_{mn}, \quad c_{ml}(z) = \int \varphi_m^*(x, z) u_l(x, z) dx, \quad (4)$$

$$m, n = \overline{1, M}, \quad l = \overline{1, L}$$

в ПВУ (2) приводит к матричному уравнению

$$ik \dot{C}_l(z) = \hat{V}(z) C_l(z), \quad C_l(z) = \begin{pmatrix} c_{1l} \\ c_{2l} \\ \vdots \\ c_{Ml} \end{pmatrix}, \quad C_l(-Z) = (0 \dots 0 \underset{l}{1} 0 \dots 0)^T, \quad (5)$$

где

$$\hat{V}(z) = \{V_{mn}(z)\}, \quad V_{mn}(z) = \int \varphi_m^*(x, z) V(x, z) \varphi_n(x, z) dx. \quad (6)$$

Здесь $C_l(z)$ – матрица-столбец высоты M , а $\hat{V}(z)$ – квадратная матрица размером $M \times M$. Объединяя столбцы C_l , $l = 1, 2, \dots, L$ в одну матрицу $C = (C_1 C_2 \dots C_L)$, можно вместо L уравнений для каждого пучка по отдельности получить одно уравнение (матрица $\hat{V}(z)$ для всех L уравнений (5) одна и та же):

$$ik \dot{C}(z) = \hat{V}(z) C(z), \quad c_{ij}(-Z) = \delta_{ij}; \quad i = \overline{1, M}, \quad j = \overline{1, L}, \quad (7)$$

где $C(z)$ – матрица размером $M \times L$.

Чтобы получить численное решение системы линейных ОДУ (7), проводится дискретизация по z , и матричная функция $\hat{V}(z)$ заменяется ступенчатой с узлами z_s :

$$\hat{V}(z) = \hat{V}(z_s), \quad z_{s-1} < z < z_s, \quad z_s = -Z + sh, \quad (8)$$

$$s = 1, 2, \dots, S = 2Z/h, \quad z_0 = -Z, \quad z_S = Z,$$

где h и S – шаг дискретизации и число узлов. После чего система линейных ОДУ (7) становится системой с кусочно-постоянными коэффициентами и имеет в этом случае точное решение, которое на поверхности детектора при $z = Z$ даёт

$$C(Z) = \prod_{S \geq s \geq 1} \exp \left[-i \frac{h}{k} \hat{V}(z_s) \right] \cdot C(-Z). \quad (9)$$

Далее, если выполнить разложение потенциала $V(x, z)$ по проекциям произвольного полного набора $\{\psi_j\}$

$$V(x, z) = \sum_{j=1}^J v_j(z) \psi_j(x, z), \quad (10)$$

$$v_j(z) = \int \psi_j^*(x, z) V(x, z) dx,$$

формула для $\hat{V}(z)$ с учётом (6) и (10) примет вид

$$\hat{V}(z) = \sum_{j=1}^J v_j(z) B^j(z), \quad B^j(z) = \{B_{mn}^j(z)\}, \quad (11)$$

$$B_{mn}^j(z) = \int \varphi_m^*(x, z) \psi_j(x, z) \varphi_n(x, z) dx.$$

Тогда для матрицы $C(Z)$ после подстановки (11) в (9) получаем

* Обозначение с «крышкой» матрицы $\hat{V}(x, z)$ используется для того, чтобы избежать путаницы с функцией потенциала $V(x, z)$.

$$C(Z) = \prod_{S \geq s \geq 1} \exp \left[-i \frac{h}{k} \sum_{j=1}^J v_j(z_s) B^j(z_s) \right] \cdot C(-Z). \quad (12)$$

2.2. Решение обратной коэффициентной задачи

При решении обратной задачи матрица $C(Z)$ в (12) предполагается известной из измерений рассеянного поля, а матрица $C(-Z)$ известна из начальных условий. Элементы матриц $B^j(z_s)$, согласно (11), являются табличными либо табулируемыми величинами. Таким образом, матричное соотношение (12) представляет собой систему уравнений относительно $J \cdot S$ неизвестных $v_j(z_s)$. Они определяют, согласно (10), распределение потенциала $V(x, z_s)$ по поперечной координате в каждом из срезов z_s , что и решает задачу одноракурсной 3D визуализации. Число уравнений, соответствующих (12), в общем случае равно $M \cdot L$, где M – число удерживаемых членов в разложении волновой функции (3), а L – число гауссовых пучков, с помощью которых последовательно облучают исследуемый объект. Сравнивая число неизвестных и уравнений, получаем условие разрешимости в виде

$$ML \geq SJ. \quad (13)$$

3. Расчёт коэффициентов $B_{nm}^j(z)$

Здесь и в разд.4 рассматривается случай одной поперечной переменной x (до этого момента в качестве x обозначалась совокупность поперечных координат). Для проведения расчётов нам потребуются коэффициенты $B_{nm}^j(z)$ (11):

$$B_{nm}^j(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x, z) \psi_j(x, z) \varphi_m(x, z) dx, \quad (14)$$

найдем эти коэффициенты.

Напомним, что $\varphi_n(x, z)$ определяются формулами [11]

$$\varphi_n(x, z) = \frac{1}{\sqrt{\rho(z)}} \exp \left[-i \left(n - \frac{1}{2} \right) \arctg \left(\frac{z}{z_R} \right) + i \frac{kx^2}{2R(z)} \right] \times \varphi_{n-1}^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right), \quad n \geq 1,^* \quad (15)$$

$$\rho(z) = \rho_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2}, \quad R(z) = z \left(1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2 \right), \quad z_R = k\rho_0^2.$$

Если функции (15) подставить в выражение (14), то формула для коэффициентов $B_{nm}^j(z)$ будет иметь следующий вид:

$$B_{nm}^j(z) = \frac{\exp[i(n-m)\arctg(z/z_R)]}{\rho(z)} \times \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n-1}^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right) \psi_j(x, z) \varphi_{m-1}^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right) dx, \quad (16)$$

Исходя из вида (16), в качестве функций $\psi_j(x, z)$ можно выбрать

* В Приложении в [11] нумерация этих функций начиналась с нуля, но здесь с целью согласования с основным текстом нумерация начинается с единицы.

$$\psi_j(x, z) = \frac{1}{\sqrt{\rho(z)}} \varphi_{j-1}^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right), \quad j \geq 1; \quad (17)$$

легко проверить, что функции (17) образуют полную ортонормированную систему функций при каждом фиксированном значении z .

Выражение для коэффициентов $B_{nm}^j(z)$ в этом случае принимает вид

$$B_{nm}^j(z) = \frac{\exp[i(n-m)\arctg(z/z_R)]}{\sqrt{\rho(z)}} B_{nm}^j, \quad n, m, j \geq 1, \quad (18)$$

где

$$B_{nm}^j = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{n-1}^{\text{norm}}(x) \varphi_{j-1}^{\text{norm}}(x) \varphi_{m-1}^{\text{norm}}(x) dx. \quad (19)$$

4. Пример численного решения обратной задачи

Зададим тестовый потенциал $V_0(x, z)$, т.е. согласно (10) набор его проекций $v_j^0(z)$, $j = \overline{1, J}$,* тогда мы можем найти матрицу $C_0(Z)$ ** (см. формулу (12)):

$$C_0(Z) = \prod_{S \geq s \geq 1} \exp \left[-i \frac{h}{k} \sum_{j=1}^J v_{s,j}^0 B^j(z_s) \right] C_0(-Z), \quad (20)$$

$$v_{s,j}^0 = v_j^0(z_s).$$

Итак, обратная задача заключается в том, что, зная матрицу C_0 , нужно теперь восстановить потенциал $V_0(x, z)$ или, что то же самое, найти функции $v_j^0(z)$ ($v_{s,j}^0$, $s = \overline{1, S}$, $j = \overline{1, J}$). Для этого необходимо, чтобы $C(v) = C_0$, где

$$C(v) = \prod_{S \geq s \geq 1} \exp \left[-i \frac{h}{k} \sum_{j=1}^J v_{s,j} B^j(z_s) \right] C_0(-Z), \quad (21)$$

$$v = \{v_{s,j}\}, \quad v_{s,j} = v_j(z_s);$$

т.е. нужно найти такие $v = \{v_{s,j}\}$, чтобы выполнялось равенство $C(v) = C_0$. Для решения этой задачи был выбран метод градиентного спуска [15]. С этой целью была составлена функция невязки

$$F(v) = \sqrt{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^L |(C(v) - C_0)_{ij}|^2}, \quad (22)$$

или эта же функция, записанная в более удобном для нахождения градиента виде:

$$F(v) = \sqrt{\text{Trace}[(C(v) - C_0)^* (C(v) - C_0)]}. \quad (23)$$

Найдем теперь градиент $F(v)$:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial v_{m,l}}(v) \right|_{v=\bar{v}} = \frac{1}{F(\bar{v})} \times$$

* В данном примере будет рассмотрен случай чисто действительного потенциала $V(x, z)$, поэтому и функции $v_j^0(z)$, $j = \overline{1, J}$ тоже будут без мнимой части.

** В дальнейшем матрица $C_0(Z)$ для краткости будет обозначаться как C_0 .

$$\times \text{Trace} \left[\text{Re} \left((C^{*\text{T}}(\tilde{v}) - C_0^{*\text{T}}) \left[\frac{\partial C}{\partial v_{m,l}}(v) \right] \Big|_{v=\tilde{v}} \right) \right], \quad (24)$$

$$\frac{\partial C}{\partial v_{m,l}}(v) \Big|_{v=\tilde{v}} = A_3(\tilde{v}) A_2(\tilde{v}) A_1(\tilde{v});$$

$$A_1(\tilde{v}) = \prod_{m-1 \geq s \geq 1} \exp \left(-\frac{i\hbar}{k} \sum_{j=1}^J \tilde{v}_{s,j} B^j(z_s) \right), \quad (24.1)$$

$$A_2(\tilde{v}) = \left[\frac{\partial}{\partial v_{m,l}} \exp \left(-\frac{i\hbar}{k} \sum_{j=1}^J v_{m,j} B^j(z_m) \right) \right] \Big|_{v=\tilde{v}}, \quad (24.2)$$

$$A_3(\tilde{v}) = \prod_{S \geq s \geq m+1} \exp \left(-\frac{i\hbar}{k} \sum_{j=1}^J \tilde{v}_{s,j} B^j(z_s) \right). \quad (24.3)$$

Здесь $\tilde{v} = \{\tilde{v}_{s,j}\}$ – точка, в которой находится градиент. Таким образом, чтобы получить выражение для градиента, осталось вычислить частную производную (24.2); для этого запишем (24.2) в следующем виде:

$$A_2(\tilde{v}) = \left[\frac{\partial}{\partial w} \exp(Aw + B(\tilde{v})) \right] \Big|_{w=0}, \quad (25)$$

$$B(\tilde{v}) = -\frac{i\hbar}{k} \sum_{j=1}^J \tilde{v}_{m,j} B^j(z_m), \quad A = -\frac{i\hbar}{k} B^l(z_m), \quad w = v_{m,l} - \tilde{v}_{m,l}.$$

Далее раскладывая экспоненту в ряд,

$$\exp[Aw + B(\tilde{v})] = \sum_{n \geq 0} \frac{(Aw + B(\tilde{v}))^n}{n!}, \quad (26)$$

и проводя дифференцирование, получаем для $A_2(\tilde{v})$ следующую формулу:

$$A_2(\tilde{v}) = \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left(\sum_{q=0}^{n-1} B^q(\tilde{v}) A B^{n-1-q}(\tilde{v}) \right). \quad (27)$$

Итак, градиент, необходимый для работы метода градиентного спуска, найден. Перейдем теперь к рассмотрению конкретного примера.

Выберем в качестве тестового потенциала функцию

$$V_0(x, z) = \quad (28)$$

$$\begin{cases} 0, & -Z < z < -\frac{2}{5}Z, \\ \frac{1}{10} \sin^2 \left(\pi \frac{z + \frac{2}{5}Z}{\frac{6}{5}Z} \right) \sum_{j=1}^J \Pi_j(z) \psi_j(x, z), & -\frac{2}{5}Z < z < \frac{4}{5}Z, \\ 0, & \frac{4}{5}Z < z < Z, \end{cases}$$

$$\Pi_j(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \Pi(x) \psi_j(x, z) dx, \quad \Pi(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 2\rho_0], \\ 0, & x \notin [0, 2\rho_0]. \end{cases}$$

Данная функция представляет собой произведение первых J слагаемых в разложении прямоугольного распределения $\Pi(x)$ по полному набору функций $\psi_j(x, z)$ и одного периода квадрата синуса вдоль оси z (для того, чтобы у данного распределения не было резких краёв). Распределение тестового потенциала выбрано так, чтобы избежать симметрии по осям x и z (рис.1).

Для проведения численного моделирования были заданы следующие параметры: $\lambda = 1$, $\rho_0 = 5\lambda$, $Z = 2z_R$, $M = 100$, $S = 100$, $J = 10$. На рис.2 для иллюстрации изображён

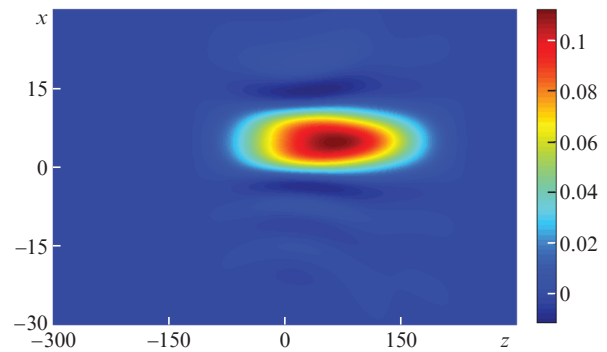


Рис.1. Тестовый потенциал $V_0(x, z)$.

ход первого гауссова пучка $u_1(x, z)$ через выбранный тестовый потенциал $V_0(x, z)$.

Перейдём теперь к определению параметра L – числа пучков, последовательно просвечивающих исследуемый объект. Запишем формулу (20) в виде

$$C_0(Z) = D \cdot C_0(-Z), \quad D = \prod_{S \geq s \geq 1} \exp \left[-i \frac{\hbar}{k} \hat{V}_0^s(z_s) \right], \quad (29)$$

$$\hat{V}_0^s(z_s) = \sum_{j=1}^J v_{s,j}^0 B^j(z_s).$$

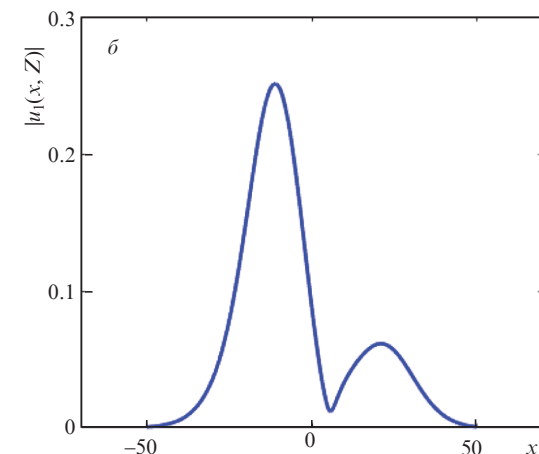
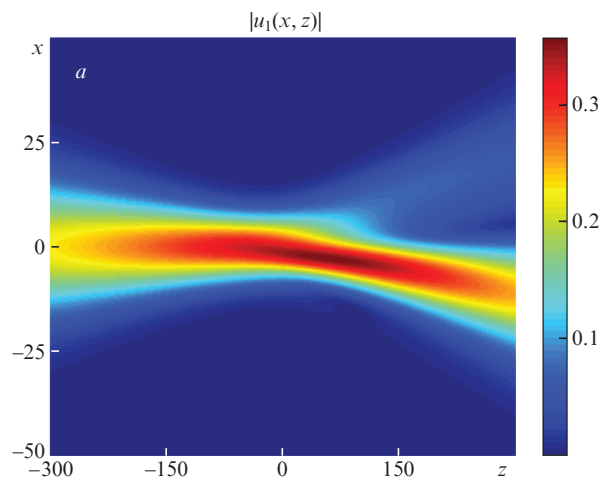


Рис.2. Модуль амплитуды первого гауссова пучка, проходящего через объект, заданный потенциалом $V_0(x, z)$ (а), и модуль $u_1(x, z)$ в плоскости детектора $z = Z$ (б).

Матрица $C_0 = C_0(Z)$ с учётом того, что $\{C_0(-Z)\}_{ij} = \delta_{ij}$, $i = \overline{1, M}$, $j = \overline{1, L}$, и формулы (29) представляет собой прямоугольную матрицу, состоящую из первых L столбцов квадратной матрицы D .

Если нормы некоторых матриц A_s , $s = \overline{1, S}$ достаточно малы, то

$$\prod_{s \geq 1} \exp(A_s) = \prod_{s \geq 1} \left(E + A_s + \frac{A_s^2}{2} \right) = E + \Lambda, \quad (30)$$

где матрица Λ является небольшой добавкой к единичной матрице E . Именно этот случай и реализуется в данном примере для матрицы D (рис.3,а). Матрица десятич-

ных логарифмов соответствующих модулей элементов матрицы D изображена на рис.3,в. Видно, что существенно отличны от нуля лишь элементы матрицы $|(D)_{ij}|$, расположенные рядом с диагональю. На рис.3,г представлена аналогичная матрица, но уже для $M = 200$. Ясно, что чем больше M – число удерживаемых членов в разложении функции медленной амплитуды пучков u_l , тем точнее получается решение, но при этом растут вычислительные затраты. Для данного примера, как показывает практика численного моделирования, достаточно взять $M = 100$. Чтобы это продемонстрировать, на рис.3,в и г фиолетовой штриховой линией выделены элементы, стоящие в 40-х столбцах соответствующих матриц (i -й столбец соот-

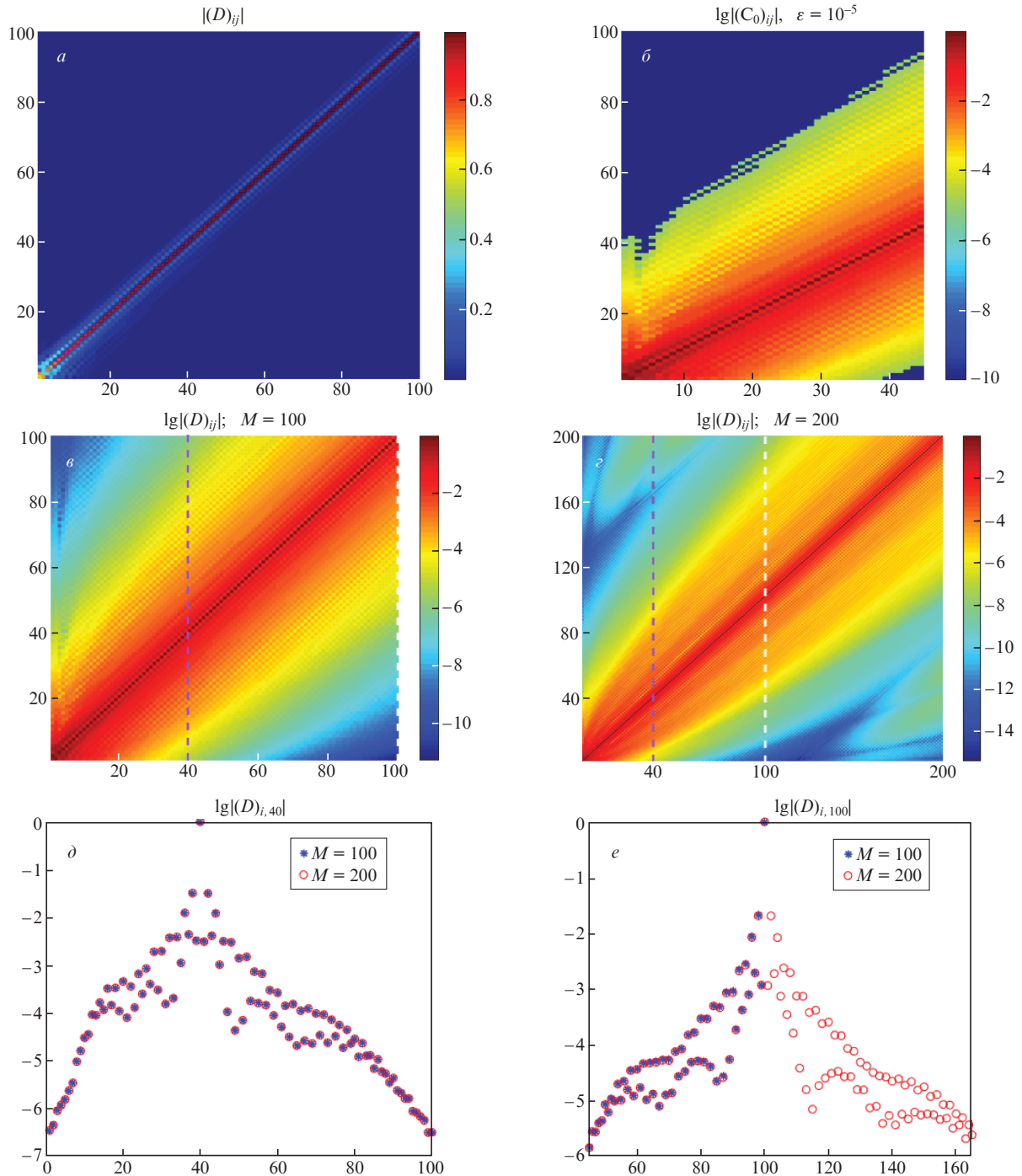


Рис.3. Матрица $|(D)_{ij}|$ (а), матрицы $\lg|(D)_{ij}|$, $\lg|(D)_{i,40}|$ и $\lg|(D)_{i,100}|$ при $M = 100$ и 200 (в-е), а также матрица $|(C_0)_{ij}|$, у которой отображены только элементы, превышающие ϵ (б).

ветствует коэффициентам разложения по гауссовым функциям $\varphi_n(x, z)$ i -го пучка, см. разд.2), а на рис.3,д нанесены указанные элементы из обеих матриц. Видно, что они с хорошей точностью совпадают, а значит, можно считать, что для описания распространения 40-го пучка в данном потенциале V_0 подходит $M = 100$. В то же время на примере 100-х столбцов матриц, изображённых на рис.3,в и z белой штриховой линией и отображённых на рис.3,е, можно видеть, что для 100-го пучка $M = 100$ является недостаточным, поскольку при $M = 200$ появляются дополнительные коэффициенты разложения, существенно отличные от нуля. Это происходит из-за того, что, как уже отмечалось, коэффициенты, существенно отличные от нуля при достаточно слабых потенциалах, располагаются вблизи диагонали – как выше неё, так и ниже, а у последних столбцов в принципе мало элементов над диа-

гональю, и их может не хватить для корректного описания распространения этих пучков. Значит, последние столбцы матрицы $|(D)_{ij}|$ содержат некорректные данные. Чтобы понять, сколько последних столбцов нужно отбросить, введём границу отсечения ε . Так, на рис.3,б отображены первые 45 столбцов матрицы $\lg|(D)_{ij}|$ при $M = 100$ (рис.3,в), причём только те их элементы, которые больше $\varepsilon = 10^{-5}$. Если добавить ещё, скажем, 10 столбцов, то для последних из них высоты $M = 100$ будет уже недостаточно, чтобы учесть все элементы больше ε . Таким образом, выберем $L = 45$, поскольку при данном подходе и для заданных параметров эти столбцы будут с хорошей точностью описывать распространение первых 45 пучков, и, значит, на рис.3,б отображена матрица $\lg|(C_0)_{ij}|$ (см. текст после формулы (29)). Отметим также, что при выбранных параметрах выполняется неравенство (13), т.к. $ML =$

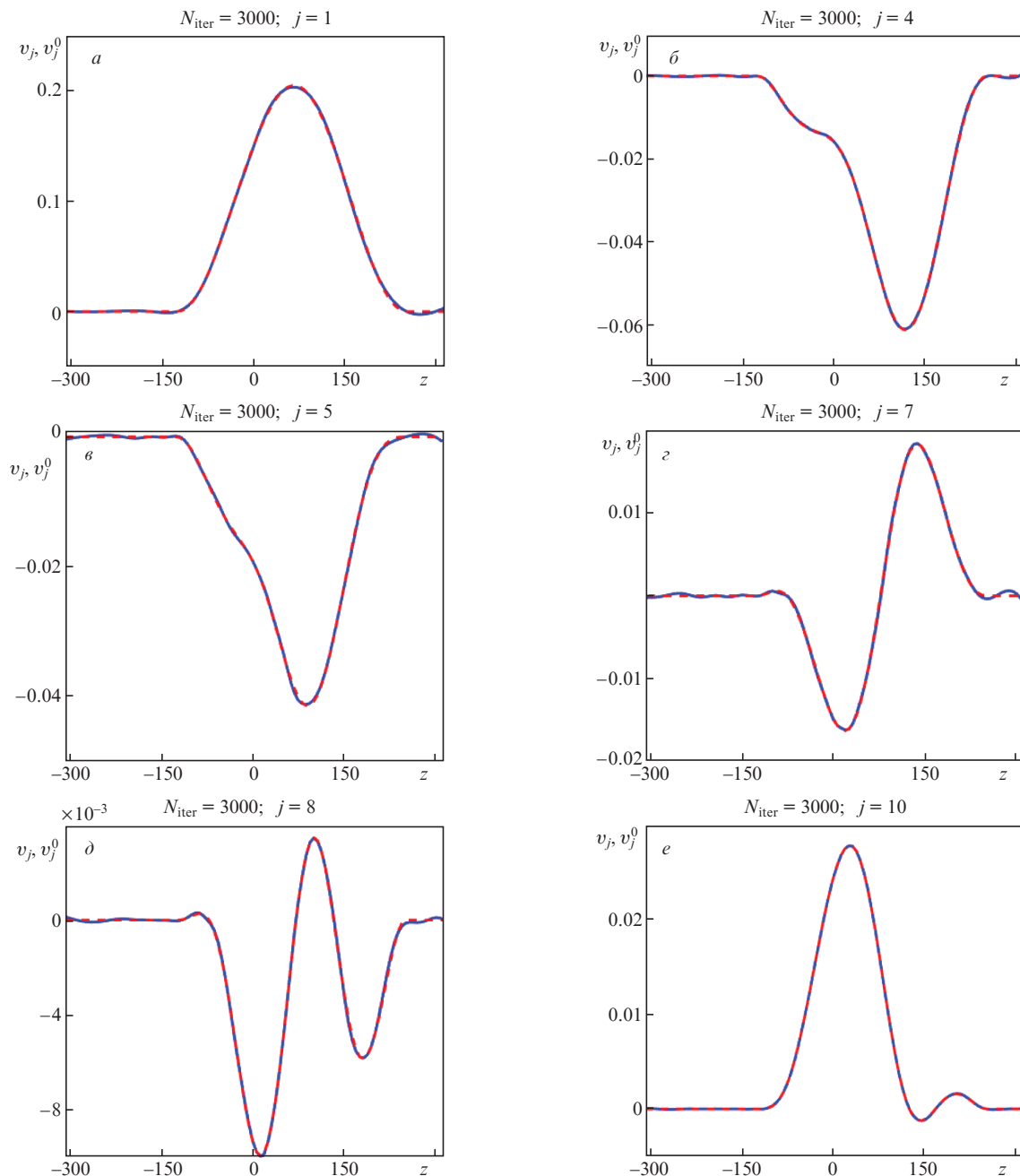


Рис.4. Функции $v_j(z)$, найденные методом градиентного спуска для различных j (красной штриховой кривой показаны функции $v_j^0(z)$, синей – функция $v_j(z)$ на данной итерации). Число итераций $N_{\text{iter}} = 3000$.

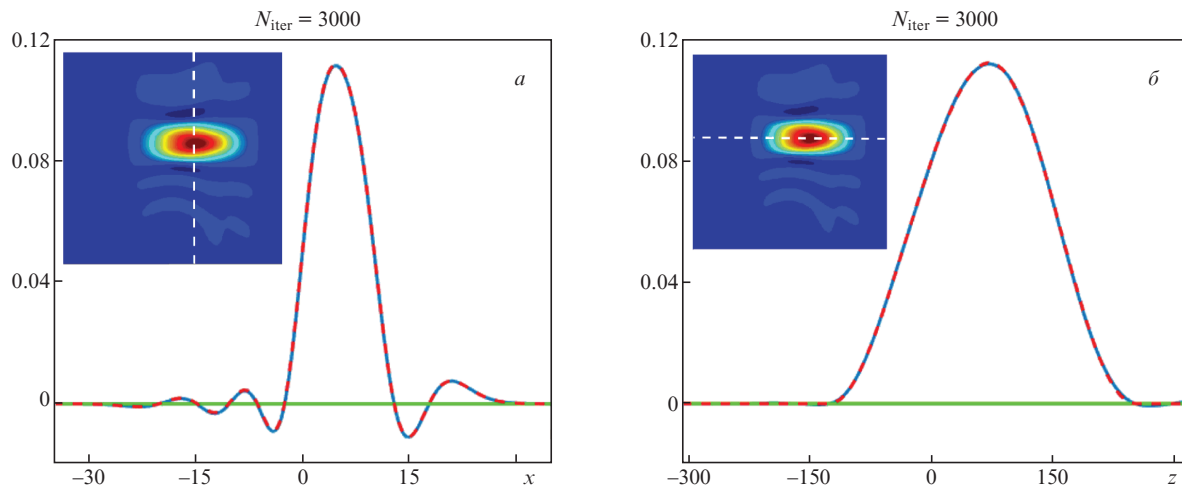


Рис.5. Сравнение срезов тестового потенциала (красные штриховые кривые) и потенциала, найденного в результате решения обратной задачи (синие кривые); зелёной линией показано стартовое значение $V(x, z) = 0$ для работы метода градиентного спуска.

4500, $SJ = 1000$ (ML – число уравнений в матричном равенстве (12), SJ – число неизвестных в нём).

Итак, матрица C_0 по формуле (20) полностью определена, после чего можно переходить к решению обратной задачи. Как было отмечено выше, обратная задача решалась методом градиентного спуска, применённого к функции невязки $F(v)$, определяемой формулой (22). После проведения расчётов были получены результаты, представленные на рис.4–6. Если подходить более детально, использовался метод сопряжённых градиентов,

алгоритм Флетчера–Ривса [15]; при этом было выполнено $N_{iter} = 3000$ итераций. В качестве стартового был задан потенциал, равный нулю. На рис.4 показаны найденные функции проекций потенциала $v_j(z)$, всего $J = 10$ (с целью экономии представлены шесть из них). Видно, что в результате удалось с хорошей точностью получить соответствующие проекции $v_j^0(z)$ тестового потенциала $V_0(x, z)$. На рис.5 приведены срезы полученного и тестового потенциалов, они также хорошо совпадают. На рис.6 для примера показан ход восстановления проекции $v_8(z)$

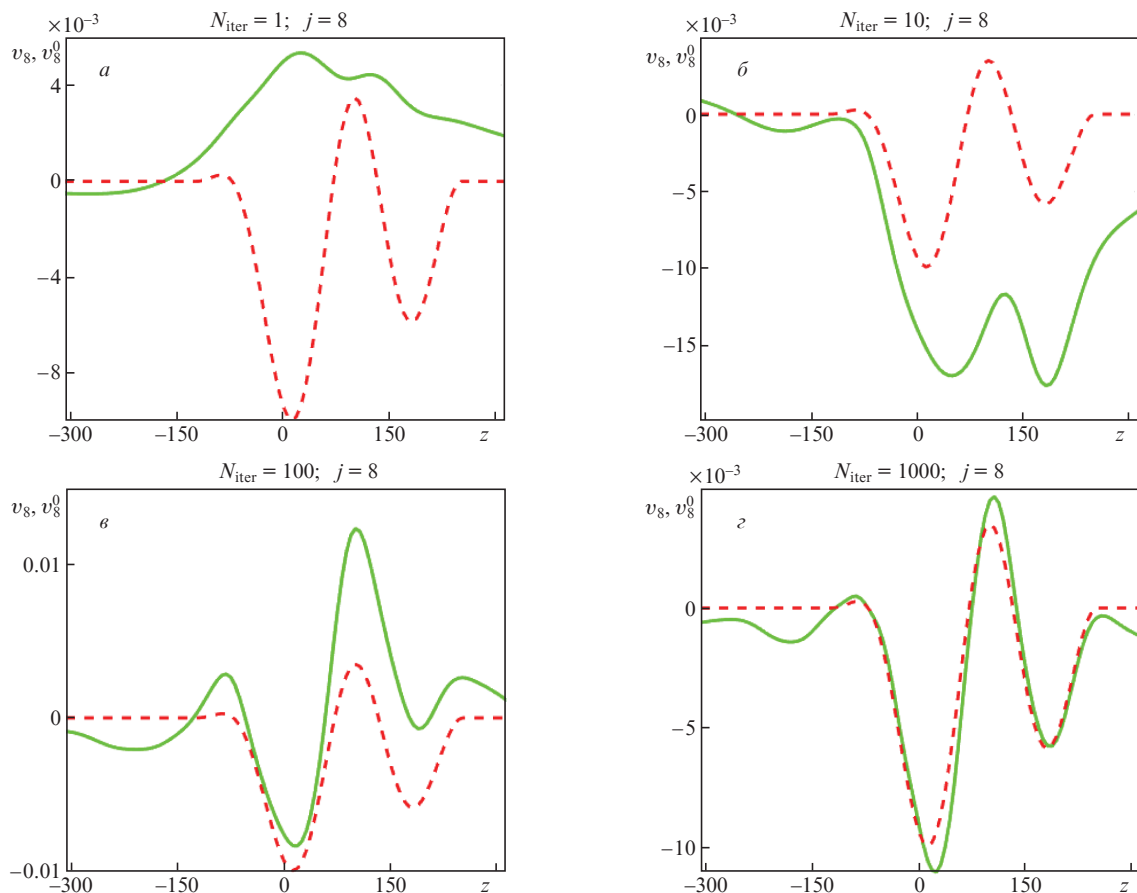


Рис.6. Иллюстрация сходимости функции $v_8(z)$ к тестовой $v_8^0(z)$ ($j = 8$) при работе метода градиентного спуска в зависимости от числа итераций (красной штриховой кривой показана функция $v_8^0(z)$, зелёной – функция $v_8(z)$ на данной итерации).

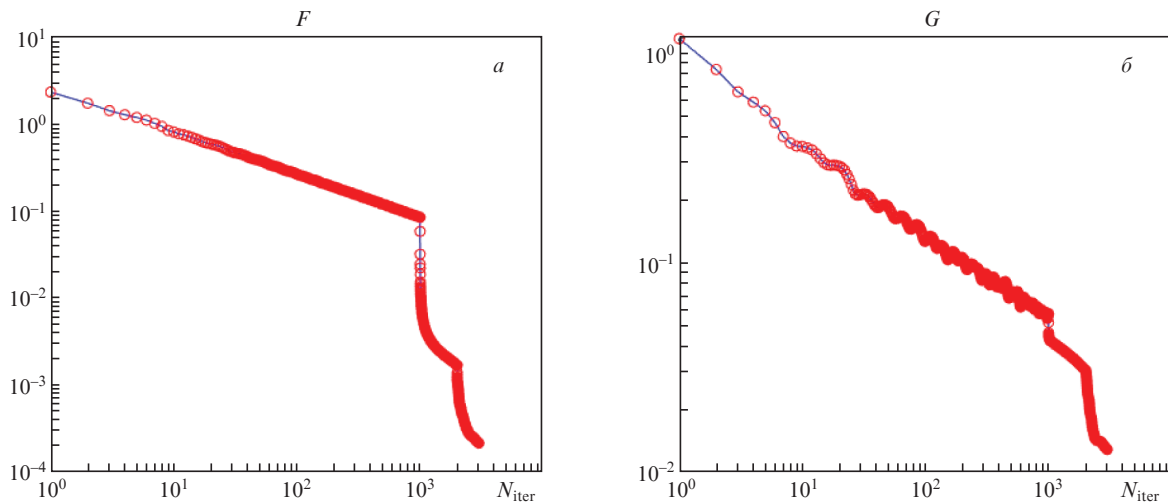


Рис.7. Графики сходимости по функции невязки $F(v)$ (а) и к заданному потенциалу $G(v)$ (б) от номера итерации.

выбранным методом градиентного спуска для $N_{\text{iter}} = 1, 10, 100$ и 1000 ($N_{\text{iter}} = 3000$ соответствует рис.4,е).

В завершение приведём графики функции невязки $F(v)$ и функции $G(v)$,

$$G(v) = \sqrt{\sum_{s=1}^S \sum_{j=1}^J |v_{s,j} - v_{s,j}^0|^2}, \quad (31)$$

от номера итерации; функция $G(v)$ характеризует отклонение потенциала на данной итерации от тестового (рис.7). Скачки функции $F(v)$ после N_{iter} , кратных 1000, связаны с особенностями работы метода сопряжённых градиентов, поскольку число переменных в данном случае также равно 1000.

В итоге можно сказать, что методом градиентного спуска удалось восстановить заданный потенциал с хорошей точностью.

5. Заключение

Подведём итог этой и предшествующим работам [10, 11] по одноракурсной 3D визуализации – методу исследования внутренней структуры трёхмерных объектов. Метод основан на обработке дифракционных картин (сканов), полученных при просвечивании объекта когерентными пучками. Подразумевается, что зондирующие пучки (гауссовы, бесселевы и т.п.) описываются известными решениями ПВУ. Преимущества данного метода по сравнению с традиционной томографией связаны с более точным описанием материалов и излучения. Для материалов – это комплексная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(x, y, z)$, вместо используемого в томографии коэффициента поглощения $\kappa(x, y, z) = (\omega/c)\text{Im}\varepsilon(x, y, z)$, где $\omega = 2\pi c/\lambda$, λ – длина волны; для излучения – это одноракурсная визуализация, использующая, подобно дифракционной томографии [7–9], волновую теорию вместо лучевой. Отметим, что, помимо упомянутых выше преимуществ, одноракурсная 3D визуализация не требует вращения или перемещений объекта и источника.

Суть метода заключается в разложении проходящего через объект поля и диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x, y, z)$ по выбранной системе пучков с последующей за-

меной потенциала кусочно-непрерывной функцией в направлении распространения пучков. Тогда волновое уравнение (2) на каждом шаге дискретизации переходит в систему обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, допускающую точное решение. Таким образом, решение прямой задачи распространения излучения через объект получается в компактном матричном виде.

В обратной задаче – восстановление $\varepsilon(x, y, z)$ – распределение поля за объектом, как и падающего пучка, считается известным. В этом случае полученные матричные соотношения между полями используются как нелинейные уравнения для нахождения диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x, y, z)$. Пример их численного решения в двумерном случае для действительного тестового распределения $\varepsilon(x, z)$ приведён в разд.4.

Авторы признательны Е.В.Паркевичу за обсуждение вопросов, затронутых в работе.

1. Pfeiffer F. *Future Photonics*, **12** (1), 9 (2018).
2. Rodenburg J., Maiden A., in *Springer Handbook of Microscopy*. P.W.Hawkes, J.C.H.Spence (Eds) (2019), pp 819–904.
3. Попов Н.Л., Артюков И.А., Виноградов А.В., Протопопов В.В. *УФН*, **190** (8) (2020). DOI: 10.3367/UFNe.2020.05.038775.
4. Anitha V., Beohar A., Nella A. *Plasmonics*, **18** (2), 441 (2023).
5. Lyubomirskiy M., Wittwer F., Kahnt M., et al. *Sci. Rep.*, **12** (1), 6203 (2022).
6. Li T., Kahnt M., Sheppard T.L., et al. *Adv. Sci.*, **11** (30), 2310075 (2024).
7. Wolf E. *Opt. Commun.*, **1** (4), 153 (1969).
8. Wolf E. *Trends Opt.*, **83**, 110 (1996).
9. Omori N.E., Bobitan A.D., et al. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, **381** (2259), 20220350 (2023).
10. Artyukov I.A., Busarov A.S., Popov N.L., Vinogradov A.V. *J. Russ. Laser Res.*, **45** (3), 278 (2024).
11. Бусаров А.С., Виноградов А.В., Попов Н.Л., Артюков И.А. *Квантовая электроника*, **54** (9), 553 (2024).
12. Виноградов А.В., Брытов И.А., Грудский А.Я., Кожевников И.В., Слемзин В.А. *Зеркальная рентгеновская оптика*. Под ред. А.В.Виноградова (Л.: Машиностроение, 1989).
13. Attwood D. *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications* (Cambridge University Press, 2000).
14. *X-Ray Data Booklet* (LBNL, Univ. California, 2001).
15. Гасников А.В. *Современные численные методы оптимизации. Метод универсального градиентного спуска* (М.: Изд-во МЦНМО, 2021).