

Inverse und schlecht gestellte Probleme

Jan-F. Pietschmann, Frank Wübbeling

Wintersemester 2010/2011

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Beispiel: Transportgleichung ???	3
1.2	Beispiel: Differenzieren als inverses Problem	4
1.3	Beispiel: Inverse Wärmeleitungsgleichung	8
1.4	Beispiel 4: Parameteridentifikation	9
1.4.1	Beispiel 5: Entrauschen von Bildern	10
1.4.2	Beispiel 6: Laplace Gleichung auf Kreis und Ring	11
2	Grundlagen	14
2.1	Varallgemeinerte Inverse	17
2.2	Kompakte, lineare Operatoren	20
2.3	Singulärwertzerlegung	24
3	Regularisierungstheorie	28
3.1	Konstruktion von Regularisierungsmethoden	31
3.2	Konvergenzraten	35
4	Inverse Probleme der Integralgeometrie	38
4.1	Radon: Ein erstes Beispiel	38
4.2	Funktionalanalytische Grundlagen und Radontransformation	42
4.2.1	Fourier–Analyse	42
4.2.2	Temperierte Distributionen	48
4.2.3	Radon–Transformation	53
4.2.4	Sobolev–Abschätzungen für die Radontransformation	62
4.3	Implementation	64
4.3.1	Shannons Abtasttheorem für bandbeschränkte Funktionen	65
4.3.2	Implementation der gefilterten Rückprojektion	69
4.4	Was fehlt?	74
5	Iterative Methoden	75
5.1	Landweber-Methoden	75
5.2	Newton-artige Methoden	81
5.3	Iterative Methods als Zeit-Diskrete Flüße (time-discrete flows)	82

5.4	Konjugierte-Gradienten-Verfahren	83
5.5	Konjugierte Gradienten (Frank)	84
5.5.1	Krylovraumverfahren	84
5.5.2	CG für schlecht gestellte Probleme	85
5.6	Kaczmarz–Methoden	86
5.7	Iterative Methoden für die Computertomographie	90
5.8	EM–Verfahren und statistische Methoden	91
5.8.1	Poisson–Verteilung und Emissionstomographie	92
5.8.2	Statistische Regularisierung: Bayes–Schätzer für die Normalverteilung	94
5.8.3	Statistische Regularisierung: Maximum Likelihood und EM–Verfahren für die Poissonverteilung	96
6	Parameter Identifikation	97

Kapitel 1

Einleitung

In dieser Vorlesung behandeln wir analytische und numerische Aspekte von inversen bzw. schlecht gestellten inversen Problemen. Ein inverses Problem ist dabei immer invers im Bezug auf ein direktes Problem zu sehen. Dabei ist a priori nicht klar, welches der beiden Probleme das direkt und welches das inverse ist. In vielen Fällen ist direkte Problem jedoch physikalisch motiviert. Wie wir werden im Laufe der Vorlesung sehen werden hat das inverse Probleme ... schlechte Eigenschaften ...

1.1 Beispiel: Transportgleichung ???

Sei $u(x, \theta, t)$ die Anzahl von Teilchen im Punkt x zur Zeit t , die sich in Richtung θ bewegen.

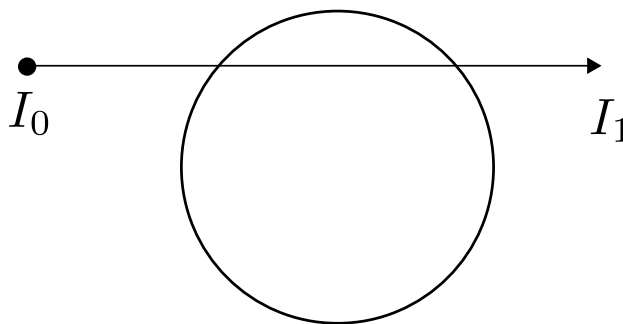


Abbildung 1.1: Blub

$$\frac{1}{c} \frac{u(x + c\Delta t, t + \Delta t) - u(x + c\Delta t, t)}{\Delta t} = \frac{u(x, t) - u(x + c\Delta t, t)}{c\Delta t}$$

Für $\Delta t \rightarrow 0$ folgt

$$\frac{1}{c} u_t = -u_x$$

also

$$u_t + cu_x = 0$$

Stationär:

$$u_x = 0$$

Beispiele: SAR, Streuung

1.2 Beispiel: Differenzieren als inverses Problem

In diesem Abschnitt folgen wir im wesentlichen der Präsentation aus [4, Kapitel 1.1].

Es mag überraschen aber das Ableiten einer Funktion ist ein klassisches Beispiel eines inversen Problems. Ableiten ist in diesem Zusammenhang invers Bezug zur Integration einer Funktion, dem direkten Problem. Betrachten wir zunächst folgendes Beispiel: Sei $f \in \mathcal{C}^1([0, 1])$ und $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$. Damit definieren wir die Funktion

$$f_n^\delta(x) := f(x) + \delta \sin\left(\frac{nx}{\delta}\right), \quad x \in [0, 1], \quad (1.1)$$

d.h. wir versehen f mit einer Sinusförmigen Störung mit Frequenz n . Offensichtlich gilt

$$\|f - f_n^\delta\|_{L^\infty((0,1))} \leq \delta.$$

Betrachten wir nun die Ableitung von f_n^δ gegeben durch

$$(f_n^\delta)'(x) = f'(x) + n \cos\left(\frac{nx}{\delta}\right), \quad x \in [0, 1],$$

so gilt jedoch

$$\|f' - (f_n^\delta)'\|_{L^\infty((0,1))} = n.$$

Wir interpretieren dieses Ergebnis wie folgt: Egal, wie klein die Störung von f (also δ) ist, der Fehler beim Differenzieren beträgt immer n und kann damit beliebig groß werden. Mit anderen Worten: Bezüglich der L^∞ -Norm hängt die Ableitung $(f_n^\delta)'$ nicht stetig von den Daten (f_n^δ) ab. Dieses, für viele inverse Probleme charakteristische, Verhalten ist von großer Bedeutung für praktische Probleme jedweder Art, da gemessene Daten immer einen Fehler enthalten. Zum Vergleich betrachten wir nun die Situation in der \mathcal{C}^1 -Norm: Wir erhalten

$$\|f - (f_n^\delta)\|_{\mathcal{C}^1([0,1])} \leq \delta^2. \quad (1.2)$$

Für die Differenzen der Ableitungen ergibt sich damit trivialerweise

$$\|f' - (f_n^\delta)'\|_{L^\infty((0,1))} = \delta.$$

Dieses Ergebnis ist nicht verwunderlich: Durch Gleichung (1.2) geben wir bereits eine Schranke und die Funktion f' vor, die wir eigentlich bestimmen wollen. Diese Annahme ist für praktische Problem natürlich völlig unrealistisch. Es wird jedoch deutlich, dass das Verhalten des inversen Problems immer von der Norm abhängt, in der es betrachtet wird. Wir werden auf diesen Aspekt später zurückkommen.

Funktionalanalytische Sichtweise

Das Differenzieren der Funktion $f \in \mathcal{C}^1([0, 1])$ ist nichts anderes als das Lösen der folgenden Integralgleichung erster Art

$$(Kx)(s) := \int_0^s x(t) dt = f(s) - f(0), \quad (1.3)$$

denn für die Lösung x gilt offensichtlich $x = f'$. Wir betrachten K definiert in (1.3) als einen Operator definiert auf $f \in \mathcal{C}([0, 1])$. Dieser Operator ist stetig, linear und injektiv und seine Inverse, definiert auf $f \in \mathcal{C}^1([0, 1])$, ist unbeschränkt.

Die Anwendung des Operators auf eine Funktion ist eine Operation mit glättenden Eigenschaften ist, d.h. Oszillationen mit hoher Frequenz (z.B. $n \cos\left(\frac{nx}{\delta}\right)$ für großes n) werden gedämpft (zu $\delta \sin\left(\frac{nx}{\delta}\right)$). Daher erscheinen sie jedoch auch kaum in den Daten, in diesem Fall der Funktion f . Dies ist ein generelles Phänomen: Hat das direkte Problem glättende Eigenschaften rufen kleine Störungen in den Daten Oszillationen in der Lösung des zugehörigen inversen Problems hervor. Für unser konkretes Beispiel stellt sich die Frage: Unter welchen Umständen ist es trotzdem möglich, die Ableitung einer (mit einem Fehler behafteten) Funktion zu berechnen?

Regularisierung durch Diskretisierung

Nachdem wir nun einige Probleme bei der Differentiation von Daten genauer analysiert haben wenden wir uns den praktischen Aspekten dieses Problems zu und betrachten die Approximation der Ableitung einer Funktion $f \in \mathcal{C}^2$ durch einen zentralen Differenzenquotienten (s. [18]):

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \mathcal{O}(h),$$

falls $f \in \mathcal{C}^3$, dann gilt sogar

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \mathcal{O}(h^2),$$

d.h. die Genauigkeit der Approximation durch den zentralen Differenzenquotienten hängt von der Glattheit der exakten Daten f ab. Betrachten wir nun die Situation für unsere gestörte Funktion (1.1). Es gilt:

$$\frac{f^\delta(x+h) - f^\delta(x-h)}{2h} \sim \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \frac{\delta}{h},$$

der Fehler der Approximation beträgt also

$$\mathcal{O}(h^\nu) + \frac{\delta}{h},$$

mit $\nu = 1$ falls $f \in \mathcal{C}^2$ und $\nu = 2$ falls $f \in \mathcal{C}^3$. Dies bedeutet dass der Fehler, der durch die Störung verursacht wird, für großes h beliebig klein wird. Auf der anderen Seite wird dann jedoch der Diskretisierungsfehler beliebig groß. Es gibt daher eine optimale Gitterweite h_0 für die der Fehler minimal wird. Dies ist schematisch in Abbildung 5.1 dargestellt, wegen ihrer Form wird diese Funktion auch als L -curve bezeichnet. Der Fehler wird minimal, wenn man

$$h \sim \delta^\mu$$

wählt. Für $\mu = 1/2$ bzw. $\mu = 1/3$ erhält man also $\mathcal{O}(\sqrt{\delta})$ bzw. $\mathcal{O}(\delta^{2/3})$ (für $f \in \mathcal{C}^2$ bzw. $f \in \mathcal{C}^3$).

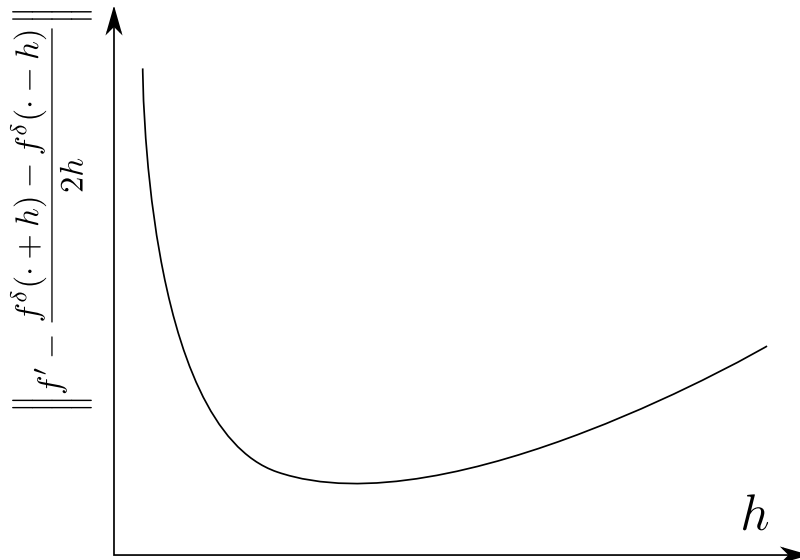


Abbildung 1.2: Fehler aufgetragen gegen Gitterweite h

Tikhonov Regularisierung

Ein alternativer Ansatz besteht darin, vor dem Ableiten zuerst eine Approximation der Daten mit besseren Eigenschaften zu berechnen, z.B. als Minimum des

folgenden Funktional:

$$f_\epsilon := \operatorname{argmin} \mathcal{J}(f) = \frac{1}{2} \|f - (f_n^\delta)\|_{L^2((0,1))} + \frac{\epsilon}{2} \|f'\|_{L^2((0,1))}.$$

Wir suchen also eine Funktion f^ϵ , die nahe bei den Daten ist und zusätzlich eine “vernünftige” (hier eine mindestens beschränkte L^2 -Norm) Ableitung besitzt. Die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für ein Minimum dieses Funktional lauten

$$0 = \left. \frac{d}{d\kappa} \mathcal{J}(f + \kappa g) \right|_{\kappa=0} = \int_0^1 (f^\epsilon - f^\delta)g + f'g' \, dx$$

Dies ist nicht anderes als die schwache Formulierung der (elliptischen) partiellen Differentialgleichung

$$-\epsilon(f_\epsilon)'' + f_\epsilon = f^\delta. \quad (1.4)$$

Uns interessiert der Fehler in der Ableitung $u = f_\epsilon - f$. Einsetzen in (1.4) ergibt

$$-\epsilon u'' + u = f^\delta - f + \epsilon f''.$$

Multiplizieren wir die Gleichung mit u und integrieren erhalten wir

$$\epsilon \int_0^1 (u')^2 \, dx + \int_0^1 u^2 \, dx = \int_0^1 (f^\delta - f + \epsilon f'')u \, dx.$$

Mit Hilfe der Hölder-Ungleichung folgt (da der erste Term auf der linken Seite positiv ist)

$$\left(\int_0^1 u^2 \, dx \right)^{1/2} \leq \left(\int_0^1 (f^\delta - f + \epsilon f'') \, dx \right)^{1/2}$$

Wieder mit der Hölder-Ungleichung folgern wir daher

$$\begin{aligned} \epsilon \int_0^1 (u')^2 \, dx &\leq \|f^\delta - f + \epsilon f''\|_{L^2((0,1))} \\ &\leq \|f^\delta - f\|_{L^2((0,1))} + \|\epsilon f''\|_{L^2((0,1))} \leq \delta^2 + \epsilon^2 M, \quad \text{mit } M := \|f\|_{C^2([0,1])} \end{aligned}$$

Teilen wir durch ϵ und wählen $\epsilon = \epsilon(\delta) = \frac{\delta}{M}$ so erhalten wir schließlich

$$\|u'\|_{L^2((0,1))}^2 \leq C\delta$$

und damit

$$\|f'_\epsilon - f\|_{L^2((0,1))} = \mathcal{O}(\sqrt{\delta}) \rightarrow 0 \text{ as } \delta \rightarrow 0.$$

- Bemerkung 1.2.1.** 1. Die obige Rechnung funktioniert nur, wenn wir annehmen, dass die ungestörten Daten f zweimal stetig differenzierbar sind. Dies ist natürlich im Allgemeinen nicht klar.
2. Um die Konvergenz für $\delta \rightarrow 0$ zu erreichen, mussten wir den Parameter ϵ in Abhängigkeit von δ wählen. Wir werden später zeigen dass dies essenziell ist.

1.3 Beispiel: Inverse Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung

$$u_t = u_{xx}, \quad x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}^+.$$

Das direkte Problem ist wie folgt definiert (vgl. [5, 3]):

DP: Es sei $u_0 \in \mathcal{C}(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$ gegeben, so das $u(x, 0) = u_0(x)$.
Bestimme $u(x, t)$ für alle $x \in \mathbb{R}, t > 0$.

In einer Ortsdimension können wir das Problem explizit durch Separation der Variablen lösen. Mit dem Ansatz $u(x, t) = u_1(x)u_2(t)$ ergibt sich

$$u_1(x)u_2'(t) = u_1''(x)u_2(t) \quad \text{also} \quad \frac{u_1''(x)}{u_1(x)} = \frac{u_2'(t)}{u_2(t)} = \text{const} =: -k^2.$$

Es ergeben sich daher Lösungen der Form

$$u(x, t) = e^{-k^2 t} (c_1 \sin(kx) + c_2 \cos(kx)).$$

Lösungen der Wärmeleitungsgleichung haben also glättende Eigenschaften, insbesondere für hohe Frequenzen k , und wir erwarten daher für das inverse Problem definiert als

IP: Geben sei $u_T(x)$ für ein festes $T \in \mathbb{R}$, so das $u(x, T) = u_T(x)$.
Bestimme $u(x, t)$ für alle $x \in \mathbb{R}, t < T$.

die gleichen Schwierigkeiten wie in Beispiel 1.2. Um das inverse Problem zu lösen, müssen wir also die Wärmeleitungsgleichung rückwärts in der Zeit betrachten. Es ergibt sich

$$u(x, t) = e^{+k^2(T-t)} (c_1 \sin(kx) + c_2 \cos(kx)).$$

Durch den Faktor $e^{+k^2(T-t)}$ werden Störungen mit hoher Frequenz verstärkt, es gilt insbesondere

$$\|u\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} \rightarrow \infty \quad \text{as} \quad k \rightarrow \infty,$$

d.h. der inverse Operator ist unbeschränkt und daher unstetig.

1.4 Beispiel 4: Parameteridentifikation

Ein weiteres wichtiges Beispiel für ein inverses Problem ist die Identifikation (oder Rekonstruktion) eines Parameters in einer Differentialgleichung. Als Beispiel betrachten wir wieder die Wärmeleitungsgleichung, diesmal mit einem ortsabhängigen Koeffizienten:

$$u_t = \operatorname{div}(a(x)\nabla u), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n, \quad 0 < t < T, \quad (1.5)$$

mit Anfangswert $u(x, 0) = u_0(x)$. Das direkte Problem besteht wieder aus der Lösung dieser Differentialgleichung nach u bei gegebenem $a(x)$. In vielen praktischen Problemen ist der Koeffizienten $a(x)$ jedoch nicht bekannt (z.B.). In diesen Fällen interessiert und das folgende, inverse Problem:

IP: Sei $\Omega_M \subset \Omega \times [0, T]$ und sei die Lösung $u(x, t)$ von (1.5) bekannt für alle $(x, t) \in \Omega_M$. Bestimme aus diesen Messungen $a(x)$.

In vielen Anwendungen ist Ω_M der Rand des Gebietes Ω . Analysieren wir das stationäre Problem in einer Dimension genauer: Es gilt

$$-(a(x)u_x)_x = f, \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}, \quad (1.6)$$

Wir wollen $a(x)$ auf den verrauschten Daten

$$u^\delta(x) = u(x) + n^\delta(x), \quad x \in \Omega,$$

rekonstruieren, wobei wieder $\|n^\delta\|_{L^2} \leq \delta$ gilt. Hat das direkte Problem eine eindeutige Lösung, macht es Sinn die *parameter-to-solution* Abbildung $a \mapsto u_a$ zu definieren, wobei u_a die Lösung von (1.6) bezeichnet. Integration der Gleichung bezüglich x liefert

$$a(x) \frac{du}{dx}(x) = \int_0^x f(y) dy,$$

d.h. $a(x)$ ist eindeutig bestimmt für alle x mit $\frac{du}{dx}(x) \neq 0$. Diese Bedingung ist in vielen Anwendungen erfüllt, ist z.B. $f(x) \neq 0$ offenem Intervall $I \subset [0, 1]$ so gilt

$$0 = \frac{d}{dx} \left(a(x) \frac{du}{dx}(x) \right) = f(x), \quad x \in I,$$

und damit existiert kein offenes Intervall $I \subset [0, 1]$ in dem $\frac{du}{dx}$ verschwindet. Die resultierende Lösungsformel

$$a(x) = \frac{\int_0^x f(y) dy}{\frac{du}{dx}(x)}$$

zeigt, dass neben der Probleme, die durch das Differenzieren der Daten auftreten (lineares Problem) auch blubbbbbb. Interessant in diesem Kontext sind Stabilitätsabschätzungen, mit deren Hilfe die Stetigkeit des inverses Operators auf speziellen Teilmengen gezeigt werden kann. Als Beispiel betrachten wir die kompakte Teilmenge

$$\mathcal{C}_{\gamma,M} = \left\{ u \in \mathcal{C}^2([0,1]) \mid \|u\|_{\mathcal{C}^2} \leq M, \frac{du}{dx} \geq \gamma > 0 \text{ in } [0,1] \right\}.$$

Bezeichnen wir mit u_j die Lösung von (1.6) zur Funktion $a_j(x)$, $j = 1, 2$. Aus der obigen Inversionsformel erhalten wir für die Differenz der beiden Lösungen

$$a_1(x) - a_2(x) = \frac{\int_0^x f(y) dy}{\frac{du_1}{dx}(x) \frac{du_2}{dx}(x)} \left(\frac{du_2}{dx}(x) - \frac{du_1}{dx}(x) \right).$$

und damit

$$\|a_1 - a_2\|_{L^2((0,1))}^2 \leq \frac{\left(\int_0^x f(y) dy\right)^2}{\gamma^4} \|a_1 - a_2\|_{L^2((0,1))}^2$$

Mit Hilfe partieller Integration und der Cauchy-Schwarz Ungleichung erhalten wir damit blub

TODO

blub

$$\|a_1 - a_2\|_{L^2} \leq \frac{\|f\|_{L^1}}{\gamma^2} \sqrt{2M} \|u_1 - u_2\|_{L^2}^{1/2},$$

der inverse Operator $G : u \in \mathcal{C}_\gamma \rightarrow a$ ist also Hölder-stetig mit Exponent $\frac{1}{2}$ in der L^2 -norm.

1.4.1 Beispiel 5: Entrauschen von Bildern

Zwei grundlegende Probleme in der mathematischen Bildgebung sind das Entrauschen und das Entzerren von Bildern. Beim Entrauschen ist die Aufgabe das Originalbild u aus verrauschten Messungen

$$f^\delta(x) = u(x) + n^\delta(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2,$$

zu rekonstruieren. Wir nehmen wieder an, dass für die Störungen

$$\|n^\delta(x)\|_{L^2(\Omega)} \leq \delta$$

gilt. Unser Ziel ist die Berechnung einer Rekonstruktion die wichtige Eigenschaften des Originalbildes u erhält (z.B. Kanten). Da Kanten im Zusammenhang zu Ableitungen stehen ist das Problem schlecht gestellt in der gleichen Weise wie die numerische Differenziation von Daten.

Beim Entzerren sind die Daten mit dem ursprünglichen Bild durch einen linearen Integraloperator verknüpft:

$$f^\delta(x) = Ku := \int_{\Omega} k(x, y)u(y) dy + n^\delta(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2. \quad (1.7)$$

Unser Ziel ist wieder die Rekonstruktion von u . Ein typisches Modell für den Integralkern (in diesem Zusammenhang auch *point-spread-function* genannt) ist

$$k(x, y) = c \exp\left(-\frac{|x - y|^2}{\sigma}\right),$$

also eine Gauß-Verteilung. Je größer die Konstante σ gewählt wird desto breiter wird die Gauß-Verteilung und desto stärker wird über das Ursprungsbild gemittelt. Da bei diesem Mittelungsprozess Informationen verloren gehen erwarten wir auch hier Probleme bei der Rekonstruktion des Ursprungsbildes u . Aus mathematischer Sicht handelt es sich bei K definiert in (1.7) um einen kompakten, linearen Operator und wir werden später sehen (Satz 2.2.4), das dessen Inverse unstetig ist.

1.4.2 Beispiel 6: Laplace Gleichung auf Kreis und Ring

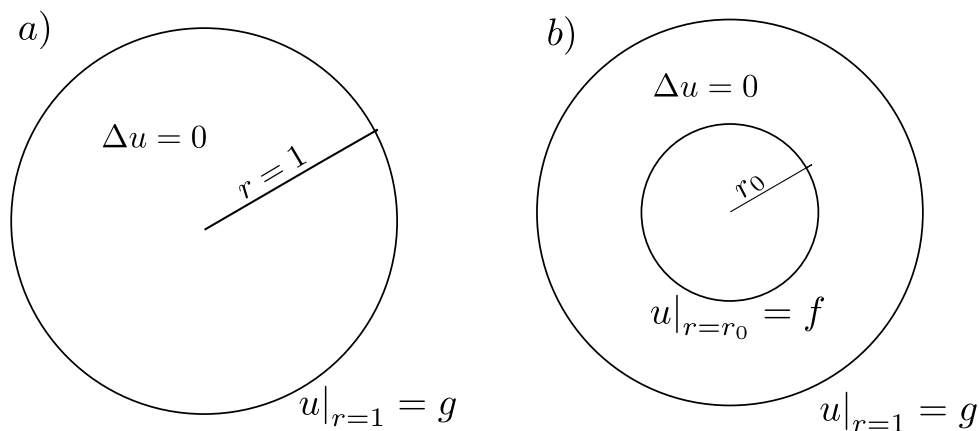


Abbildung 1.3: a) Die Laplace-Gleichung auf dem Einheitskreis, b) Die Laplace-Gleichung auf dem Ring.

Wir betrachten zunächst die Laplace Gleichung

$$\Delta u = 0, x \in \Omega, \quad u|_{\partial\Omega} = g,$$

auf dem Kreis $\Omega = B_1(0) := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \leq \sqrt{x^2 + y^2} < 1\}$. Zur Lösung schreiben wir die Gleichung zunächst in Polarkoordinaten um, d.h.

$$u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + u_{\phi\phi} = 0 \quad \text{auf } B_1(0).$$

Wir entwickeln die gesuchte Funktion in eine Fourierreihe $u(r, \phi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} u_k(r) e^{ik\phi}$ und erhalten durch Einsetzen

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(u_k''(r) + \frac{1}{r} u_k'(r) - k^2 u_k(r) \right) e^{ik\phi} = 0$$

Das Lösen der gewöhnlichen Differentialgleichung für u_k liefert $u_k(r) = a_k r^{|k|} + b_k r^{-|k|}$. Da wir zweimal stetig differenzierbare Lösungen suchen und $r < 1$ gilt $b_k = 0$. Randwerte

$$u(1, \phi) = a_k(r) e^{ik\phi} = g(\cos(\phi), \sin(\phi)),$$

die a_k sind also die Fourierkoeffizienten von g , also

$$a_k = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} g(\cos(\phi'), \sin(\phi')) e^{-ik\phi'} d\phi'.$$

Damit erhalten wir schließlich als Lösung der Laplace-Gleichung

$$u(r, \phi) = \int_0^{2\pi} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \sum_{k \in \mathbb{Z}} r^{|k|}}_{\text{geom. Reihe}} e^{ik(\phi - \phi')} g(\cos(\phi'), \sin(\phi')) d\phi'.$$

Das auswerten der geometrischen Reihe ergibt

$$P(r, \phi, \phi') = \frac{1 - r^2}{1 - 2r \cos(\phi - \phi') + r^2}.$$

Da das Integral über diese Funktion 1 ist, gilt schließlich

$$\|u\|_{L^\infty((0,1))} \leq \|g\|_{L^\infty((0,1))},$$

die Lösung hängt in diesem Fall also stetig von den Randwerten ab.

Bemerkung 1.4.1. Vom Standpunkt der Theorie partieller Differentialgleichung haben wir hier lediglich das Maximumprinzip für die Laplace-Gleichung für eine spezielle Lösung nachgerechnet, siehe dazu auch [5, Kapitel 2.2.3].

Betrachten wir nun das Gebiet $\Omega_r := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid r_0 \leq \sqrt{x^2 + y^2} < 1\}$ mit $r_0 > 0$. Mit dem gleichen Ansatz wie oben erhalten wir

$$u(r, \phi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(a_k r^{|k|} + b_k e^{-|k|} \right) e^{ik\phi} = 0.$$

Randwerte:

$$0 = \frac{du}{dn} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (k(a_k - b_k)) e^{ik\phi} = 0,$$

also $a_k = b_k$. Randwerte:

$$f(r_0 \cos(\phi), r_0 \sin(\phi)) = u(r_0, \phi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k (r_0^{|k|} + r_0^{-|k|}) e^{ik\phi}$$

also

$$a_k = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{r_0^{|k|} + r_0^{-|k|}} \int_0^{2\pi} f(\phi') e^{-ik\phi'} d\phi'$$

Daher

$$\begin{aligned} g(\cos(\phi), \sin(\phi)) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{2}{r_0^{|k|} + r_0^{-|k|}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\phi') e^{-ik\phi'} d\phi' e^{ik\phi} \\ &= \int_0^{2\pi} k(\phi - \phi') f(\phi') d\phi' \quad \text{mit} \quad k(\phi - \phi') = \sum \frac{1}{r_0^{|k|} + r_0^{-|k|}} e^{-ik(\phi - \phi')} \end{aligned}$$

Da k aus geometrischer Reihe folgt, dass $k \in \mathcal{C}^\infty$.

\Rightarrow Problem schlechtgestellt

Kapitel 2

Grundlagen

Wie wir in den Beispielen in Kapitel 1 gesehen haben, hängt bei vielen inversen Problemen die Lösung nicht stetig von den Daten ab. Wir präzisieren dies durch folgende Definition nach Hadamard, cf. [4, Kapitel 2],

Definition 2.0.2. Seien X, Y Banach- oder Hilberträume und sei $A : X \rightarrow Y$, $y \in Y$. Das Problem $Ax = y$ heißt *gut gestellt* (properly/well posed), wenn folgende drei Eigenschaften erfüllt sind:

- $Ax = y$ ist lösbar für alle $y \in Y$.
- Die Lösung x ist eindeutig.
- Die Lösung hängt stetig von den Daten ab, d.h. aus $y_n \rightarrow y$ folgt $x_n \rightarrow x$, wobei $Ax_n = y_n$ für alle n (oder äquivalent: A^{-1} ist stetig).

Ist eine der drei Eigenschaften nicht erfüllt, so heißt das Problem *schlecht gestellt* (ill-posed).

Bemerkung 2.0.3. Der letzte Punkt in der obigen Definition hängt natürlich von der Norm ab, in dem die Stetigkeit des Operators gemessen wird. Um dies zu verdeutlichen betrachten wir zwei Beispielen

- Betrachten wir wieder den Operator D , der einer Funktion ihre Ableitung zuordnet, also $Df := f'$. Wenn wir als Norm die H^1 -Norm verwenden, also

$$\|f\|_{H^1} := \|f\|_{L^2} + \|f'\|_{L^2},$$

so gilt natürlich

$$\|Df\|_{L^2} = \|f'\|_{L^2} \leq \|f\|_{H^1},$$

der Operator Df ist also stetig in dieser Norm.

- Verallgemeinern wird das obige Beispiel: Sei $A : X \rightarrow Y$ mit den normierten Räumen $(X, \|\cdot\|_X)$ und $(Y, \|\cdot\|_Y)$. Definieren wir nun die Norm

$$\|x\| := \|x\|_X + \|Ax\|_Y,$$

so ist A ein stetiger Operator in dieser Norm, denn es gilt:

$$\|Ax\|_Y \leq \|x\|$$

.

Trotz dieser Bemerkung lassen sich natürlich nicht alle Inversen Probleme durch Wahl einer entsprechenden Norm lösen. Schauen wir uns die Definition der Norm für das Beispiel der Differentiation noch einmal an, so sehen wir, dass die Definition f' enthält, also die gesuchte Funktion, die wir im Allgemeinen natürlich nicht kennen! Für praktische Probleme gilt außerdem:

1. Die Norm, in der der Fehler gemessen wird (die Fehlnorm) ist durch das Problem vorgegeben.
2. Auch die Norm, in der die Qualität des Ergebnisses gemessen wird, ist durch das Problem vorgegeben (z.B. wird es für einen Anwender wenig Sinn machen, wenn der Fehler zwischen exakten und Rekonstruierten Daten in der H^1 -norm klein ist).

Die folgende Definition präzisiert den Begriff schlecht-gestellt für eine bestimmte Klasse von Normen:

Definition 2.0.4 (Ordnung der Schlechtgestellttheit). Seien $(X, \|\cdot\|_X)$ und $(Y, \|\cdot\|_Y)$ zwei normierte Räume und $A : X \rightarrow Y$. Das Problem $Ax = y$ heißt schlechtgestellt von der Ordnung α falls es schlechtgestellt ist bezüglich aller Normen

$$\|f\|_{\tilde{\alpha}} := \int_{|\beta| \leq \tilde{\alpha}} \|D^\beta f\|_X$$

für alle $\tilde{\alpha} < \alpha$ und gut gestellt ist für $\alpha = \tilde{\alpha}$.

Betrachten wir nun ein Beispiel für ein schlechtgestelltes Problem, dass die dritte Bedingung in der Definition verletzt:

Theorem 2.0.5. Sei $\Omega_m \subset \mathbb{R}^m$, $\Omega_n \subset \mathbb{R}^n$ und sei der Operator $A : L^2(\Omega_m) \rightarrow L^2(\Omega_n)$ gegeben durch

$$Af(x) := \int_{\Omega_n} k(x, y) f(y) dy, \quad x \in \Omega_m,$$

wobei k so gewählt ist, dass

$$\int_{\Omega_n} \int_{\Omega_m} |k(x, y)|^2 dx dy < \infty,$$

und sei A invertierbar. Dann gilt:

- A ist stetig bezüglich $L^2(\Omega^n)$
- A^{-1} ist **unstetig** bezüglich $L^2(\Omega_m)$

Der durch A definierte Operator heißt Integraloperator, k heißt Integralkern.

Beweis. Es gilt:

$$\begin{aligned}\|Af\|_{L^2(\Omega_m)}^2 &= \int_{\Omega_m} [(Af)(x)]^2 dx = \int_{\Omega_m} \left(\int_{\Omega_n} k(x,y)f(y) dy \right)^2 dx \\ &\leq \int_{\Omega_m} \int_{\Omega_n} |k(x,y)|^2 dy \int_X (f(y))^2 dy dx \\ &\leq C \|f\|_{L^2}^2 \Rightarrow A \text{ ist stetig.}\end{aligned}$$

Sei nun f_k ein Orthonormalsystem auf $L^2(\Omega_m)$ (z.B. $f_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ falls $X = L^2((0, 2\pi))$). Dann gilt nach der Parseval'schen Ungleichung für jedes $g \in L^2(\Omega_m)$

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} |(f_k, g)|^2 \leq \|g\|_{L^2(\Omega_m)}^2.$$

Es gilt also:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} |Af_k|^2(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} |(k(x, \cdot), f_k)|^2 \leq \int_{\Omega_m} (k(x, y))^2 dy,$$

und daher

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \|Af_k\|_{L^2}^2 \leq \int_{\Omega_n} \int_{\Omega_m} |k(x, y)|^2 dx dy \leq C.$$

Daraus folgt:

$$\|Af_k\| \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad k \rightarrow \infty$$

Sei nun

$$g_k := \frac{Af_k}{\|Af_k\|},$$

dann gilt $\|g_k\| = 1$ aber $\|A^{-1}g_k\| \rightarrow \infty$ wenn $k \rightarrow \infty$ und damit ist bewiesen, dass A^{-1} unstetig ist. \square

Bemerkung 2.0.6. Integralgleichungen der Art

$$g(x) = \int k(x, y)f(y) dy$$

heißen Fredholmsche Integralgleichungen 1. Art und sind (unter den obigen Voraussetzungen) schlecht gestellt. Gleichungen der Form

$$g(x) = \int k(x, y)f(y) dy$$

heißen Fredholmsche Integralgleichungen 2. Art und sind gut gestellt.

2.1 Verallgemeinerte Inverse

Seien X, Y Hilberträume, d.h. Vektorräume mit einem Skalarprodukt die vollständig sind bzgl. der vom Skalarprodukt induzierten Norm

$$\|\cdot\| := \sqrt{(\cdot, \cdot)}.$$

Sei $M \subset X$. Wie nennen:

- \overline{M} = Abschluss von M (closure),
- M^\perp = orthogonales Komplement von M (closure)
 $:= \{u \in X \mid (u, v) = 0, \quad \forall v \in M\}.$

Es gilt:

- M ist ein Untervektorraum von X ,
- $M^{\perp\perp} = \overline{M}$,
- $X = \overline{M} \oplus M^\perp$.

Definition 2.1.1. Sei $M \subset X$ ein abgeschlossener, linearer Unterraum und sei $f \in X$. Dann ist die orthogonale Projektion $u = \mathcal{P}_M f$ definiert durch

$$u \in M \text{ und } (f - u, v) = 0, \quad \forall v \in M$$

Bemerkung 2.1.2. \mathcal{P}_M ist ein linearer Operator

Sei $\mathcal{L}(X, Y) := \{A : X \rightarrow Y \mid A \text{ ist stetig und linear}\}$. Sei $A \in \mathcal{L}(X, Y)$, dann ist die Norm von A definiert als

$$\|A\|_{X,Y} := \sup_{x \in X} \frac{\|Ax\|_Y}{\|x\|_X} = \sup_{x \in X, \|x\|_X \leq 1} \|Ax\|_Y < \infty,$$

da A stetig ist. Es gelten folgende Definitionen:

- Kern von A (kernel): $N(A) := \{x \in X \mid Ax = 0\},$
- Bild von A (range): $R(A) := \{y \in Y \mid \exists x \in X, \text{ so dass } Ax = y\}.$

Wir betrachten nun wieder die Gleichung

$$Ax = y.$$

Wenn nun das Bild von A , $\mathcal{R}(A)$ nicht der ganze Raum Y ist (oder auch nicht Dicht in Y), dann ist die obige Gleichung nicht für beliebige $y \in Y$ lösbar. Wir suchen daher nach einem verallgemeinerten Lösungskonzept und dies motiviert die folgende Definition:

Definition 2.1.3 (kleinste Quadrate Lösung). Seien X, Y Hilberträume, $g \in Y$ und $A : X \rightarrow Y$.

Dann heißt u kleinste Quadrate Lösung (least squares solution) von $Af = g$ genau dann, wenn $\|Au - g\|_Y \leq \|Af - g\|_Y$ für alle $f \in X$.

Wenn der Operator A weiterhin einen nicht-trivialen Nullraum hat, so muss die kleinste Quadrate Lösung nicht unbedingt eindeutig sein. Daher definieren wir:

Definition 2.1.4. Sei $y \in R(A) \oplus R(A)^\perp$. Dann ist die minimum-Norm oder Lösung von (2.1) ist definiert als x , so dass

$$\|x\| = \inf\{\|z\| \mid z \text{ ist kleinste Quadrate Lösung von (2.1)}\}$$

Bemerkung 2.1.5. Die minimum-norm Lösung ist eindeutig, denn die Menge der kleinste-Quadrate-Lösungen ist abgeschlossen und konvex.

Betrachten wir nun einige Eigenschaften dieser Objekte:

Theorem 2.1.6. Die folgenden Aussagen sind äquivalent:

- u ist kleinste-Quadrate-Lösung
- $A^*Au = A^*g$
- $Au = \mathcal{P}_{\overline{R(A)}} g$, wobei \mathcal{P} orthogonale Projektion auf $\overline{R(A)}$.

Beweis.

1) \rightarrow 2) Sei u die kleinste Quadrate Lösung, d.h. $u = \min_{\tilde{u}} \|A\tilde{u} - g\|^2$. Die Optimalitätsbedingungen lauten:

$$0 = \left. \frac{d}{d\lambda} \|A(u + \lambda v) - g\|^2 \right|_{\lambda=0} = (Au - g, Av)_Y, \quad \forall v \in X,$$

$$\text{also } A^*Au = A^*g.$$

2) \rightarrow 3)

$$\begin{aligned} (Au - g, Av) &= 0, \quad \forall v \in X \\ \Rightarrow (g - Au) \perp Av &\Leftrightarrow (g - Au) \perp R(A) \end{aligned}$$

Nach Definition der orthogonalen Projektion ergibt sich also:

$$Au = \mathcal{P}_{R(A)} g$$

3) \rightarrow 1)

$$\begin{aligned} \|Af - g\|_{L^2}^2 &= \|A(u - g) + A(f - u)\|_{L^2}^2 = \underbrace{\|Au - g\|_{L^2}^2}_{\in R(A)^\perp} + \underbrace{\|A(f - u)\|_{L^2}^2}_{\in R(A)} \\ &= \|Au - g\|_{L^2}^2 + \|A(f - u)\|_{L^2}^2 \\ &\geq \|Au - g\|_{L^2}^2 \end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.1.7. Der dritte Punkt impliziert insbesondere die Existenz einer Zerlegung von g :

$$g = blub$$

. -> Muss es nicht immer geben (da $R(A)$ nicht abgeschlossen ist !!)
 -> Im Gegensatz zum endlichdimensionalen Fall existiert die kleinste Quadrate Lösung nicht immer !

Definition 2.1.8. Sei $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ und sei $\tilde{A} : N(A)^\perp \rightarrow R(A)$ die Einschränkung von A . Dann ist die Moore-Pensore verallgemeinerte inverse A^\dagger definiert als die eindeutige, lineare Erweiterung von \tilde{A}^{-1} auf

$$\mathcal{D}(A^\dagger) := R(A) \oplus R(A)^\perp,$$

mit $N(A^\dagger) = R(A)^\perp$.

Bemerkung 2.1.9. 1. Die Moore-Pensore inverse ist wohldefiniert, denn

- \tilde{A} ist bijektiv und daher invertierbar
- Für bel. $y \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ kann man eindeutige $y_1 \in R(A)$ und $y_2 \in R(A)^\perp$ finden, so dass $y = y_1 + y_2$ und mit Hilfe der Linearität von A^\dagger und von $N(A) = R(A)^\perp$ folgt dann

$$A^\dagger y = A^\dagger y_1 + A^\dagger y_2 = \tilde{A}^{-1} y_1$$

2. Der Definitionsbereich ist **nicht** der ganze Raum Y ! (im Gegensatz zum endlichdimensionalen Fall)

Theorem 2.1.10. A^\dagger ist charakterisiert durch die Moore-Penrose Gleichungen

$$\begin{aligned} AA^\dagger A &= A, \\ A^\dagger AA^\dagger &= A^\dagger, \\ A^\dagger A I - P, \\ AA^\dagger &= Q|_{\mathcal{D}(A^\dagger)}, \end{aligned}$$

wobei $P : X \rightarrow N(A)$ und $Q : Y \rightarrow \bar{R}(A)$ die orthogonalen Projektionen sind.

Beweis. Engl/Hanke/Neubauer: [4, Proposition 2.3, Seite 33]. □

Theorem 2.1.11. Für jedes $y \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ hat $Ax = y$ eine eindeutige minimum-Norm-Lösung gegeben durch

$$x^\dagger := A^\dagger y.$$

und die Menge aller kleinste Quadrate-Lösungen ist gegeben durch $\{x^\dagger\} + N(A)$.

Bemerkung 2.1.12.

- $A * Ax = A * y \rightarrow A^\dagger y = (A * A)^\dagger A * y.$
 \Rightarrow Um A^\dagger zu erhalten kann man auch die kleinste Quadrate-Lösung von $A * Ax = A * y$ ausrechnen (Dies wird später wichtig bei der Konstruktion von Regularisierungsmethoden.)
- Vergleich mit dem endlichdimensionalen Fall (numerische lineare Algebra/Numerik I): Für überbestimmte Gleichungssysteme ist die Moore-Penrose-Inverse gegeben durch

$$A^\dagger = (A * A)^{-1} A^*,$$

und für unterbestimmte Gleichungssysteme durch

$$A^\dagger = A^* (A^* A)^{-1}.$$

Aber: Die Bildung der Matrizen $A^* A$ bzw. AA^* problematisch, da diese Produkte eine schlechtere Kondition haben als die ursprünglichen Matrizen. Daher ist dieser Vorgehensweise zur Berechnung von A^\dagger numerisch nicht sinnvoll.

2.2 Kompakte, lineare Operatoren

Ab jetzt sind X, Y immer Hilberträume, falls nicht anders angegeben.

Definition 2.2.1. Seien X, Y normierte Räume und sei $A : X \rightarrow Y$ linear. Dann heißt A kompakt (vollstetig), wenn für jede beschränkte Menge $B \subset X$ die Menge $\overline{A(B)}$ kompakt ist.

Bemerkung: Die Stetigkeit des Operators wird nicht vorausgesetzt!

Theorem 2.2.2. Seien X, Y, Z Hilberträume und sei $A : X \rightarrow Y$ linear. Dann gilt:

1. A ist genau dann kompakt, wenn für jede beschränkte Folge $(x_n)_n$ in X die Folge $(Ax_n)_n$ eine konvergente Teilfolge besitzt.
2. Ist A kompakt, so ist A beschränkt (also stetig) und damit $A \in \mathcal{L}(X, Y)$.
3. Linearkombinationen kompakter linearer Operatoren sind kompakt.
4. Sei $A_1 \in \mathcal{L}(X, Y)$, $A_2 \in \mathcal{L}(Y, Z)$. Dann ist $A_1 A_2$ kompakt, falls A_1 oder A_2 kompakt ist.

5. Sei Y ein Banachraum und für alle $n \in \mathbb{N}$ sei $A_n : X \rightarrow Y$ linear und kompakt. Es gelte $\lim_{n \rightarrow \infty} \|A - A_n\| = 0$. Dann ist A kompakt.

6. Sei A beschränkt und $\dim(R(A)) < \infty$, dann ist A kompakt.

Beweis. 1.-4.: klar

5.: Sei $(x_n)_n \in X$ beschränkt mit $\sup_{n \in \mathbb{N}} \|x_n\|_Y \leq C$. Da A_1 kompakt, hat die Folge $(A_1 x_m)_{m \in \mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge $(A_1 x_{m_1(k)})_{k \in \mathbb{N}}$. Da A_2 kompakt ist, hat die Folge $(A_2 x_{m_1(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge $(A_2 x_{m_2(k)})_{k \in \mathbb{N}}$. Mittels vollständiger Induktion erhalten wir Teilfolgen $(x_{m_i(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ von $(x_m)_{m \in \mathbb{N}}$, so dass $(x_{m_{i-1}(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ Teilfolge von $(x_{m_i(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ ist für alle $i \in \mathbb{N}$ jeweils $(K_i x_{m_i(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ konvergiert (insb. ist dann auch für alle $j \geq i$ die Folge $K_i(x_{m_j(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ konvergent). Sei nun $y_i := x_{m_i(i)}$ die "Diagonalfolge", Teilfolge von x_m . Zu zeigen:

$(K y_i)$ ist konvergent.

Wegen $\lim_{n \rightarrow \infty} \|A - A_n\| = 0$ ex. für jedes $\epsilon > 0$ ein $n \in \mathbb{N}$ so dass

$$\|A - A_n\| \leq \frac{\epsilon}{3C}.$$

Aus der Konstruktion von y_i folgt, dass $A_n y_i$ konvergiert, sei also $i_0 \in \mathbb{N}$ so dass für $i, j > i_0$ gilt

$$\|A_n y_i - A_n y_j\| \leq \frac{\epsilon}{3}.$$

Damit gilt für $i, j > i_0$

$$\|A y_i - A y_j\| \leq \|A y_i - A_n y_i\| + \|A_n y_i - A_n y_j\| + \|A_n y_j - A y_j\| \quad (2.1)$$

$$\leq \|A - A_n\|(\|y_i\| + \|y_j\|) + \frac{\epsilon}{3} < \frac{\epsilon}{3C} 2C + \frac{\epsilon}{3} = \epsilon, \quad (2.2)$$

$(A y_i)$ ist also eine Cauchy-Folge. Da Y Banachraum (vollständig) $\Rightarrow (A y_i)$ konvergiert. Da x_n bel. war $\Rightarrow A$ ist kompakt.

6.: Folg aus dem Satz von Heine-Borel, das danach der Abschluss der beschränkten Teilmengen von $R(A)$ kompakt ist. \square

Bemerkung 2.2.3. Nach 5. und 6. ist also der Norm-Grenzwert endlichdimensionaler beschränkter linearer Operatoren kompakt. Die Umkehrung ist im allgemeinen nicht richtig.

Theorem 2.2.4. Sei $A : X \rightarrow Y$ ein kompakter, linearer Operator zwischen den Hilberträumen X und Y , so dass die Dimension von $R(A)$ unendlich ist. Dann ist das Problem $Ax = y$ schlecht-gestellt, d.h. insbesondere A^\dagger ist unstetig.

Beweis. Wenn X und $R(A)$ unendlichdimensional sind, dann ist auch $N(A)^\perp$ unendlichdimensional. Daher existiert eine Folge $(x_n)_n$ mit $x_n \in N(A)^\perp$, $\|x_n\|_X = 1$ und

$$(x_n, x_k) = 0 \quad \text{für } n \neq k.$$

Da A kompakt ist, besitzt $(y_n)_n := (Ax_n)_n$ eine konvergente Teilfolge (die wir wieder mit $(y_n)_n$ bezeichnen) und für jedes $\delta > 0$ gibt es k, l so dass $\|y_k - y_l\|_Y \leq \delta$, aber

$$\|A^\dagger y_k - A^\dagger y_l\|^2 = \|x_k - x_l\|^2 = \|x_k\|^2 + \|x_l\|^2 - 2 \underbrace{(x_k, x_l)}_{=0} = 2.$$

Also ist A^\dagger unbeschränkt und damit unstetig. □

Beispiel 2.2.5. Einige Beispiele kompakter Operatoren:

- $Af(x) := \int k(x, y)f(y) dy$ mit $\int \int k(x, y) dx dy \leq C < \infty$
(Wenn $A : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ und $k(x, y) \in L^2(\Omega \times \Omega)$ dann nennt man A einen Hilbert Schmidt Operator)
- Die Identität $I : X \rightarrow X$ ist genau dann kompakt, wenn X endlichdimensional ist.

Theorem 2.2.6. Sei $A \in \mathcal{L}(X, X)$ kompakt und selbstadjungiert. Dann sind alle Eigenwerte von A reell. Weiterhin sind Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten orthogonal.

Beweis. • Sei $Ax = \mu x, \mu \in \mathbb{C}$. Dann gilt

$$\mu(x, x) = (Ax, x) = (x, Ax) = \bar{\mu}(f, f)$$

Da $f \neq 0$ gilt also $\mu = \bar{\mu}$ und damit μ reell.

- Sei $Af = \mu f, Ag = \lambda g$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \mu(f, g) &= (Af, g) = (f, Ag) = \lambda(f, g) \\ \Rightarrow (f, g) &= 0. \end{aligned}$$

□

Theorem 2.2.7. Sei $A \in \mathcal{L}(X, X)$ kompakt und selbstadjungiert. Dann sind $\|A\|_{X, X}$ oder $(-\|A\|_{X, X})$ Eigenwerte von A .

Beweis. Sei $\|f_n\| = 1$ so dass $\|Af_n\| \rightarrow \|A\|$ (??). Dann gilt:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|A^2 f_n - \|Af_n\|^2 f_n\|^2 \\ &= \|A^2 f_n\|^2 - 2\|Af_n\|^2 (A^2 f_n, f_n) + \|Af_n\|^4 \\ &= \|A^2 f_n\|^2 - \|Af_n\|^4 \leq \|A\|^2 \|Af_n\|^2 - \|Af_n\|^4 \rightarrow 0 \\ \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^2 f_n - \|Af_n\|^2 f_n\| &= 0 \end{aligned}$$

Da A kompakt ist auch A^2 kompakt und somit

$$A^2 f_n \rightarrow g - \|A\|^2$$

???? □

Theorem 2.2.8. Sei $A \in \mathcal{L}(X, X)$ kompakt und selbstadjungiert. Dann existiert eine Hilbertbasis aus Eigenvektoren von A und für jedes $f \in X$ gilt die Darstellung

$$f = \sum_i (f, \phi_i) \phi_i + f_0,$$

mit $Af_0 = 0$.

Beweis. Sei $(\lambda_n)_{n \geq 1}$ die Folge aller nicht verschwindenden Eigenwerte von A . Setze

$$\lambda_0 = 0, \quad E_0 = N(A), \quad \text{und} \quad E_n = N(A - \lambda_n I).$$

Es gilt (s.o.) $0 \leq \dim(E_0) \leq \infty$ und $0 < \dim(E_n) < \infty$. Zu zeigen: $H = \bigoplus_{n \geq 0} E_n$.

- Die Räume $(E_n)_{n \geq 0}$ sind orthogonal:
Sei $u \in E_n, v \in E_m, n \neq m$, dann gilt

$$\lambda_m(u, v) = (Tu, v) = (u, Tv) = \lambda_n(u, v),$$

und da $\lambda_n \neq \lambda_m$ folgt $(u, v) = 0$.

- Sei F der Raum aufgespannt von den Räumen $(E_n)_{n \geq 0}$. Zu zeigen: F ist dicht in H .

Es ist klar, dass $A(F) \subset F$. Sei nun $u \in F^\perp$ dann gilt

$$(Tu, v) = (u, Tv) = 0, \quad \forall v \in F,$$

und daher $A(F^\perp) \subset F^\perp$. Sei

$$T_0 := T|_{F^\perp}.$$

T_0 ist wieder selbstadjungiert und kompakt. Wir zeigen nun per Widerspruch dass $\sigma(T_0) = 0$ und damit $T_0 = 0$: Nehme also an, es ex. $\lambda \neq 0$ mit $T_0 u = \lambda u$. Damit ist λ aber auch einer der Eigenwerte von T , o.b.D.a. λ_n mit $n \geq 1$. Daher ist $u \in E_n \subset F$. Da aber $u \in F \cap F^\perp$ folgt, dass $u = 0$, also ein Widerspruch und daher $T_0 = 0$. Damit folgt schließlich $F^\perp \subset N(T)$. Da auf der anderen Seite gilt aber $N(T) \subset F$ und damit $F^\perp \subset F$. Daraus folgt $F^\perp = 0$ und F dicht in H .

□

Theorem 2.2.9. Sei W der Eigenraum eines kompakten Operators zum Eigenwert $\mu \neq 0$. Dann ist W endlichdimensional.

Beweis. Sei $(g_n)_n$ ein Orthonormalsystem in W . Dann gilt

$$\|Ag_n - Ag_m\| = \mu \|g_n - g_m\| = \sqrt{2}\mu.$$

$\Rightarrow Ag_n$ besitzt keine konvergente Teilfolge

$\Rightarrow (g_n)$ ist endlich

□

Theorem 2.2.10. Sei $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ kompakt und selbstadjungiert. Dann häufen sich die Eigenwerte von A höchstens bei 0, d.h. wenn λ_n eine Folge von Eigenwerten von A ist, so dass

$$\lambda_n \rightarrow \lambda \text{ wenn } n \rightarrow \infty$$

dann ist $\lambda = 0$.

Beweis. Da (λ_n) eine Folge von Eigenwerten, die gegen ein $c \neq 0$ konvergiert für $n \rightarrow \infty$. Sei weiterhin ϕ das zugehörige ONS aus Eigenvektoren. Dann gilt

$$A \left(\frac{1}{\mu_n} \phi_n \right) = \phi_n \quad \text{wobei} \quad \left\| \frac{1}{\mu_n} \phi_n \right\| = \frac{1}{|\mu_n|}, \text{ also beschränkt.}$$

Nach definition der Kompaktheit müßte also ϕ_n ein Konvergenz Teilfolge enthalten, was jedoch ein Widerspruch zu ϕ_n ONS ist. \square

2.3 Singulärwertzerlegung

Selbstadjungierte, kompakte Operatoren entsprechen am ehesten den Matrizen aus dem endlichdimensionalen Fall. Insbesondere gibt es ein Äquivalent zur Spektralzerlegung:

Theorem 2.3.1 (Spektralsatz für kompakte, selbstadjungierte Operatoren). Sei $A \in \mathcal{L}$ kompakt, selbstadjungiert. Sei λ_n die Folge der Eigenwerte und x_n die zugehörigen, normierten Eigenvektoren. Dann gilt

$$Ax = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n x_n (x, x_n)_X$$

.

Beweis. \square

Ist der Operator A nicht selbstadjungiert können wir (immer noch analog zu Matrizen) die Operatoren $B := A^*A$ und $C := AA^*$ definieren. Diese beiden Operatoren sind immer noch kompakt, selbstadjungiert und sogar positiv definit. Daher gibt es für beide eine Spektralzerlegung:

$$Bx = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^2 u_n (x, u_n)_X \quad \forall x \in X$$

und

$$Cy = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\sigma}_n^2 u_n (y, u_n)_Y \quad \forall y \in Y$$

. Da $\tilde{\sigma}_n^2$ ein Eigenwert von C mit Eigenvektor v_n ist, gilt

$$\tilde{\sigma}_n^2 A^* v_n = A^* C v_n = A^* A A^* v_n = B A^* v_n,$$

d.h. $\tilde{\sigma}_n^2$ ist ebenfalls ein Eigenwert von B , mit Eigenvektor $A^* v_n$. Analog folgt, dass σ_n^2 ein Eigenwert von C ist (mit Eigenvektor $A u_n$). Es gibt also eine bijektive Abbildung zwischen $\tilde{\sigma}_n^2$ und σ_n^2 und wir können daher (o.B.d.A) annehmen, dass

$$\tilde{\sigma}_n^2 = \sigma_n^2 \quad \text{und} \quad v_n = \frac{A u_n}{\|A u_n\|}.$$

Wir nennen (σ_n, u_n, v_n) ein *singuläres System*. Dies ist die Basis für die Singulärwertzerlegung (singular value decomposition) von kompakten, linearen Operatoren:

Theorem 2.3.2.

$$Ax = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n(x, u_n) v_n, \quad \forall x \in X,$$

analog für A^* :

$$A^* y = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n(x, v_n) u_n, \quad \forall y \in Y,$$

Bemerkung 2.3.3 (Wohldefiniertheit). *Die Summen in der Singulärwertzerlegung von A und A^* konvergieren, da die Koeffizienten (x, u_n) (bzw. (y, v_n)) quadratintegrabel sind, da die singulärvektoren u_n, v_n orthogonal sind und da die Singulärwerte beschränkt sind. Es gilt*

$$\left\| \sum_{n=1}^N \sigma_n(x, u_n) v_n \right\|^2 \leq \sum_{n=1}^N \sigma_n^2(x, u_n)^2 v_n \leq \sigma_1^2 \sum_{n=1}^N (x, u_n)^2 \leq \sigma_1^2 \|x\|^2.$$

Da diese Schranke nicht von N abhängt, existiert der Limes $N \rightarrow \infty$ (Analog für A^*).

Mit Hilfe der Singulärwertzerlegung erhalten wir die folgende Darstellung der Moore-Penrose inversen:

Theorem 2.3.4. *Sei $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ kompakt. Sei weiter (σ_n, u_n, v_n) ein Singulärsystem von A . Dann kann die Moore-Penrose Inverse von $Ax = y$ dargestellt werden durch*

$$x^\dagger = A^\dagger y = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sigma_n} (y, v_n) u_n. \quad (2.3)$$

Beweis. Es gilt $A^\dagger = (A^* A)^\dagger A^*$ und daher mit $x^\dagger = A^\dagger y$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^2(x^\dagger, u_n) u_n = A^* A x^\dagger = A^* y = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n(y, v_n) u_n.$$

Durch Koeffizientenvergleich folgt:

$$(x^\dagger, u_n) = \frac{1}{\sigma_n}(y, v_n),$$

und damit die Singulärwertzerlegung von A^\dagger . □

Bemerkung 2.3.5. • Im Gegensatz zur Singulärwertzerlegung von A und A^* konvergiert die Summe nicht immer. Dies ist Ausdruck der Unbeschränktheit der verallgemeinerten Inversen! Das sogenannte Picard-Kriterium zur Konvergenz lautet

$$\|A^\dagger y\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(y, v_n)^2}{\sigma_n^2} \leq C < \infty.$$

- *Stabilität: Gleichung (2.3) zeigt, wie Fehler in y sich auf $K^\dagger y$ auswirken: Wenn man den Fehler in der Basis $\{u_n\}$ darstellt, gilt: Komponenten mit großen Singulärwerten sind Harmlos (entspricht "niedrigen Frequenzen"), Komponenten mit kleinen σ_n werden verstärkt (mit $1/\sigma_n$). Wenn $\dim(R(A)) < \infty$, dann ex. nur endlich viele Singulärwerte, d.h. $1/\sigma_n$ ist beschränkt (kann aber immernoch bel. groß sein). Falls $\dim(R(A)) = \infty$ gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n = 0$ und der Fehler beliebig groß: Sei $y_{\delta,n} = y + \delta u_n$. Dann gilt $\|y - y_{\delta,n}\| = \delta$, aber*

$$A^\dagger y - A^\dagger y_{\delta,n} = \frac{(\delta u_n, u_n)}{\sigma_n} v_n$$

und damit

$$\|A^\dagger y - A^\dagger y_{\delta,n}\| = \frac{\delta}{\sigma_n} \rightarrow \infty \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Definition 2.3.6 (Unterscheidung inverser Probleme). • *Mild schlecht gestellt (mildly ill-posed) werden Problem genannt deren Singulärwerte höchstens mit polinomial schnell abfallen, d.h. es gibt $\gamma, C > 0$, so dass $\sigma_n \geq Cn^{-\gamma}$ für n groß genug.*

- *blub (severly ill-posed) heißen Probleme bei denen die Singulärwerte schneller als polinomial abfallen, d.h. $\sigma_n \leq Cn^{-\gamma}$ für n groß genug. Für numerische Differenziation gilt z.B. (n^{-1}) .*

Beispiel 2.3.7 (Heat Equation). Wie betrachten wieder die Rückwärts-Wärmeleitungsgleichung in 1d, also das Problem

$$u_t(x, t) = u_{xx}(x, t), \quad x \in [0, \pi], \quad t > 0,$$

mit homogenen Dirichlet Randwerten, also

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0, \quad t > 0,$$

und gegebener Temperatur zum Zeitpunkt $t = 1$, d.h.

$$u(x, 1) = f(x), \quad x \in [0, \pi] \text{ und mit } f(0) = f(\pi) = 0.$$

Unser Ziel ist wieder die Bestimmung der initialen Temperatur

$$u_0(x) := u(x, 0), \quad x \in [0, \pi].$$

Die Funktionen $\phi_n(x) := \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx)$ sind ein vollständiges Orthogonalsystem auf $L^2((0, \pi))$ und außerdem Eigenfunktionen des Operators $\frac{d^2}{dx^2}$ auf $[0, \pi]$. Wir können daher die Funktion $u_0 \in L^2((0, \pi))$ darstellen als

$$u_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x), \quad x \in [0, \pi], \quad \text{mit } c_n = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\pi} v_0(y) \sin(ny) dy.$$

Mit dem gleichen Ansatz wie in [4] erhalten wir daher als Lösung des Direkten Problems

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \phi_n(x).$$

Entwicklung von $f(x)$ ergibt schließlich

$$\begin{aligned} f(x) = u(x, 1) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2} \phi_n(x) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\pi} v_0(\tau) \sin(n\tau) d\tau e^{-n^2} \sin(nx). \end{aligned}$$

Da

$$k(x, \tau) := \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2} \sin(nx) \sin(n\tau)$$

folgt schließlich

$$\int_0^{\pi} k(x, y) u_0(y) dy = f(x).$$

Ein singuläres System für diesen Integraloperator ist dann also gegeben durch

$$\left(e^{-n^2}, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx), \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx) \right).$$

Bla di blub

Kapitel 3

Regularisierungstheorie

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der Regularisierungstheorie und folgen dabei im wesentlichen der Darstellung in [4, Kapitel 3 und 4].

Die grundlegende Idee hier ist es, dass schlechtgestellte Problem durch ein Familie von gutgestellten Problemen zu approximieren, die im Limes wieder gegen das ursprüngliche Problem konvergieren. Betrachten wir folgende Situation: Wir suchen die kleinste-quadrate Lösung $x^\dagger = T^\dagger y$ der Gleichung

$$Tx = y,$$

wobei $T : \mathcal{X} \rightarrow Y$ und wir von der rechten Seite (die Daten) nur eine gestörte (oder verrauschte) version y^δ kennen für die

$$\|y - y^\delta\| \leq \delta$$

gilt. Wenn das Problem schlecht gestellt ist, wird $T^\dagger y^\delta$ im allgemeinen nicht existieren, da $\mathcal{D}(T^\dagger)$ ein echter Teilraum von \mathcal{Y} ist. Selbst wenn $T^\dagger y^\delta$ existiert, wird es in Anbetracht der schlechtgestelltheit des Problems im allgemeinen keine gute Approximation der korrekten Lösung sein. Wir suchen daher eine Approximation x_α^δ von x^\dagger die einerseits stetig von den gestörten Daten abhängt und die andererseits gegen x^\dagger konvergiert, wenn der Regularisierungsparameter α passend gewählt ist und δ gegen null geht.

Definition 3.0.8. Sei $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ ein beschränkter, linearer Operator zwischen den Hilberträumen \mathcal{X} und \mathcal{Y} und sei $\alpha_0 \in (0, \infty]$. Für jedes $\alpha \in (0, \alpha_0)$ sei

$$R_\alpha : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$$

ein stetiger (nicht notwendigerweise linearer) Operator. Die Familie $\{R_\alpha\}_\alpha$ heißt Regularisierung oder Regularisierungsoperator (für T^\dagger) falls, für alle $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$, eine Parameterwahl $\alpha = \alpha(\delta, y^\delta)$ existiert so dass

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \|R_{\alpha(\delta, y^\delta)} y^\delta - T^\dagger y\| \mid y^\delta \in \mathcal{Y}, \|y^\delta - y\| \leq \delta \right\} = 0 \quad (3.1)$$

gilt. Hier ist $\alpha : \mathbb{R}^+ \times \mathcal{Y} \rightarrow (0, \alpha_0)$ so gewählt, dass

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \alpha(\delta, y^\delta) \mid y^\delta \in \mathcal{Y}, \|y^\delta - y\| \leq 0 \right\} = 0 \quad (3.2)$$

gilt. Für ein gegebenes $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ nennt man ein Paar (R_α, α) eine (konvergente) Regularisierungsmethode (zur Lösung von $Tx = y$), falls (3.1) und (3.2) erfüllt sind.

Definition 3.0.9. Für die Parameterwahl unterscheiden wir zwei Fälle:

- Hängt α nicht von y^δ ab (also $\alpha = \alpha(\delta)$), so heißt α a-priori Parameterwahl.
- Andernfalls heißt α a-posteriori Parameterwahl

Theorem 3.0.10. Sei $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ ein beschränkter Operator und sei $\{R_\alpha\}_\alpha$ eine konvergente Regularisierung für T^\dagger mit einer Parameterwahl α , die nur von y^δ und nicht von δ selbst abhängt. Dann ist T^\dagger beschränkt und kann auf eine steilen Operator von X nach Y erweitert werden.

Beweis. Sei $\alpha = \alpha(y^\delta)$. Nach Definition gilt dann

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \|R_{\alpha(y^\delta)} y^\delta - T^\dagger y\| \mid y^\delta \in \mathcal{Y}, \|y^\delta - y\| \leq 0 \right\} = 0$$

und daher insbesondere $R_{\alpha(y)} y = T^\dagger y$ für alle $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$. Weiter gilt für jede Folge $(y_n) \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ mit Grenzwert y

$$T^\dagger y_n = R_{\alpha(y_n)} y \rightarrow R_{\alpha(y)} y = T^\dagger y.$$

Daraus folgt, dass T^\dagger stetig ist auf $\mathcal{D}(T^\dagger)$. Da $\mathcal{D}(T^\dagger)$ dicht ist in Y existiert eine eindeutige, stetige Erweiterung von T^\dagger auf ganz Y . \square

Bemerkung 3.0.11. 1. Es gibt keine Fehlerfreien (error-free) Regularisierungsmethoden. (In der Praxis trotzdem oft sinnvoll, aber aufpassen für δ klein)

2. Es stellen sich folgende Fragen:

- Wie kann man Regularisierungsoperatoren konstruieren?
- Wie erhält man eine Parameterwahl, so dass die zugehörigen Regularisierungen konvergieren?
- Wie kann man dies “optimal” tun?

Lemma 3.0.12. Sei, für alle $\alpha > 0$, R_α ein stetiger (möglicherweise nichtlinearer) Operator. Dann ist die Familie R_α eine Regularisierung, wenn gilt:

$$R_\alpha \rightarrow T^\dagger \text{ punktweise auf } \mathcal{D}(T^\dagger) \text{ für } \alpha \rightarrow 0.$$

Ist diese Bedingung erfüllt, so existiert für jedes $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ eine a-priori parameter choice rule $\alpha = \alpha(\delta)$, so dass (R_α, α) eine konvergente Regularisierung für $Tx = y$ ist.

Beweis. Sei $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ beliebig. Es existiert eine monotone Funktion $\sigma : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sigma(\epsilon) = 0$, so dass für jedes $\epsilon > 0$,

$$\|R_{\sigma(\epsilon)}y - T^\dagger y\| \leq \frac{\epsilon}{2}.$$

Da $R_{\sigma(\epsilon)}$ stetig ist für jedes $\epsilon > 0$ existiert $\rho(\epsilon)$ so dass für $\|z - y\| \leq \rho(\epsilon)$ gilt

$$\|R_{\sigma(\epsilon)}z - R_{\sigma(\epsilon)}y\| \leq \frac{\epsilon}{2}.$$

Dies definiert eine Funktion $\rho : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ die (o.B.d.A.) strikt monoton und stetig ist sowie die Eigenschaft $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \rho(\epsilon) = 0$ besitzt. Insbesondere ist ρ invertierbar und ρ^{-1} die gleichen Eigenschaften. Wir definieren

$$\begin{aligned} \alpha : \mathbb{R}^+ &\rightarrow \mathbb{R}^+ \\ \delta &\rightarrow \sigma(\rho^{-1}(\delta)). \end{aligned}$$

Dann ist auch α monoton und es gilt $\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0$.

$$\|R_{\alpha(\delta)}y^\delta - T^\dagger y\| \leq \|R_{\alpha(\epsilon)}y^\delta - R_{\alpha(\epsilon)}y\| + \|R_{\alpha(\epsilon)}y^\delta - T^\dagger y\| \leq \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} \leq \epsilon,$$

da $\alpha(\delta) = \sigma(\epsilon)$. Daher def. (R_α, α) eine konvergente Regularisierungsmethode. \square

Betrachten wir nun die umgekehrte Aussage:

Theorem 3.0.13. Sei $T \in \mathcal{L}(X, Y)$ ein stetiger, linearer Operator und $R_\alpha : Y \rightarrow X$ eine Familie stetiger, linearer Regularisierungsoperatoren. Dann gilt:

1. Für $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ konvergiert $x_\alpha := R_\alpha y$ zu $T^\dagger y$ für $\alpha \rightarrow 0$.
2. Gilt $y \notin \mathcal{D}(T^\dagger)$ und außerdem

$$\sup_{\alpha > 0} \|TR_\alpha\| < \infty$$

dann folgt $\|x_\alpha\| \rightarrow \infty$

Beweis. 1.: Aus der Definition folgt für $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ direkt

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} R_{\alpha(\delta, y^\delta)}y = T^\dagger y \quad \forall y \in \mathcal{D}(T^\dagger).$$

Damit folgt aus der Stetigkeit von α die Behauptung.

2.: Sei nun $y \notin \mathcal{D}(A^\dagger)$. Nehme an dass eine Folge $\alpha_n \rightarrow 0$ existiert, so dass $\|x_{\alpha_n}\|$ gleichmäßig beschränkt. Dann existiert eine schwach konvergente Teilfolge (wieder x_{α_n}) mit einem Grenzwert $x \in X$ und da stetige, lin. operatoren auch schwach stetig sind, gilt

$$Tx_{\alpha_n} \rightarrow Tx.$$

Andererseits da TR_α gleichmäßig beschränkt gilt $Tx_{\alpha_n} = TR_{\alpha_n}y \rightarrow TT^\dagger y = Qy$ (nach Moore-Penrose-Gleichungen) und daher $Tx = Qy$ und somit $y \in \mathcal{D}(A^\dagger)$, also ein Widerspruch. \square

Nachdem wir in Lemma 3.0.12 gesehen haben, dass, wenn punktweise Konvergenz gegeben ist, eine Parameterwahl existiert, charakterisieren wir diese nun genauer:

Theorem 3.0.14. *Sei $T : X \rightarrow Y$ ein stetiger, linearer Operator und sei $R_\alpha : Y \rightarrow X$ eine Familie stetiger, linearer Regularisierungsoperatoren mit einer a-priori Parameterwahl $\alpha = \alpha(\delta)$. Dann ist (R_α, α) eine konvergente Regularisierungsmethode genau dann wenn*

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0, \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \|R_{\alpha(\delta)}\| = 0.$$

gilt.

Beweis. “ \Rightarrow ”: Nach Vorr. gilt für $y^\delta \in Y$ mit $\|y - y^\delta\| \leq \delta$,

$$\begin{aligned} \|R_{\alpha(\delta)}y^\delta - T^\dagger y\| &\leq \|x_{\alpha(\delta)} - T^\dagger y\| + \|x_{\alpha(\delta)} - R_{\alpha(\delta)}y^\dagger\| \\ &\leq \|x_{\alpha(\delta)} - T^\dagger y\| + \delta \|R_{\alpha(\delta)}\|. \end{aligned}$$

Nach Vorr. und da Regularisierungsoperatoren punktweise konvergieren geht die Rechte Seite gegen 0 für $\delta \rightarrow 0$ und damit ist (R_α, α) eine konvergente Regularisierungsmethode.

“ \Leftarrow ”: Sei α eine a-priori Parameterwahl. Dann gilt $\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0$ nach Voraussetzung. Nehmen wir weiter an, dass die zweite Bedingung nicht gilt, dass also eine Folge $\delta_n \rightarrow 0$ existiert, so dass $\|\delta_n R_{\alpha(\delta_n)}\| \geq C > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Dann existiert eine Folge $\{z_n\} \in Y$ mit $\|z_n\| = 1$ so dass $\|\delta_n R_{\alpha(\delta_n)}z_n\| \geq C/2$. Für $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ konstruiere nun $y_n := y + \delta_n z_n$, dann gilt dass

$$R_{\alpha(\delta_n)} - T^\dagger y = (R_{\alpha(\delta_n)}y - T^\dagger y) + \delta_n R_{\alpha(\delta_n)}z_n$$

nicht konvergiert, also ein Widerspruch zur Voraussetzung. \square

3.1 Konstruktion von Regularisierungsmethoden

Wir widmen uns im folgenden der Frage, wie man Regularisierungsoperatoren für (lineare) schlecht-gestellte Problem konstruieren kann. Ausgehend von der Singulärwertzerlegung der verallgemeinerten Inversen betrachten wir die folgenden Klasse von Regularisierungen:

$$R_\alpha y := \sum_{n=1}^{\infty} g_\alpha(\sigma_n)(y, v_n)u_n, \quad y \in Y. \quad (3.3)$$

mit einer Funktion $g_\alpha : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$, so dass $g_\alpha(\sigma) \rightarrow \frac{1}{\sigma}$ für $\sigma > 0$ und $\alpha \rightarrow 0$.

Theorem 3.1.1. *Der Operator definiert durch (3.3) ist eine Regularisierung falls*

$$g_\alpha(\sigma) \leq C_\alpha < \infty, \quad \forall \sigma \in \mathbb{R}^+$$

und weiterhin

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta C_{\alpha(\delta)} = 0,$$

gilt.

Beweis. Nach Voraussetzung gilt

$$\|R_{\alpha}y\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} (g_{\alpha}(\sigma_n))^2 |(y, v_n)|^2 \leq C_{\alpha}^2 \sum_{n=1}^{\infty} |(y, v_n)|^2 \leq C_{\alpha}^2 \|y\|^2,$$

d.h. C_{α} ist eine obere Schranke für die Norm von R_{α} . Aus der punktweisen Konvergenz von g_{α} schließen wir sofort die punktweise Konvergenz von R_{α} zu A^{\dagger} . Weiterhin kann die Bedingung $\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \|R_{\alpha(\delta)}\|$ für die Parameterwahl ersetzt werden durch

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta C_{\alpha(\delta)} = 0,$$

da $\|R_{\alpha}\| \leq C_{\alpha}$. Daher handelt es sich bei (R_{α}, α) um eine konvergente Regularisierungsmethode. \square

Betrachten wir nun einige Beispiele:

Beispiel 3.1.2 (Abgeschnittene Singulärwertzerlegung (truncated singular value decomposition)).

$$g_{\alpha}(\sigma) := \begin{cases} \frac{1}{\sigma} & \text{falls } \sigma \geq \alpha, \\ 0 & \text{falls } \sigma < \alpha \end{cases}$$

bla di blub $C_{\alpha} = \frac{1}{\alpha}$ blub

$$x_{\alpha} := R_{\alpha}y = \sum_{\sigma_n \geq \alpha} \frac{1}{\sigma_n} (y, v_n) u_n, \quad \forall y \in Y.$$

Beispiel 3.1.3 (Lavrentiev Regularisierung).

$$g_{\alpha}(\sigma) = \frac{1}{\sigma + \alpha}$$

und damit

$$x_{\alpha} := R_{\alpha}y = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sigma_n + \alpha} (y, v_n) u_n, \quad \forall y \in Y.$$

Die Summe ist wirklich unendlich und das komplette Singulärsystem muss bekannt sein, um die Lösung zu berechnen. Ist A ein positiver, semidefiniter

Operator (und damit $\sigma_n = \lambda_n$ und $u_n = v_n$), so erhält man

$$\begin{aligned}
 (T + \alpha I)x_\alpha &= \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n + \alpha) (x_\alpha, u_n) u_n \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n + \alpha) \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\sigma_m + \alpha} (y, v_m) u_m, u_n \right) u_n \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} (\sigma_n + \alpha) \frac{1}{\sigma_m + \alpha} (y, v_m) \underbrace{(u_m, u_n)}_{=\delta_{n,m}} u_n \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} (y, u_n) u_n = y, \quad , \text{ da } u_n = v_n.
 \end{aligned}$$

Das heißt, die regularisierte Lösung läßt sich ohne Kenntniss des Singulärsystems berechnen als Lösung von

$$(T + \alpha I)x_\alpha = y.$$

Da $\frac{1}{\sigma + \alpha} \leq \frac{1}{\alpha}$ erhalten wir wieder $C_\alpha = \frac{1}{\alpha}$ und die Regularisierung ist damit wieder konvergent, wenn gilt $\frac{\delta}{\alpha} \rightarrow 0$.

Beispiel 3.1.4. Tikhonov(-Phillips) Regularisierung In diesem Fall nehmen wir

$$g_\alpha(\sigma) = \frac{\sigma}{\sigma^2 + \alpha}$$

und damit

$$x_\alpha := R_\alpha y = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sigma_n}{\sigma_n^2 + \alpha} (y, v_n) u_n, \quad \forall y \in Y.$$

Mit der Abschätzung $\sigma^2 + \alpha \geq 2\sigma\sqrt{\alpha}$ erhalten wir

$$g_\alpha(\sigma) \leq C_\alpha := \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$$

Wir erhalten daher als Bedingung für die Konvergenz der Methode

$$\frac{\delta}{\sqrt{\alpha}} \rightarrow 0.$$

Genau wie bei der Lavrentiev-Regularisierung oben kann man auch hier wieder x_α ohne Kenntniss des Singulärsystems berechnen. Man erhält:

$$(T^*T + \alpha I)x_\alpha = T^*y.$$

Aus dieser Darstellung sehen wir, dass Tikhonov-Regularisierung nichts anderes ist als die Anwendung der Lavrentiev-Regularisierung auf die Gaußschen

Normalengleichungen. Außerdem ist diese Gleichung die erste Ordnung Optimalitätsbedingung des Funktional

$$J_\alpha(x) := \|Tx - y\|^2 + \alpha\|x\|^2 \rightarrow \min_{x \in X},$$

vgl. Differentiationsbsp. in Kapitel 1. Weiterhin ist J_α strikt konvex für $\alpha > 0$, denn es gilt

$$J''_\alpha(x)(\phi, \phi) := 2\|T\phi\|^2 + 2\alpha\|\phi\|^2 > 0.$$

Da außerdem $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} J_\alpha(x) = \infty$ gilt ist x_α das eindeutige Minimum des Funktional. Diese Darstellung der Tikhonovregularisierung erlaubt insbesondere die Erweiterung auf nichtlinear Operatoren!

Als nächstes Betrachten wir den Fall, dass Fehlerbehaftete Daten y^δ vorliegen (und benutzen die Notation $x_\alpha^\delta := R_\alpha y^\delta$). Für den Fehler gilt dann

$$x^\dagger - x_\alpha^\delta = \underbrace{(x^\dagger - x_\alpha)}_{\text{Fehler durch Reg.}} + \underbrace{(x_\alpha - x_\alpha^\delta)}_{\text{Fehler durch Datenfehler.}}$$

Und mit der Dreiecksungleichung natürlich

$$\|x^\dagger - x_\alpha^\delta\| \leq \|x^\dagger - x_\alpha\| + \|x_\alpha - x_\alpha^\delta\|.$$

Theorem 3.1.5. *Sei $g_\alpha : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ eine stückweise stetige Funktion und sei*

$$\sup_{\alpha, \sigma} (\sigma g_\alpha(\sigma)) \leq \gamma,$$

für konstantes $\gamma \geq 0$. Sei weiterhin R_α der Regularisierungsoperator definiert in 3.3, dann gilt für alle $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$

$$R_\alpha y \rightarrow T^\dagger y \quad \text{für } \alpha \rightarrow 0.$$

Beweis. Nach der Singulärwertzerlegung gilt:

$$R_\alpha y - T^\dagger y = \sum_{n=1}^{\infty} \left(g_\alpha(\sigma_n) - \frac{1}{\sigma_n} \right) (y, v_n) u_n = \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_\alpha(\sigma_n) - 1) (x^\dagger, u_n) u_n.$$

Nach Voraussetzung gilt

$$\left\| \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_\alpha(\sigma_n) - 1) (x^\dagger, u_n) u_n \right\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} |(\sigma_n g_\alpha(\sigma_n) - 1) (x^\dagger, u_n) u_n| \leq (\gamma+1) \|x^\dagger\|,$$

und daher (nach dem Majorantenkriterium von Weierstrass)

$$\begin{aligned} \limsup_{\alpha} \|R_\alpha y - T^\dagger y\| &\leq \limsup_{\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_\alpha(\sigma_n) - 1)^2 (x^\dagger, u_n)^2 \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(\lim_{\alpha} \sigma_n g_\alpha(\sigma_n) - 1 \right)^2 (x^\dagger, u_n)^2. \end{aligned}$$

Aus der punktweisen Konvergenz von $\sigma g_\alpha(\sigma) \rightarrow 1$ folgern wir damit $\|R_\alpha y - T^\dagger y\| \rightarrow 0$ für $\alpha \rightarrow 0$. \square

Theorem 3.1.6. Seien g_α und γ wie im vorherigen Satz 3.1.5, und sei $x_\alpha := R_\alpha y$, $x_\alpha^\delta := R_\alpha y^\delta$. Dann gilt

$$\|Tx_\alpha - Tx_\alpha^\delta\| \leq \gamma\delta, \quad (3.4)$$

und

$$\|x_\alpha - x_\alpha^\delta\| \leq C_\alpha \delta, \quad (3.5)$$

Beweis. Aus der Singulärwertzerlegung ergibt sich sofort

$$\begin{aligned} \|Tx_\alpha - Tx_\alpha^\delta\|^2 &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^2 g_\alpha(\sigma_n)^2 |(y - y^\delta, v_n)|^2 \\ &\leq \gamma^2 \sum_{n=1}^{\infty} |(y - y^\delta, v_n)|^2 = \gamma^2 \|y - y^\delta\|^2 \leq (\gamma\delta)^2, \end{aligned}$$

un damit (3.4). Analog erhalten wir die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|x_\alpha - x_\alpha^\delta\|^2 &\leq \sum_{n=1}^{\infty} g_\alpha(\sigma_n)^2 |(y - y^\delta, v_n)|^2 \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} |(y - y^\delta, v_n)|^2 = C_\alpha^2 \|y - y^\delta\|^2 \leq (C_\alpha \delta)^2, \end{aligned}$$

und damit (3.5). □

Zusammen ergeben diese beiden Resultate:

Theorem 3.1.7. Sei $g_\alpha : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ stückweise stetig und sei

$$\sup_{\alpha, \sigma} (\sigma g_\alpha(\sigma)) \leq \gamma,$$

mit einer Konstanten $\gamma > 0$. Definiere $x_\alpha := R_\alpha y$ und $x_\alpha^\delta := R_\alpha y^\delta$. Gilt nun

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} C_{\alpha(\delta, y^\delta)} \delta = 0,$$

dann folgt:

$$x_{\alpha(\delta, y^\delta)} \rightarrow x^\dagger \text{ für } \delta \rightarrow 0.$$

3.2 Konvergenzraten

Auf dem Beweis von Theorem 3.1.5 sehen wir, dass die Konvergenz im Allgemeinen beliebig langsam sein kann. Die Funktion $\sigma \rightarrow \sigma g_\alpha(\sigma)$ konvergiert nämlich punktweise gegen

$$g(\sigma) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sigma > 0, \\ 1 & \text{falls } \sigma = 0. \end{cases}$$

Durch die Unstetigkeit an 0 wird die Konvergenz immer langsamer, wenn t zu 0 konvergiert. Da wir auf der anderen Seite immer beliebig kleine σ_n und zugehörige Minimum-Norm-Lösungen $x^\dagger = u_n$ finden können, tritt dieser Fall auch wirklich ein. Wir sehen aus dem Beweis jedoch auch, dass eine schnellere Konvergenz möglich wäre, wenn die Komponenten (x^\dagger, u_n) im Vergleich zu den Singulärwerten schnell genug abfallen. Wenn wir z.B. wüßten, dass $|(x^\dagger, u_n)| \leq c\sigma_n^\mu$ für Konstanten $c > 0, \mu > 0$ gelten würde, so erhielten wir

$$\begin{aligned} \limsup_{\alpha} \|R_{\alpha}y - A^\dagger y\|^2 &\leq \limsup_{\alpha} c^2 \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_{\alpha}(\sigma_n) - 1)^2 \sigma_n^{2\mu} \\ &\leq c^2 \sum_{n=1}^{\infty} \lim_{\alpha} (\sigma_n^{1+\mu} g_{\alpha}(\sigma_n) - \sigma_n^{\mu})^2. \end{aligned}$$

d.h. relevant ist jetzt das Konvergenzverhalten der Funktion $t \rightarrow |t^{1+\mu} g_{\alpha}(t) - t^{\mu}|$ für $t \rightarrow \infty$ (und dieses ist normalerweise viel schneller), z.B. erhalten wir im Fall der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung

$$|t^{1+\mu} g_{\alpha}(t) - t^{\mu}| = \begin{cases} 0 & \text{falls } t \geq \alpha, \\ t^{\mu} & \text{falls } t < \alpha. \end{cases}$$

Dieses Verhalten kann durch sogenannte Quellbedingungen (source-conditions) erreicht werden. Ein klassisches Beispiel ist

$$\exists w \in X, \text{ so dass } x^\dagger = (T^*T)^{\mu}w,$$

wobei der Ausdruck $(T^*T)^{\mu}$ durch Spektraltheorie definiert ist als

$$(T^*T)^{\mu}w = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^{2\mu}(w, u_n)u_n.$$

Daraus folgt insbesondere

$$(x^\dagger, u_n) = \sigma_n^{2\mu}(w, u_n),$$

d.h. die Koeffizienten von x^\dagger (bzgl. des n -ten Singularvektors) fallen schneller ab als $\sigma_n^{2\mu}$. Wenn wir eine Konvergenzrate erhalten wollen, so muss diese auch von der Funktion g_{α} abhängen. Wir nehmen daher zusätzlich an

$$t^{\mu}|tg_{\alpha}(t) - 1| \leq \omega_{\mu}(\alpha), \quad \forall t > 0,$$

typischerweise z.B. $\omega_{\mu}(\alpha) = \alpha^{\mu}$, wie bei der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung. Unter diesen Voraussetzungen können wir die Abschätzung aus dem Beweis zu Satz 3.1.5 wie folgt modifizieren:

$$\begin{aligned} \|R_{\alpha}y - T^\dagger y\|^2 &\leq \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_{\alpha}(\sigma_n) - 1)^2 (x^\dagger, u_n)^2 \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (\sigma_n g_{\alpha}(\sigma_n) - 1)^2 \sigma_n^{2\mu}(w, u_n)^2 \\ &\leq \omega_{\mu}(\alpha)^2 \|w\|^2. \end{aligned}$$

und daher

$$\|x_\alpha - x^\dagger\| \leq \omega_\mu(\alpha) \|w\|.$$

Kombinieren wir dieses Ergebnis mit $\|x_\alpha - x_\alpha^\delta\| \leq C_\alpha \delta$ erhalten wir schließlich

$$\|x_{\alpha(\delta)}^\delta - x^\dagger\| \leq \omega_\mu(\alpha) \|w\| + C_\alpha \delta.$$

Das Minimum auf der rechten Seite ergibt sich dann für α , so dass $\frac{\omega_\mu(\alpha)}{C_\alpha} \|w\| = \delta$. Für den Fall $\omega_\mu(\alpha) = \alpha^\mu$ und $C_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ ergibt sich

$$\alpha(\delta) = \left(\frac{\delta}{\|w\|} \right)^{2/(2\mu+1)}$$

und damit schließlich

$$\|x_{\alpha(\delta)}^\delta - x^\dagger\| \leq 2\delta^{2\mu/(2\mu+1)} \|w\|^{1/(2\mu+1)}. \quad (3.6)$$

Wir sehen dass, egal wie groß μ gewählt wird, die Konvergenzrate $\delta^{2\mu/(2\mu+1)}$ immer von kleinerer Ordnung ist als δ . Dies ist wieder eine Konsequenz der schlecht-gestellttheit des Problems: Der Fehler in der Lösung kann nicht mit der Gleichen Ordnung reduziert werden wie der Datenfehler - Es geht immer Information verloren. Man kann zeigen (cf. [4]), dass ein Fehler der Ordnung $\delta^{2\mu/(2\mu+1)}$ der kleinste Fehler ist, denn man unter der Bedingung (??), erreichen kann und daher sind die Regularisierungsmethoden hier von *optimaler Ordnung* (*optimal order*).

Kapitel 4

Inverse Probleme der Integralgeometrie

Bereits in der Einleitung haben wir uns das Beispiel der Computertomographie angeschaut und es auf das Problem reduziert, eine Funktion aus den Integralen über niederdimensionale Mannigfaltigkeiten zu berechnen. Wir werden dieses Problem in diesem Kapitel für Linien- bzw. Ebenen-Integrale im \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 analytisch lösen.

In fast allen Büchern zu inversen Problemen findet sich dieses Standardproblem zur Inversion der Radon-Transformation, denn einerseits ist die Computertomographie tatsächlich immer noch **das** Arbeitspferd der medizinischen Bildverarbeitung (jetzt allerdings in direkter Konkurrenz zur Magnetresonanztomographie), mit zahllosen weiteren Anwendungen von der Seismik (Laufzeiteninversion) bis zur Temperaturbestimmung in Kraftwerken. Es ist mathematisch eine äußerst dankbare Aufgabe, denn anders als beispielsweise bei der Parameteridentifikation in partiellen Differentialgleichungen ist es vollständig analytisch lösbar. Numerisch sind verschiedene optimale Algorithmen angebar, deren Stabilität bzw. Optimalität ebenfalls exakt gezeigt werden kann.

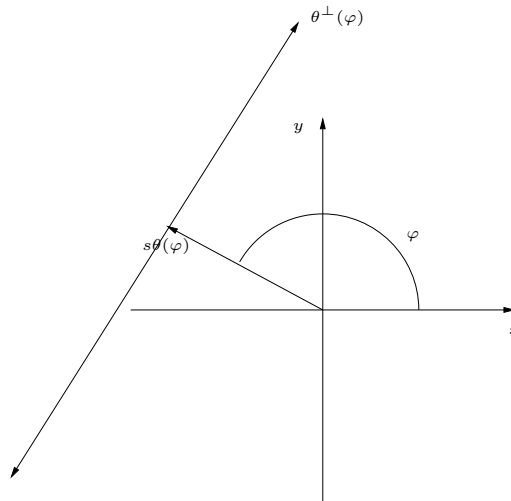
Mit anderen Worten: Die Inversion der Radontransformation ist ein optimales Ziel für unser Arsenal an analytischen und numerischen Waffen. Dies bedeutet leider, dass wir zunächst einige spezielle (funktional-) analytische Grundlagen wiederholen oder erarbeiten müssen. Um die Leser nicht komplett zu vergraulen, beginnen wir dieses Kapitel stattdessen mit einem Beispiel für die Anwendung der Methoden der Singulärwertzerlegung auf die diskretisierte Radontransformation.

4.1 Radon: Ein erstes Beispiel

Als Beispiel betrachten wir folgendes Problem: Gesucht sei die Funktion $f : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$. Sei $\theta(\varphi)$ der Einheitsvektor $(\cos \varphi, \sin \varphi)$ mit dem orthogonalen Vektor $\theta^\perp(\varphi) = (-\sin \varphi, \cos \varphi)$. Die Linien $L(\varphi, s)$ im \mathbb{R}^2 , senkrecht auf $\theta(\varphi)$, sei-

en definiert durch

$$L(\varphi, s) = \left\{ s\theta(\varphi) + t\theta^\perp(\varphi) : t \in \mathbb{R} \right\} = \{x : x \cdot \theta(\varphi) = s\}.$$



Parametrisierung von Linien im \mathbb{R}^2

In zwei Dimensionen definieren wir dann die Radon–Transformation zunächst sehr informell (korrekt werden wir das im nächsten Kapitel tun) durch

$$(Rf)(\theta(\varphi), s) = \int_{L(\varphi, s)} f(x) d\sigma(x). \quad (4.1)$$

für stetige Funktionen f mit Träger im Einheitskreis.

Zur Integration: Im ganzen Kapitel verwenden wir durchgehend, falls nichts anderes gesagt ist, Lebesgue–Integrale. Das verwendete Maß für Linienintegrale im \mathbb{R}^2 ist natürlich das Oberflächenmaß (bezüglich des üblichen euklidischen Maßes im \mathbb{R}^2 ist eine Linie eine Menge mit Maß 0!), daher das $\sigma(x)$. In allen Fällen, in denen aber das Maß klar ist (so wie hier), werden wir einfach nur $f \, dx$ statt $d\sigma(x)$ verwenden.

Wir wollen nun aus den Messungen von $g(\varphi, s) = (Rf)(\theta(\varphi), s)$ die Funktion f rekonstruieren. Wir werden zeigen, dass diese Aufgabe schlecht gestellt ist, wir müssen also regularisieren. Wir wollen hier die Methoden der Singulärwertzerlegung verwenden. Hierzu sind die Singulärwerte und –vektoren der Radon–Transformation als Abbildung zwischen zwei Hilberträumen zu bestimmen. Dies ist tatsächlich machbar, siehe z.B. [13]. Wir wollen uns auf diese umfangreiche Rechnung aber nicht einlassen und begnügen uns mit einer einfachen Diskretisierung, die, wenn sie fein genug ist, tatsächlich vergleichbare Ergebnisse liefert.. Hierzu nehmen wir an, dass $g_{kl} = g(\varphi_k, s_l)$ für einige Winkel φ_k , $k = 0 \dots p-1$, sowie jeweils für feste s_l , $l = -q \dots q$, gemessen wurde. Bei festem k werden also mehrere parallele Messungen senkrecht

zu $\theta(\varphi_k)$ durchgeführt, daher heißt diese Konfiguration parallele Messung und entspricht einer unendlich weit entfernten Röntgenquelle in der CT.

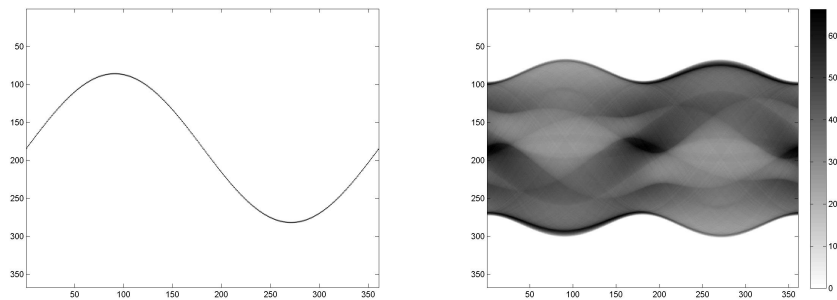


Abbildung 4.1: Sinogramm eines Punktes und des Shepp–Logan–Phantoms. Senkrecht ist die Entfernung der Hyperebenen vom Nullpunkt abgetragen, waagrecht die Orientierung der Hyperebene.

[Klick für Bild radondemodot](#)
[Klick für Matlab Figure radondemodot](#)
[Klick für Bild radondemoshepp](#)
[Klick für Matlab Figure radondemoshepp](#)

```
function [ output_args ] = radondemo( input_args )
%RADONDEMO
bild=zeros(256);
bild(256-30,128)=1;
```

Listing 4.1: Radontransformation des Shepp–Logan–Phantoms (radondemo.m)

[Klicken für den Quellcode von radondemo.m](#)

Bei der Diskretisierung eines kontinuierlichen Problems geht man üblicherweise so vor, dass man die Lösung in einem endlichdimensionalen Teilraum sucht. Wir wählen als Teilraum V den von den Funktionen $\psi_{ij}(x)$ aufgespannten linearen Unterraum des L^2 , $i, j = 0 \dots N$. Unsere diskretisierte Aufgabe lautet also:

Finde ein $\tilde{f} \in V$ mit $(R\tilde{f})(\theta(\varphi_k), s_l) = g_{kl}$.

Da $\tilde{f} \in V$, gilt $\tilde{f} = \sum \lambda_{ij} \psi_{ij}$ und für die Koeffizienten gilt

$$g_{kl} = (R\tilde{f})(\theta(\varphi_k), s_l) = \sum_{(i,j)} (R\psi_{ij}(\theta(\varphi_k), s_l)) \lambda_{ij} =: (A\lambda)_{kl}$$

mit der Systemmatrix A und dem Koeffizientenvektor $\lambda = \lambda_{ij}$.

Als Ansatzfunktionen ψ wählen wir einfach die charakteristischen Funktionen von Pixeln im Einheitsquadrat, damit ist $R\psi_{ij}(\theta(\varphi_k), s_l)$ einfach nur die Länge des Schnitts der Linie $L(\theta(\varphi_k), s_l)$ mit dem Pixel (i, j) . (Bemerkung: Hier könnten wir natürlich auch andere Funktionen wählen, eine beliebige Wahl sind etwa Gaussglocken.)

Regularisierte Lösungen dieses endlichdimensionalen linearen Systems wollen wir mit Hilfe der Singulärwertzerlegung berechnen. Hierzu ist zunächst die diskrete Singulärwertzerlegung der Matrix A zu berechnen, die im allgemeinen sehr groß ist (typische Werte sind $N = 1024$, $p = 1024$, $q = 512$). Diese Rechnung ist, obwohl die Matrix A dünn besetzt ist, sehr aufwändig, eine Übersicht über die Methoden (i.a. Reduktion auf Hessenbergform, Berechnung der Singulärwerte mit dem QR-Algorithmus) haben Sie in der Vorlesung Numerische lineare Algebra kennengelernt.

Sei nun also

$$A = U\Sigma V^t$$

die übliche Singulärwertzerlegung von A . Aus dem letzten Kapitel wissen wir, dass die Anteile der Lösung an Singulärvektoren mit großem Singulärwert gut, die Anteile der Lösung an Singulärvektoren mit kleinem Singulärwert schlecht bestimmt sind. Wir werfen also zunächst einmal einen Blick auf die Singulärvektoren und stellen fest: Je höher oszillierend ein Singulärvektor ist, umso schlechter ist er bestimmt. Niederfrequente Anteile von f (d.h. grobe Details) sind also gut, hochfrequente Anteile (d.h. kleine Details) sind also schlecht bestimmt. Dies ist gut, und entspricht dem, was wir erwarten: Falls wir die Singulärwertzerlegung abschneiden, weil unsere Messungen schlecht sind, also nur wenige Vektoren nutzen, so bekommen wir einen groben Eindruck des Bildes, je mehr wir dazunehmen, desto besser kommen die Details heraus, aber auch umso verrauschter werden unsere Bilder.

BILDER

Die Matlab-Programme sind beigelegt. Achtung: Die Berechnung der SVD verschlingt einige Stunden CPU-Zeit.

Die abgeschnittene SVD verdeutlichen wir mit Hilfe des Shepp-Logan-Phantoms. Bei wenigen Singulärwerten ist das Bild nur grob aufgelöst, detailreich für mehr Singulärwerte, verrauscht für zu viele Singulärwerte. Dem betragsmäßigen Verlauf der Singulärwerte entnehmen wir, dass es einen sehr eindeutigen Punkt gibt, an dem die Reihe abgeschnitten werden sollte, diesen (er entspricht einer bestimmten Auflösung des Bildes) werden wir später exakt bestimmen.

4.2 Funktionalanalytische Grundlagen und Radontransformation

Wir werden uns zunächst einige Grundlagen erarbeiten bzw. ins Gedächtnis rufen. Diese Sätze und Definitionen sind Teile anderer Vorlesungen wie FA oder Analysis III. Bei den Beweisen werden wir daher häufig nur einfache Fälle betrachten. Die Radontransformation wird umfangreich studiert im Buch von Helgason ([10]), die zugehörigen Algorithmen zur Inversion werden mathematisch untersucht in Natterer ([14]).

4.2.1 Fourier-Analyse

Alle Sätze und Definitionen werden genau so im Forster ([6]) behandelt.

Definition 4.2.1. (L^p -Räume) Die L^p -räume als Unterräume der (reellen oder komplexen) messbaren Funktionen auf dem \mathbb{R}^n sind definiert durch

$$L^p(\mathbb{R}^n) = \left\{ f : \|f\|_p = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f|^p dx \right)^{1/p} < \infty \right\}$$

bzw.

$$L^\infty(\mathbb{R}^n) = \{ f : \exists C \geq 0 : |f| \leq C \text{ f.ü.} \}, \|f\|_\infty = \inf C \dots$$

Definition 4.2.2. (Fouriertransformierte im \mathbb{R}^n) Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann ist

$$\widehat{f}(\xi) := (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot \xi} dx$$

wohldefiniert und heißt Fouriertransformierte von f . Der Vorfaktor wird in den unterschiedlichen Quellen auch anders definiert (nämlich weggelassen oder mit dem Exponenten n).

Beispiel 4.2.3. Im Folgenden sei immer $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$.

1.

$$|\widehat{f}(\xi)| \leq (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| dx = (2\pi)^{-n/2}$$

2. Die Fouriertransformierte ist stetig.

$$\begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow \xi_0} \widehat{f}(\xi) &= (2\pi)^{-n/2} \lim_{\xi \rightarrow \xi_0} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot \xi} dx \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot \xi_0} dx \\ &= \widehat{f}(\xi_0) \end{aligned}$$

Zur Vertauschung von Integration und Konvergenz haben wir den Satz von der majorisierten Konvergenz angewendet, diesen werden wir im Folgenden häufig ebenso stillschweigend verwenden wie den Satz von Fubini.

3. Zur Herleitung der Fourier-Inversionsformel benötigen wir einige Rechenregeln und das folgende Beispiel: Die Fouriertransformierte von $f(x) = e^{-x^2/2}$ auf \mathbb{R} . Es gilt

$$\begin{aligned}\widehat{f}(\xi) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2/2} e^{-ix\xi} dx \\ &= (2\pi)^{-1/2} e^{-\xi^2/2} \int_{\mathbb{R}} e^{(-x+i\xi)^2/2} dx\end{aligned}$$

$f(z)$ ist eine holomorphe Funktion auf \mathbb{C} , also verschwinden komplexe Wegintegrale über geschlossene Pfade (hier verwenden wir ausnahmsweise einmal nicht die Lebesgue-Integration!). Wir verwenden für ein beliebiges $a > 0$ den Pfad $(a : a + i\xi : a - i\xi : -a : a)$ und erhalten

$$\int_{-a}^a e^{-(x+i\xi)^2/2} dx = \int_{-a}^a e^{-x^2/2} dx + \int_0^\xi \underbrace{e^{-(a+it)^2/2}}_{|\cdot| = e^{(t^2-a^2)/2} \leq e^{(\xi^2-a^2)/2}} - e^{-(-a+it)^2/2} dt$$

Das zweite Integral verschwindet für $a \mapsto \infty$, das erste Integral konvergiert gegen $(2\pi)^{1/2}$, also erhalten wir insgesamt

$$\widehat{f}(\xi) = f(\xi) = e^{-\xi^2/2}.$$

4. Sei

$$f_\lambda(x) = f(\lambda x).$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}\widehat{f}_\lambda(\xi) &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(\lambda x) e^{-ix\xi} dx \\ &= (2\pi)^{-n/2} |\lambda|^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix\xi/\lambda} dx \\ &= |\lambda|^{-n} \widehat{f}(\xi/\lambda).\end{aligned}$$

5. Sei

$$f_a(x) = f(x - a).$$

$$\begin{aligned}
\widehat{f}_a(\xi) &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x-a) e^{-ix\xi} dx \\
&= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-i(x+a)\xi} dx \\
&= e^{-i\xi a} \widehat{f}(\xi).
\end{aligned}$$

6. Sei χ_A die charakteristische Funktion der Menge A . Dann gilt

$$\begin{aligned}
\widehat{\chi_{[-1,1]}}(\xi) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{-1}^1 e^{-ix\xi} dx \\
&= (2\pi)^{-1/2} \frac{1}{-i\xi} \left[e^{-ix\xi} \right]_{-1}^1 \\
&= (2\pi)^{-1/2} 2 \frac{e^{ix\xi} - e^{-ix\xi}}{2i} \cdot \frac{1}{\xi} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\sin \xi}{\xi} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sinc} \xi
\end{aligned}$$

mit der Definition

$$\operatorname{sinc}(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad \operatorname{sinc}(0) = 1.$$

Die Sinc-Funktion ist die wichtigste Funktion in der Signalverarbeitung.
Achtung: Die sinc-Funktion ist nicht in L^1 , insbesondere ist also die Fouriertransformation keine Abbildung von L^1 nach L^1 .

TODO Grafik Sinc

7. (Fouriertransformierte der Ableitung) Sei f zusätzlich differenzierbar mit kompaktem Träger.

$$\begin{aligned}
\widehat{f'}(\xi) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} f'(x) e^{-ix\xi} dx \\
&= i\xi (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-ix\xi} dx \\
&= (i\xi) \widehat{f}(\xi)
\end{aligned}$$

Sei α ein Multiindex in \mathbb{N}^n und wie üblich

$$|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i, \quad D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial^{\alpha_1} x_1 \cdots \partial^{\alpha_n} x_n} f, \quad x^\alpha = \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_i}.$$

Dann gilt

$$\widehat{D^\alpha f}(\xi) = i^{|\alpha|} \xi^\alpha \widehat{f}(\xi).$$

8. Seien $f, g \in L^1$, also auch $\widehat{f}g$ und $f\widehat{g}$ (denn \widehat{f} und \widehat{g} sind beschränkt).

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(\xi) g(\xi) d\xi &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x) dx g(\xi) d\xi \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} g(\xi) d\xi dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \widehat{g}(x) dx \end{aligned}$$

(Parsevalsche Gleichung für L^1).

9. Sei $f \in C_0^k(\mathbb{R}^n)$ und $|\alpha| \leq k$. Wegen

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{1}{i^{|\alpha|} \xi^\alpha} \widehat{D^\alpha f}(\xi)$$

gilt

$$|\widehat{f}(\xi)| \leq C(\alpha) |\xi|^{-\alpha},$$

und damit fallen insbesondere die Fouriertransformationen unendlich oft differenzierbarer Funktionen schneller als die Kehrwerte jeder Potenz von ξ . Bei der Umkehrung der Integration wurde der Satz von Fubini benutzt. Bemerkung: Für Fouriertransformierte von differenzierbaren Funktionen mit nicht kompaktem Träger gilt der Satz im Allgemeinen ebenfalls, allerdings muss dann vorher die Existenz der jeweiligen Integrale sichergestellt werden.

Definition 4.2.4. (Faltung) Seien $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann ist die Faltung von f und g definiert durch

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x-y) g(y) dy.$$

Bemerkung:

1.

$$f * g = g * f.$$

2.

$$\begin{aligned} \|f * g\|_1 &= \int_{\mathbb{R}^n} \left| \int_{\mathbb{R}^n} f(x-y) g(y) dy \right| dx \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} |f(x-y)| |g(y)| dy dx \\ &\leq \|f\|_1 \|g\|_1 \end{aligned}$$

Satz 4.2.5. (Faltungssatz) Seien $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

$$\widehat{(f * g)}(\xi) = (2\pi)^{n/2} \widehat{f}(\xi) \widehat{g}(\xi).$$

Beweis: Nach Definition gilt

$$\begin{aligned} \widehat{f * g}(\xi) &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} \int_{\mathbb{R}^n} f(x-y)g(y) \, dy \, dx \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}} g(y) e^{-iy\xi} \int_{\mathbb{R}^n} f(x-y) e^{-i(x-y)\xi} \, dx \, dy \\ &= (2\pi)^{n/2} \widehat{g}(\xi) \widehat{f}(\xi) \end{aligned}$$

Beispiel 4.2.6. Sei $f = \chi_{[-1,1]}$.

$$(f * f)(x) = \int_{-1}^1 f(x-y)f(y) \, dy = \begin{cases} 0, & |x| > 2 \\ 2 - |x|, & |x| \leq 2 \end{cases}$$

und damit

$$\begin{aligned} \widehat{f * f}(\xi) &= (2\pi)^{1/2} \widehat{f}(\xi)^2 \\ &= (2\pi)^{1/2} \frac{2}{\pi} (\text{sinc } \xi)^2 \\ &= 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} (\text{sinc } \xi)^2. \end{aligned}$$

□

Satz 4.2.7. (Fourier-Inversionsformel) Seien $f, \widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt fast überall

$$f(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(\xi) e^{ix\xi} \, d\xi.$$

Beweis: Nur die Beweisidee auf \mathbb{R} , für den genauen Beweis siehe [6].

Sei zunächst $\psi \in L^1(\mathbb{R})$ beliebig mit

$$\int_{\mathbb{R}} \psi(x) \, dx = 1.$$

Wir definieren

$$\psi_\lambda(x) := \frac{1}{\lambda} \psi(x/\lambda).$$

Für $\lambda \mapsto 0$ ziehen sich diese Funktionen auf dem Nullpunkt zusammen, wir erwarten also, dass $(f * \psi_\lambda)(x)$ für $\lambda \mapsto 0$ nur noch von $f(x)$ abhängt. Tatsächlich konvergiert $f * \psi_\lambda$ bzgl. L^1 gegen f , es gilt also

$$\|f * \psi_\lambda - f\|_1 \mapsto_{\lambda \mapsto 0} 0.$$

Sei nun $\varphi \in L^1$ beliebig. Dann gilt

$$\begin{aligned} \int \widehat{f}(\xi) e^{ix\xi} \varphi(\xi) d\xi &= \int \widehat{f}_{-x}(\xi) \varphi(\xi) d\xi \\ &= \int f_{-x}(\xi) \widehat{\varphi}(\xi) d\xi \\ &= \int f(x - \xi) \widehat{\varphi}(-\xi) d\xi \\ &= (f * \widehat{\varphi}_-)(x) \end{aligned}$$

Wir wählen nun $\psi(\xi) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\xi^2/2}$, also $\widehat{\psi} = \psi$ und $|\psi|_1 = 1$, und $\varphi(\xi) = \psi(\lambda\xi)$. Damit gilt

$$\widehat{\varphi}(\xi) = \frac{1}{\lambda} \widehat{\psi}(\xi/\lambda) = \frac{1}{\lambda} \psi(\xi/(\lambda)) =: \psi_\lambda(\xi).$$

Oben eingesetzt erhalten wir

$$(2\pi)^{-n/2} \int \widehat{f}(\xi) e^{ix\xi} e^{-\lambda^2 \xi^2/2} d\xi = (f * \psi_\lambda)(x)$$

Die linke Seite konvergiert (mit majorisierter Konvergenz) gegen die rechte Seite der Inversionsformel, die rechte Seite konvergiert nach Vorbemerkung fast überall gegen f . \square

Satz 4.2.8. (Plancherel, Erweiterung der FT auf L^2)
Es gibt einen (eindeutig) bestimmten Isomorphismus

$$T : L^2(\mathbb{R}^n) \mapsto L^2(\mathbb{R}^n),$$

so dass $\|Tf\|_2 = \|f\|_2$ und $Tf = \widehat{f} \forall f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$.

Beweis: Forster, ([6]). Beweisidee: Sei $K_R(0)$ der Kreis um 0 mit Radius R . Sei f eine L^2 -Funktion. Dann ist $f_n = f \chi_{K_n(0)}$ eine Funktionenfolge in $L^1 \cap L^2$, die bzgl. L^2 gegen f konvergiert. Man zeigt nun, dass $\widehat{f_n}$ bzgl. L^2 konvergiert und definiert den Grenzwert als die Fouriertransformierte von f . \square

Beispiel 4.2.9. Sei $n = 2$, $f(x) = g(|x|)$. Für $g(|x|) = \frac{1}{1+|x|^2}$ gilt $f \in L_2(\mathbb{R}^2)$,

aber $f \notin L^2(\mathbb{R}^2)$. Die Fouriertransformierte von f_n ist

$$\begin{aligned}
 \widehat{f_n}(\xi) &= (2\pi)^{-1} \int_{|x|<n} e^{-ix\xi} f(x) dx \\
 &= (2\pi)^{-1} \int_0^n \int_0^{2\pi} r e^{-ir|\xi| \cos(\varphi-\psi)} g(r) d\varphi dr \\
 &= \frac{1}{2\pi} \frac{r}{g} (r) \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{-ir|\xi| \cos \varphi} d\varphi}_{2\pi J_0(r|\xi|)} dr \\
 &= \int_0^R r g(r) J_0(r|\xi|) dr
 \end{aligned}$$

und damit

$$\widehat{f}(\xi) = \int_0^\infty r g(r) J_0(r|\xi|) dr.$$

Die Gleichheit mit der Besselfunktion gilt nach Abramowitz-Stegun. Die Existenz des Limes muss nicht gezeigt werden, die wird bereits im Satz von Plancherel gezeigt!

4.2.2 Temperierte Distributionen

Der zweite Begriff, den wir im Rahmen der Vorlesung benötigen, ist die Distributionstheorie — nicht unbedingt notwendig, aber sie wird uns einiges erleichtern. Insbesondere erweitert die Distributionstheorie die Definitionsgebiete der Ableitung und der Fouriertransformation.

Wir erinnern nur kurz an die Definitionen mit einigen Beispielen. Für eine eingehende Diskussion sei beispielsweise auf den Rudin ([16]) verwiesen oder auf das Originalbuch von Laurent Schwartz ([17]).

Sei D der Raum der Testfunktionen. Sei Ω eine offene Teilmenge des \mathbb{R}^n , dann wählen wir $D = C_0^\infty(\Omega)$. Wir versehen D mit der Topologie, die vom Norm-Netz $|f|_k = \sup_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha f\|_\infty$ erzeugt wird. Für den erzeugten Konvergenzbegriff gilt einfach:

$$f_n \mapsto f \iff \|D^\alpha f_n - D^\alpha f\|_\infty \mapsto 0 \forall \alpha \in N^n.$$

Definition 4.2.10. Der Raum der Distributionen auf dem Testraum D besteht aus den stetigen linearen Funktionalen auf D , also

$$D' = \{T : D \mapsto \mathbb{R} \text{ stetig}\}.$$

Wir definieren den Konvergenzbegriff in D' als punktweise Konvergenz, also

$$T_n \mapsto T \iff T_n(\varphi) \mapsto T(\varphi) \forall \varphi \in D(\Omega).$$

Beispiel 4.2.11.

1. Sei $L^1_{loc}(\Omega)$ der Raum der messbaren Funktionen auf Ω , die für alle kompakten Teilmengen K von Ω in $L^1(K)$ liegen.

Sei $f \in L^1_{loc}$. Dann ist

$$T_f(\varphi) := \int_{\Omega} f(x)\varphi(x) dx$$

wohldefiniert. Es gilt $T_f \in D'$, denn: Es gelte $\varphi_k \mapsto \varphi$ in D . Die Vereinigung der Träger von φ_k und φ muss in einer kompakten Menge K in Ω enthalten sein, also ist die Konvergenz gleichmäßig, und es gilt

$$T_f(\varphi_k) = \int_{\Omega} f\varphi_k = \int_K f\varphi_k = \int_K f\varphi = T_f(\varphi),$$

also ist T_f stetig und liegt damit in D' .

Die zentrale Idee zur Erweiterung der Ableitungs- und Fouriertransformations-Begriffe ist nun, T_f mit f zu identifizieren.

2. Die bekannte Distribution ist die Dirac-Delta-Distribution

$$\delta(\varphi) = \varphi(0).$$

Sie ist stetiges Funktional, denn

$$\delta(\varphi_n) = \varphi_n(0) \mapsto \varphi(0)$$

nach Definition der Topologie auf C_0^∞ .

3. Sei M eine beliebige Mannigfaltigkeit im \mathbb{R}^n . Dann ist

$$T_M(\varphi) = \int_M \varphi(x) d\sigma(x)$$

eine Distribution.

4. Um die Ableitung einer Distribution sinnvoll zu definieren, sollte es egal sein, ob man erst eine Funktion ableitet, und sie dann in den Distributionsraum überträgt, oder erst in den Distributionsraum überträgt, und dann ableitet. Für differenzierbares f sollte also gelten

$$(T_f)'(\varphi) = T_{f'}(\varphi) = \int_{\Omega} f'(x)\varphi(x) dx = - \int_{\Omega} f(x)\varphi'(x) dx = -T_f(\varphi').$$

Wir definieren also allgemein die Ableitung einer Distribution T durch

$$T'(\varphi) := -T(\varphi').$$

Insbesondere besitzt damit jede Funktion aus L^1_{loc} eine Ableitung, die allerdings nicht notwendig eine Funktion ist. Für die Signum-Funktion etwa gilt

$$\int_{\mathbb{R}} \operatorname{sgn}(x) \varphi'(x) dx = \int_{-\infty}^0 -\varphi'(x) dx + \int_0^{\infty} \varphi'(x) dx = -2\varphi(0)$$

und damit $\operatorname{sgn}' = 2\delta$.

5. Sei $g \in D$ und $g_x(y) = g(x - y)$. Wir definieren die Faltung einer Distribution mit g . Für die Faltung sollte gelten

$$(T_f * g)(\varphi) = T_{f * g}(\varphi) = \int_{\Omega} \int_{\mathbb{R}^n} f(y) g(x - y) dy \varphi(x) dx = T_{T_f(g_x)} \equiv T_f(g_x)$$

und wir definieren

$$(T * g)(x) := T(g_x).$$

Offensichtlich gilt

$$(\delta * g)(x) = g(x).$$

Diese Bemerkung hat eine interessante Folgerung. Sei $h_z(y) = h(z + y)$, f fest. Dann gilt

$$L_f(h_z)(x) := (f * h_z)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y) h(z + x - y) dy = (f * h)(z + x) = L_f(h)(z + x).$$

Diese Eigenschaft heißt translationsinvariant: Verschiebt man die Funktion h um z , so verschiebt sich L_f ebenfalls um z . Translationsinvarianz ist häufig in der Bildverarbeitung anzutreffen. Bei einer Kamera etwa würden wir erwarten, dass sich das Bild nur verschiebt, wenn sich das Objekt verschiebt, auch wenn es unscharf ist und noch eine Faltung dazwischenliegt.

Man zeigt leicht: Jede translationsinvariante Abbildung ist eine Faltung, und nach der Bemerkung ist der Kern der Faltung gerade das Bild von δ .

6. Leider funktioniert dies schöne Konzept ausgerechnet für die Fouriertransformierte nicht. Hier sollte gelten:

$$(\widehat{T_f})(\varphi) = (T_{\widehat{f}})(\varphi) = \int \widehat{f} \varphi = \int f \widehat{\varphi} = T_f(\widehat{\varphi})$$

und es liegt die Definition $\widehat{T}(\varphi) = T(\widehat{\varphi})$ nahe. Leider sagt ein Satz der FA: Falls $\varphi \in C_0^\infty$, so ist $\widehat{\varphi} = 0$ oder $\widehat{\varphi}$ hat keinen kompakten Träger. Damit ist die Definition unsinnig, denn T ist nur auf C_0^∞ definiert.

Um dennoch zu einer vernünftigen Definition der Fouriertransformierten zu kommen, kam Laurent Schwartz auf die Idee, den Testfunktionenraum zu erweitern. Wir erinnern uns zunächst, dass alle Ableitungen der Fouriertransformation einer unendlich oft differenzierbaren Funktion mit kompaktem Träger schneller fallen als der Kehrwert jedes Polynoms. Wenn wir also sicherstellen wollen, dass die Fouriertransformierten der Funktionen aus C_0^∞ im Testraum liegen, sollten wir den Testraum auf genau diese Funktionen erweitern. Dies führt zur Definition des Schwartzschen Raums:

Definition 4.2.12. *Der Raum S der unendlich oft differenzierbaren Funktionen, für die alle Ableitungen schneller gegen 0 gehen als jedes Polynom, also*

$$S = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) : |x^\alpha D^\beta f| \leq C(\alpha, \beta) \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^n \right\}$$

heißt Schwartzscher Raum. Die Konvergenz auf S definieren wir durch

$$\varphi_k \mapsto \varphi \iff \|x^\alpha D^\beta(\varphi_k - \varphi)\|_\infty \mapsto 0 \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^n.$$

Der Raum S' der stetigen linearen Funktionalen auf S heißt Raum der temperierten Distributionen. Es gilt $D \subset S$, aber $D' \not\subset S'$.

Zu der Bemerkung betrachte zum Beispiel T_f für $f(x) = \exp(x^2/2)$, dann ist $T_f \in D'$ (denn es ist in L_{loc}^1), aber $T_f(\exp(-x^2/2))$ ist nicht einmal definiert.

Definition 4.2.13. *(distributionelle Fouriertransformierte)*

Sei $\varphi \in S$. Dann ist auch $\widehat{\varphi} \in S$, und wir definieren

$$\widehat{T}(\varphi) := T(\widehat{\varphi}), \quad \widetilde{T}(\varphi) := T(\widetilde{\varphi}).$$

Mit dieser Definition gilt natürlich insbesondere

$$\widetilde{\widehat{T}}(\varphi) = \widehat{\widetilde{T}}(\varphi) = \varphi.$$

Beispiel 4.2.14.

$$\widehat{\delta}(\varphi) = \delta(\widehat{\varphi}) = \varphi(0) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \varphi(x) dx$$

und damit

$$\widehat{\delta} = (2\pi)^{-n/2} = \widetilde{\delta}.$$

Auf den ersten Blick macht die klassische Inversionsformel

$$\begin{aligned} \delta(x) &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{\delta}(\xi) e^{ix\xi} d\xi \\ &= (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\xi} d\xi \end{aligned}$$

keinen Sinn, den das hintere Integral existiert gar nicht. Approximiert man allerdings die konstante Funktion durch eine Folge von charakteristischen Funktionen, so erhält man ($n \rightarrow \infty$):

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ix\xi} d\xi = \frac{n}{\pi} \text{sinc}(n\xi) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta.$$

Beispiel 4.2.15. (Cauchy-Hauptwert) Sei

$$T(\varphi) = \oint \frac{\varphi(x)}{x} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{|x| > \epsilon} \frac{\varphi(x)}{x} dx.$$

Offensichtlich ist $1/x$ nicht einmal in L^1_{loc} , aber der Hauptwert existiert (schreibe $\varphi(x) = \varphi(0) + (\varphi(x) - \varphi(0))$).

Wir berechnen die Fouriertransformierte als Grenzwert der Fouriertransformierten von $1/x$ unter Ausschluss der 0, also

$$f_\epsilon(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq \epsilon \\ \frac{1}{x}, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Es gilt

$$\int_{\mathbb{R}} f_\epsilon(x)^2 dx = 2 \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{1}{x^2} dx = \frac{2}{\epsilon} < \infty,$$

also $f_\epsilon \in L^2 \setminus L^1$.

$$\begin{aligned} \widehat{f}_\epsilon(\xi) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{\epsilon < |x| < N} \frac{1}{x} e^{-ix\xi} dx \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{\epsilon}^N \frac{\sin(x\xi)}{x} dx (-i)2 \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_{\epsilon}^N \frac{\sin(x\xi)}{x\xi} e^{ix0} dx \xi \\ &\mapsto -i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \text{sgn}(\xi) \chi_{[-1,1]}(0) \end{aligned}$$

Die letzte Gleichheit ist Dirichlets Integral und einfach nur die inverse Fouriertransformation des sinc, ausgewertet an der Stelle 0.

Wir werden als Folgerung dieses Beispiels die Fouriertransformation der Hilbert-Transformation benutzen. Die Hilbert-Transformation ist definiert durch

$$(Hf)(x) = \frac{1}{\pi} \oint \frac{f(y)}{x-y} dy = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\cdot} * f \right)(x).$$

Damit gilt

$$\widehat{Hf}(\xi) = \frac{1}{\pi}(2\pi)^{1/2} \widehat{1} \cdot \widehat{f} = -i \operatorname{sgn}(\xi) \widehat{f}(\xi).$$

Beispiel 4.2.16. (Fixpunkt der distributionellen Fouriertransformierten im \mathbb{R}^2)

Sei

$$f(x) = \frac{1}{\|x\|} \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^2).$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \widehat{f}(\xi) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{\|x\|} e^{-ix\xi} dx \\ &= \int_0^\infty J_0(r\|\xi\|) dr \\ &= \frac{1}{\|\xi\|} \int_0^\infty J_0(r) dr \\ &= \frac{1}{\|\xi\|} \end{aligned}$$

Dieser Fixpunkt wird uns eine einfache Formel für die Inversion der Radontransformation in zwei Dimensionen liefern.

Wir haben damit die Fouriertransformation von L^1 auf einen deutlich größeren Definitionsraum erweitert. Stillschweigend werden wir im folgenden die eigentlich streng nur für L^1 nachgewiesenen Sätze auch für diese erweiterte Definition benutzen, die entsprechenden Beweise finden sich in der zu Beginn des Kapitels angegebenen Literatur.

4.2.3 Radon-Transformation

Damit haben wir das funktionalanalytische Rüstzeug zusammen.

Definition 4.2.17. Sei C der unendlich lange Zylinder im \mathbb{R}^{n+1} mit

$$C := \{(\theta, s) : \theta \in S^{n-1}, s \in \mathbb{R}\}.$$

Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, $(\theta, s) \in C$. Dann ist die Radon-Transformation $R : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \mapsto$

$S(C)$ definiert durch

$$\begin{aligned}
(Rf)(\theta, s) &= \int_{x \cdot \theta = s} f(x) \, d\mathbf{x} (= d\sigma(x)) \\
&= \int_{\theta^\perp} f(s \cdot \theta + y) \, dy \\
&= \int_{\theta^\perp} \int_{\mathbb{R}} \delta(t - s) f(t\theta + y) \, dt \, dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \delta(x \cdot \theta - s) f(x) \, dx.
\end{aligned}$$

Hierbei schreiben wir die Delta-Distribution als Funktion, die Interpretation im distributionellen Sinne ist offensichtlich. Falls nicht ausdrücklich anders gesagt, beziehen sich Differentiation, Fouriertransformation und Grenzwertbildung in $S(C)$ immer auf das zweite Argument.

Mit Integration unter dem Integralzeichen ist $f \in C^\infty$ und in S im zweiten Argument.

Für praktische Fälle werden wir immer $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ betrachten. Falls $\text{supp } f \subset K_R(0)$, so ist $Rf(\theta, s) = 0$ für $|s| > R$, also insbesondere $Rf(\theta, s) \in C_0^\infty$ im zweiten Argument.

Zunächst zeigen wir, dass unsere funktionalanalytischen Vorbemerkungen tatsächlich sinnvoll waren und nutzen sie, um den Projektionssatz zu beweisen:

Satz 4.2.18. (Projektionssatz, Fourier-Scheiben-Theorem, Fourier-Slice-Theorem)

Sei $f \in S(\mathbb{R}^n)$, $\theta \in S^{n-1}$, $s \in \mathbb{R}$. Dann gilt

$$\widehat{Rf}(\theta, \sigma) = (2\pi)^{(n-1)/2} \widehat{f}(\sigma \cdot \theta).$$

Hierbei ist die Fouriertransformation von Rf eine eindimensionale bezüglich des zweiten Arguments, die Fouriertransformierte von f eine n -dimensionale. Insbesondere ist die Radontransformation invertierbar.

Beweis: Rf ist in S bezüglich des zweiten Arguments. Insbesondere ist also die linke Seite definiert, und wir erhalten durch Einsetzen der Definition

$$\begin{aligned}
\widehat{Rf}(\theta, \sigma) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} (Rf)(\theta, s) e^{-is\sigma} \, ds \\
&= (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} \int_{x \cdot \theta = s} f(x) e^{-is\sigma} \, d\mathbf{x} \, ds \\
&= (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-i\sigma x \cdot \theta} \, d\mathbf{x} \\
&= (2\pi)^{(n-1)/2} \widehat{f}(\sigma \cdot \theta).
\end{aligned}$$

□

Der Satz sagt also: Falls die Radontransformation auf Linien senkrecht zu θ bekannt ist (und damit auch ihre Fouriertransformation), so können die Fourierkoeffizienten von f auf einer Geraden durch den Ursprung mit Richtung θ berechnet werden. Um also Kontraste einer Funktion in einer Richtung θ sehen zu können, muss man im Winkel von 90 Grad daraufschauen – dies entspricht der Erwartung. (Bild Kontrast Fourierraum - Bildraum)

Leider stellt sich heraus, dass der Satz sehr schwierig numerisch umzusetzen ist. Falls Rf wie in unserem einführenden Beispiel für $Rf(\theta_k, s_l)$ bekannt ist, so läge eigentlich der folgende Algorithmus nahe:

1. Berechne die 1D-Fouriertransformierte $\widehat{Rf}(\theta_k, \sigma_l) = \widehat{f}(\sigma_l \theta_k)$.
2. Berechne mit der n D-inversen Fouriertransformation eine Approximation für f .

Schritt 1 kann schnell durchgeführt werden mit Hilfe der schnellen Fouriertransformation, denn die Stützstellen sind äquidistant. In Schritt 2 ist aber die Fouriertransformierte auf einem polaren Gitter bekannt, die FFT arbeitet aber nur auf Rechteckgittern. Hier muss also zunächst interpoliert werden, und man kann zeigen, dass dieser Schritt im allgemeinen instabil ist (außer, man benutzt sehr teure Interpolationsverfahren, siehe ([14])). Eine Alternative ist die Verwendung von nicht-äquidistanten Algorithmen zur schnellen Fouriertransformation, siehe ([7]).

Aufgrund dieser Schwierigkeiten wird im Allgemeinen nicht das Fourier-Scheiben-Theorem, sondern die gefilterte Rückprojektion genutzt, die wir noch kennenlernen werden. Zunächst definieren wir aber noch die Röntgen-Transformation, die z.B. CT in 3D beschreibt. Während die Radon-Transformation als Integral über $(n - 1)$ -dimensionale Mannigfaltigkeiten definiert ist, sind es bei der Röntgen-Transformation immer Linienintegrale.

Definition 4.2.19. (Röntgen-Transformation) Die Röntgen-Transformation ist definiert durch

$$P : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \mapsto \mathcal{S}(C'), \quad C' = \{(\theta, x) \in S^{n-1} \times \mathbb{R}^n : x \cdot \theta = 0\}$$

$$Pf(\theta, x) = \int_{\mathbb{R}} f(x + t\theta) dt.$$

In zwei Dimensionen gilt natürlich

$$Rf(\theta, s) = Pf(\theta^\perp, s \cdot \theta).$$

Die Röntgen-Transformation erlaubt meist ähnliche Sätze wie die Radon-Transformation, auch die Beweise sind sehr ähnlich. Als Beispiel hier kurz Fourier-Slice für die Röntgen-Transformation:

Satz 4.2.20. (Fourier–Slice für die Röntgentransformation) Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

$$\widehat{Pf}(\theta, \xi) = (2\pi)^{1/2} \widehat{f}(\xi), \quad \theta \in S^{n-1}, \quad \xi \in \theta^\perp.$$

Hierbei wird die Fouriertransformierte von Pf im zweiten Argument genommen auf dem Grundraum θ^\perp .

Beweis:

$$\begin{aligned} \widehat{Pf}(\theta, \xi) &= (2\pi)^{(1-n)/2} \int_{\theta^\perp} e^{-ix\xi} Pf(\theta, x) \, dx \\ &= (2\pi)^{(1-n)/2} \int_{\theta^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi} f(x + t \cdot \theta) \, dt \, dx \\ &= (2\pi)^{(1-n)/2} \int_{\theta^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{-i(x+t\theta)\xi} f(x + t \cdot \theta) \, dt \, dx \\ &= (2\pi)^{1/2} \widehat{f}(\xi) \end{aligned}$$

□

Also ist insbesondere auch die Röntgen–Transformation invertierbar.

C' ist eine Mannigfaltigkeit der Dimension $2(n-1)$. Für $n > 2$ ist bei der Inversion der Röntgen–Transformation also die Dimension des Datenraums größer als n , die Dimension des Definitionsraums von f . Das Problem ist also überbestimmt. Dies wird im Satz deutlich: Zur Bestimmung von $\widehat{f}(\xi)$ liefert uns jedes $\theta \in S^{n-1} \cap \xi^\perp$ eine andere Inversionsformel.

Als Anwendung von Fourier–Slice berechnen wir die Radontransformierte einer Ableitung.

Lemma 4.2.21. Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, $\alpha \in \mathbb{N}^n$. Dann gilt

$$R(D^\alpha f) = \theta^\alpha D^{|\alpha|}(Rf).$$

Hierbei bezieht sich die Differentiation in $\mathcal{S}(C)$, wie schon oben angekündigt, auf das zweite Argument.

Beweis:

$$\begin{aligned} \widehat{R(D^\alpha f)}(\theta, \sigma) &= (2\pi)^{(n-1)/2} \widehat{D^\alpha f}(\sigma\theta) \\ &= (2\pi)^{(n-1)/2} (\sigma\theta)^\alpha \widehat{f}(\sigma\theta) i^{|\alpha|} \\ &= i^{|\alpha|} \sigma^{|\alpha|} \theta^\alpha \widehat{Rf}(\theta, \sigma) \\ &= \theta^\alpha D^{|\alpha|}(\widehat{Rf})(\theta, \sigma) \end{aligned}$$

mit Fourier–Slice und den Rechenregeln der Fouriertransformation. Fourier–Slice übersetzt also die Radontransformation in den Frequenzraum, und die Sätze dort übersetzen sich sofort in Sätze über die Radontransformation. □

Satz 4.2.22. (Rückprojektion)

Sei $R^* : \mathcal{S}(C) \mapsto \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ die L_2 -Adjungierte von R . Dann gilt

$$(R^*g)(x) = \int_{S^{n-1}} g(\theta, x \cdot \theta) d\theta.$$

R^*g heißt Rückprojektion von g .

Beweis:

$$\begin{aligned} (Rf, g)_{L_2(C)} &= \int_{\mathbb{R}} \int_{S^{n-1}} g(\theta, s) (Rf)(\theta, s) d\theta ds \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{S^{n-1}} g(\theta, s) \int_{x \cdot \theta = s} f(x) dx d\theta ds \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) g(\theta, x \cdot \theta) dx d\theta \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \underbrace{\int_{S^{n-1}} g(\theta, x \cdot \theta) d\theta}_{=:(R^*g)(x)} dx \\ &= (f, R^*g)_{L_2(\mathbb{R}^n)}. \end{aligned}$$

□

In den schlecht gestellten Problemen spielt die Adjungierte als Approximation für die Inverse häufig eine große Rolle: Zumindest ist sie ein vernünftiger, auf R aufbauender Operator, der zwischen denselben Räumen wie R^{-1} vermittelt. Die meisten iterativen Algorithmen nutzen die Adjungierte als Teiloperator, es ist also sehr nützlich, dass wir diese für die Radontransformation explizit angeben können.

Der Name Rückprojektion macht deutlich, was der Operator tut: Zur Berechnung von $(R^*g)(x)$ werden die Messwerte über alle Linien durch den Punkt x integriert, die Messwerte werden einfach gleichmäßig in den Bildraum zurückprojiziert. Sie ist die einfachste, sehr offensichtliche numerische Inversionsformel für die Radontransformation, bekannt als ungefilterte Rückprojektion: Bilde den Mittelwert aus allen Messungen, die vom Wert $f(x)$ beeinflusst werden, und weise diesen dem Bildpunkt x in der Inversion zu.

Dass dabei kein scharfes Bild herauskommen kann, liegt auf der Hand. Betrachten wir etwa für f die charakteristische Funktion eines kleinen Kreises um den Nullpunkt, und die ungefilterte Rückprojektion $\tilde{f} = R^*Rf$. Für die Punkte x im Kreis haben alle Messlinien durch x einen nichtleeren Schnitt mit dem Träger von f , wir erwarten also zumindest einen nicht-negativen Mittelwert, also

ist $\tilde{f}(x)$ zumindest schon mal positiv. Leider gibt es auch für alle Punkte außerhalb des Supports von f immer Linien, die den Träger schneiden, wir erhalten also auch hier einen positiven Mittelwert. Die Anzahl dieser Linien nimmt aber offensichtlich gerade mit dem Kehrwert des Abstand von x zum Ursprung ab. Eine Delta-Quelle am Ursprung würde also wie $1/||x||$ rekonstruiert werden. Diese einfache geometrische Überlegung führt uns zu der Vermutung

$$R^* Rf = C \left(\frac{1}{||x||} * f \right).$$

Man sieht leicht, dass dies tatsächlich stimmt. Für $n = 2$ gilt

Satz 4.2.23. (Filterung der Rückprojektion im Bildraum) Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

$$R^* Rf = |S^{n-2}| \left(\frac{1}{||\cdot||^{n-1}} * f \right) (x).$$

Beweis:

$$\begin{aligned} R^* Rf(x) &= \int_{S^{n-1}} Rf(\theta, x \cdot \theta) d\theta \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_{y \cdot \theta = x \cdot \theta} f(y) dy d\theta \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_{y \cdot \theta = 0} f(x + y) dy d\theta \\ &= |S^{n-2}| \int_{\mathbb{R}^2} f(x + y) \frac{1}{||y||^{n-1}} dy \\ &= |S^{n-2}| \left(\frac{1}{||\cdot||^{n-1}} * f \right) (x). \end{aligned}$$

□

Hierbei ist der Faktor $|S^{n-2}|$ für $n = 2$ klar, für $n > 2$ ist die Formel ohnehin Spezialfall von 4.2.27.

Zusammen mit dem Faltungssatz und der bekannten Fixpunkteigenschaft $\widehat{1/r} = 1/r$ in zwei Dimensionen liefert dies die zweite Inversionsformel, die wir aber noch viel allgemeiner angeben werden:

Korollar 4.2.24. Für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, $\xi \in \mathbb{R}^2$ gilt

$$\widehat{f}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} (||\xi|| \cdot \widehat{R^* Rf}(\xi)).$$

Beweis: Faltungssatz 4.2.5, 4.2.16, 4.2.23. □

Zunächst wollen wir eine weitere Eigenschaft der Rückprojektion betrachten. Die Rückprojektion einer Faltung im Messraum liefert eine Faltung im Bildraum.

Lemma 4.2.25. Sei $h \in \mathcal{S}(C)$, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

$$(R^*h) * f = R^*(h * Rf).$$

Beweis: Sei $x \in \mathbb{R}^n$.

$$\begin{aligned} (R^*(h * Rf))(x) &= \int_{S^{n-1}} (h * Rf)(\theta, x \cdot \theta) d\theta \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_R h(\theta, x \cdot \theta - s) Rf(\theta, s) ds d\theta \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} h(\theta, x \cdot \theta - s) \int_{y \cdot \theta = s} f(y) dy ds d\theta \\ &= \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}^n} h(\theta, x \cdot \theta - y \cdot \theta) f(y) dy d\theta \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f(y) ((R^*h)(x - y)) dy \\ &= (f * R^*h)(x) \end{aligned}$$

□

Insbesondere gilt: Falls $R * h = \delta$, so gilt $f = R^*(h * Rf)$. Dieser Satz wird die Grundlage für die Implementation des Standardalgorithmus der CT, die gefilterte Rückprojektion, sein.

Wir haben in 4.2.24 bereits gesehen, dass in zwei Dimensionen der Operator, der eine Funktion im Frequenzraum mit $\|\xi\|$ multipliziert, die Radontransformation invertiert. Eine Verallgemeinerung dieses Operators nennen wir Riesz-Potential.

Definition 4.2.26. (Riesz-Potential) Sei $\alpha < n$, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, $g \in \mathcal{S}(C)$. Dann ist

$$\|\xi\|^{-\alpha} \widehat{f}(\xi) \in L^1,$$

denn $\frac{1}{\|\xi\|^\alpha}$ ist für $\alpha < n$ bei 0 integrierbar, und $\widehat{f}(\xi)$ fällt schnell für große $|\xi|$. Somit ist die Abbildung

$$I^\alpha : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \mapsto \mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \widehat{(I^\alpha f)}(\xi) := \|\xi\|^{-\alpha} \widehat{f}(\xi)$$

wohldefiniert und heißt Riesz-Potential. Entsprechend definieren wir für $\alpha < 1$

$$\widehat{(I^\alpha g)}(\theta, \sigma) = |\sigma|^{-\alpha} \widehat{g}(\theta, \sigma).$$

Bemerkung: Das Riesz-Potential einer Funktion liefert seine Faltung mit der inversen Fouriertransformierten von $|\sigma|^{-\alpha}$. Das Riesz-Potential nutzen wir nun, um eine ganze Klasse von Inversionsformeln herzuleiten.

Theorem 4.2.27. Sei $0 \leq \alpha < n$. Dann gilt

$$f = \frac{1}{2}(2\pi)^{(1-n)} I^{-\alpha} R^* I^{\alpha-n+1} R f.$$

Beweis:

$$\begin{aligned} (I^\alpha f)(x) &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \|\xi\|^{-\alpha} \widehat{f}(\xi) e^{ix\xi} d\xi \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}^+} \sigma^{n-1-\alpha} \widehat{f}(\sigma\theta) e^{ix\sigma\theta} d\sigma d\theta \\ &= (2\pi)^{-n+1/2} \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}^+} \sigma^{n-1-\alpha} \widehat{Rf}(\theta, \sigma) e^{i\sigma x\theta} d\sigma d\theta \\ &= (2\pi)^{-n+1/2} \frac{1}{2} \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} |\sigma|^{n-1-\alpha} \widehat{Rf}(\theta, \sigma) e^{i\sigma x\theta} d\sigma d\theta \\ &= (2\pi)^{-n+1} \int_{S^{n-1}} \frac{1}{2} (I^{-n+\alpha+1} Rf)(\theta, x \cdot \theta) d\theta \\ &= \frac{1}{2} (2\pi)^{-n+1} (R^* I^{-n+1+\alpha} Rf)(x) \end{aligned}$$

und daraus folgt der Satz wegen $I^{-\alpha} I^\alpha f = f$. □

Für jedes $\alpha < n$ liefert das Theorem eine Inversionsformel. Wir betrachten die zwei Spezialfälle:

Beispiel 4.2.28.

1. $\alpha = 0$: Dies liefert die gefilterte Rückprojektion,

$$f = \frac{1}{2}(2\pi)^{1-n} R^* I^{1-n} R f.$$

Man erhält das Bild zurück durch Rückprojektion einer gefalteten (gefilterten) Datenfunktion. Dies liefert die Funktion h aus 4.2.25.

2. $\alpha = n - 1$: In diesem Fall erhalten wir

$$f = \frac{1}{2}(2\pi)^{1-n} I^{1-n} R^* g.$$

Man erhält das Bild zurück durch Rückprojektion und eine anschließende Entfaltung im Ortsraum, diesen Algorithmus hatten wir bereits explizit nachgerechnet. Sein Name ist ρ -filtered layergram (layergram ist der Ingenieur-Name für die Rückprojektion, gefiltert wird in 2D gerade mit $\rho = \|x\|$).

Bemerkung:

1. Sei $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^1)$.

$$\begin{aligned}\widehat{I^{1-n}h}(\sigma) &= |\sigma|^{n-1}\widehat{h}(\sigma) \\ &= \operatorname{sgn}(\sigma)^{n-1}\sigma^{n-1}\widehat{h}(\sigma) \\ &= \operatorname{sgn}(\sigma)^{n-1}\widehat{h^{(n-1)}}(\sigma)(-i)^{n-1} \\ &= \widehat{H^{n-1}h^{(n-1)}}(\sigma)\end{aligned}$$

wobei H^{n-1} die $(n-1)$ -mal angewandte Hilberttransformation (4.2.15) einer Funktion ist, und $h^{(n-1)}$ die $(n-1)$. Ableitung von h .

Sei nun n ungerade und $\alpha = 0$. Wegen $H^2h = -h$ ist dann $I^{1-n}h = (-1)^{(n-1)/2}h^{(n-1)}$. Eingesetzt in 4.2.27 ergibt sich damit

$$f(x) = (-1)^{(n-1)/2} \frac{1}{2} (2\pi)^{(1-n)} R^*(Rf)^{(n-1)}(x)$$

wobei $(Rf)^{(n-1)}$ wieder die Ableitung nach der zweiten Variablen ist.

Dies hat eine interessante Konsequenz: Zur Berechnung von $(R^*Rf)(x)$ wird Rf nur auf Hyperebenen benutzt, die durch den Punkt x gehen. Zur Berechnung der Ableitung an einem Punkt muss eine Funktion in einer kleinen Umgebung dieses Punktes bekannt sein.

Falls also $Rf(\theta, x)$ in einer kleinen Umgebung aller Hyperebenen durch den Punkt x bekannt ist, so ist $f(x)$ berechenbar. Die Inversion ist also in einem Sinne lokal: Zur Berechnung des Bildes eines Herzens werden nur Messwerte eingesetzt, die durch (oder fast durch) das Herz gehen.

Im wichtigsten Fall von zwei Dimensionen ist es leider anders: Hier bleibt die Hilberttransformation stehen, die Inversion ist global (denn die Hilberttransformation ist nicht lokal), und zur Berechnung von $f(x)$ muss R^*Rf überall gemessen werden, die Inversion ist nicht lokal.

2. Sei $\alpha = n - 1$ und $n = 3$. Dann gilt

$$\widehat{I^\alpha f}(\xi) = \widehat{I^{1-n}f}(\xi) = \|\xi\|^2 \widehat{f}(\xi) = (\xi_1^2 + \xi_2^2) \widehat{f}(\xi) = \widehat{\Delta f}(\xi)(-i)^2$$

und damit

$$f(x) = -\frac{1}{2(2\pi)^2} \Delta_x \int_{S^2} g(\theta, x \cdot \theta) d\theta.$$

Dies ist Radons originale Inversionsformel für die Dimension 3, für die Dimension 2 rechnen wir Radons Inversionsformel auf dem Übungsblatt nach.

3. Ausgerechnet der erste von Cormack gebaute Tomograph arbeitete nicht mit dieser Formel. Mit Hilfe von Sätzen über spezielle Funktionen leitete

Cormack eine alternative Formel her ([14]). Dabei werden die Daten g als Linearkombination von Kugelflächenfunktionen dargestellt, die Entwicklungskoeffizienten von f , wieder bezüglich der Kugelflächenfunktionen, werden daraus explizit ausgerechnet.

Offensichtlich erfüllt eine Datenfunktion $g = Rf$ unabhängig von θ die Beziehung

$$\int_{\mathbb{R}} g(\theta, s) \, ds = \int_{\mathbb{R}} (Rf)(\theta, s) \, ds = \int_{\mathbb{R}} \int_{x \cdot \theta = s} f(x) \, dx \, ds = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \, dx = C.$$

Tatsächlich lässt sich das Bild von R eindeutig charakterisieren.

Satz 4.2.29. (Bild der Radon-Transformation)

Es ist $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ im Bild von R genau dann, wenn es für alle m ein $q_m \in \mathcal{P}_m(\mathbb{R}^n)$ gibt mit $q_m(\lambda x) = \lambda^m q_m(x)$, $g(\theta, s) = g(-\theta, -s)$ und

$$\int_{\mathbb{R}} s^m Rf(\theta, s) \, ds = q_m(\theta).$$

Beweis: Übungen. □

Bemerkung: Dieser Satz kann beispielsweise zur Qualitätskontrolle von CT-Daten genutzt werden.

4.2.4 Sobolev-Abschätzungen für die Radontransformation

Nachdem die Invertierbarkeit nun geklärt ist, stellen wir für die inversen Probleme natürlich die Frage: Sind R und R^{-1} stetig bezüglich vernünftiger Normen? Für R und die L^2 -Norm ist dies leicht zu zeigen. Für ungerades n hatten wir oben die Inversion bereits mit Hilfe der $(n-1)$. Ableitung angegeben, wir wissen also bereits, dass die Inverse stetig ist, wenn in der Norm die $(n-1)$. Ableitung stetig ist. Doch es geht sogar noch etwas besser.

Satz 4.2.30. Sei K kompakt. Dann ist $R : C_0^\infty(K) \mapsto L^2(C)$ stetig bzgl. der L^2 -Norm.

Beweis: Ohne Einschränkung sei $K = [-1, 1]^n$.

$$\begin{aligned} |(Rf)(\theta, s)|^2 &= \int_{y \in \theta^\perp, \|y\|_\infty \leq 1} 1 \cdot f(s\theta + y) \, dy^2 \\ &\leq 2^{n-1} \int_{\theta^\perp} |f(s\theta + y)|^2 \, dy \end{aligned}$$

mit Cauchy-Schwartz und durch Integration über s und θ

$$\|(Rf)\|_{L^2(C)} \leq \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} 2^{n-1} \int_{\theta^\perp} |f(s\theta + y)|^2 \, dy \, ds \, d\theta \leq 2^{n-1} |S^{n-1}| \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}.$$

□

Es seien f und g verallgemeinert differenzierbar, also $g \in H^1(C)$ und $f \in H^1(\mathbb{R}^n)$ für den Sobolevraum H^1 . Die übliche Norm in H^1 enthält die 2-Norm der Funktion und ihrer Ableitungen, es gilt also

$$\begin{aligned}
 \|f\|_{H^1} &= \sum_{|\alpha| \leq 1, \alpha \in \mathbb{N}^n} \|(D^\alpha f)\|_2^2 \\
 &= \sum_{|\alpha| \leq 1} \|\widehat{D^\alpha f}\|_2^2 \\
 &= \sum_{|\alpha| \leq 1} \|\xi^\alpha \widehat{f}\|_2^2 \\
 &= \int_{\mathbb{R}^n} (1 + \xi_1^2 + \xi_2^2 + \dots + \xi_n^2) |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \\
 &= \int_{\mathbb{R}^n} (1 + \|\xi\|_2^2) |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi.
 \end{aligned}$$

Allgemein definieren wir für $\beta \in \mathbb{R}^{\geq 0}$ und f mit $(1 + \|\xi\|^2)^\beta |\widehat{f}(\xi)|^2$ integrierbar

$$\|f\|_{H^\beta}^2 = \int_{\mathbb{R}^n} (1 + \|\xi\|^2)^\beta |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi$$

und

$$\|g\|_{H^\beta}^2 = \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} (1 + \sigma^2)^\beta |\widehat{g}(\theta, \sigma)|^2 d\sigma d\theta.$$

Für ganzzahliges β ist die so definierte Norm äquivalent zur üblichen Norm in H^β .

Satz 4.2.31. (Schlechtgestelltheit der Radontransformation)

Sei $K \in \mathbb{R}^n$ kompakt. Für alle $\alpha \geq 0$ gibt es c, c' (abhängig von K und α), so dass

$$c\|f\|_{H^\alpha(\mathbb{R}^n)} \leq \|Rf\|_{H^{\alpha+(n-1)/2}(C)} \leq c'\|f\|_{H^\alpha(\mathbb{R}^n)} \quad \forall f \in C_0^\infty(K).$$

Insbesondere gilt für $g = Rf$

$$\|R^{-1}g\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} \leq \frac{1}{c}\|g\|_{H^{(n-1)/2}(C)} \leq \frac{c'}{c}\|R^{-1}g\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$$

R^{-1} ist also genau dann stetig, falls die Norm im Datenraum Ableitungen der Ordnung $(n-1)/2$ enthält, also ist die Aufgabe der Inversion von R schlecht gestellt von der Ordnung $(n-1)/2$.

Beweis: Sei ohne Einschränkung $\alpha = 0$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\|Rf\|_{H^{(n-1)/2}}^2 &= \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} (1 + \sigma^2)^{(n-1)/2} |\widehat{Rf}(\theta, \sigma)|^2 d\sigma d\theta \\
&= (2\pi)^{n-1} \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} (1 + \sigma^2)^{(n-1)/2} |\widehat{f}(\sigma\theta)|^2 d\sigma d\theta \\
&= 2(2\pi)^{n-1} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{(1 + \|\xi\|^2)^{(n-1)/2}}{\|\xi\|^{n-1}} |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi.
\end{aligned}$$

Der Bruch ist immer größer als 1, also gilt insbesondere

$$\|Rf\|_{H^{(n-1)/2}}^2 \geq 2(2\pi)^{n-1} \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2.$$

Zum Beweis der zweiten Ungleichung: Für $\|\xi\| \geq 1$ ist der Bruch durch $2^{(n-1)/2}$ nach oben beschränkt. Für $\|\xi\| \leq 1$ existiert das Integral über den Bruch. Wir ziehen aus dem Integral das Supremum von $\widehat{f}(\xi)^2$ heraus und beachten, dass

$$|\widehat{f}(\xi)| = \left| \int_K e^{-ix\xi} f(x) dx \right| \leq \int_K |f(x)| dx \leq |K| \|f\|_{L^2(K)}$$

mit Cauchy–Schwartz. □

Bemerkung: Insbesondere ist die wichtigste Anwendung der Radon–Transformation für die Computertomographie schlecht gestellt von der Ordnung $1/2$ und damit deutlich besser gestellt als die Aufgabe der Berechnung der ersten Ableitung, die schlecht gestellt ist von der Ordnung 1 (nach Definition des Grades der Schlechtgestellttheit).

Bemerkung: Die Schlechtgestellttheit ist bereits in der Inversionsformel 4.2.27 sichtbar. Die Fehler in der Datenfunktion $\widehat{g}(\theta, \sigma)$ werden im Zwischenergebnis mit $|\sigma|^{(n-1)}$ verstärkt, für großes $|\sigma|$ erhalten wir also auch beliebig hohe Rekonstruktionsfehler bei kleinem Datenfehler. Allerdings wird durch die anschließende Integration noch einmal geglättet, so dass sich der Grad der Schlechtgestellttheit insgesamt auf die Hälfte reduziert.

4.3 Implementation

Im letzten Abschnitt haben wir nachgewiesen, dass die Inversion der Radon–Transformation schlecht gestellt ist von der Ordnung $1/2$. Zur Implementation der Algorithmen müssen wir also insbesondere regularisieren. Wir werden dies durch Projektion auf stabile Unterräume tun, wir suchen die Lösung also in Unterräumen, die von Singulärvektoren mit großen zugehörigen Singulärwerten

aufgespannt werden. Hierdurch beschränken wir automatisch die in den Bildern sichtbare Detailgröße (siehe die Einführung zu Beginn dieses Kapitels, dort haben wir bereits angegeben, wie die Singulärwerte diskretisiert aussehen: Es sind die trigonometrischen Funktionen). Die stabile Detailgröße können wir explizit mit Hilfe von Shannons Abtasttheorem angeben.

4.3.1 Shannons Abtasttheorem für bandbeschränkte Funktionen

Die analytischen Formeln invertieren unendlich genaue, kontinuierliche Messungen. Wir vermuten, dass wir durch Diskretisierung von 4.2.27 verlässliche numerische Algorithmen erzeugen können. Dies beantwortet leider die dringenden Fragen der Ingenieure nicht: Wie genau muss man messen (insbesondere: mit welcher Detektordichte), um einen Tumor vorgegebener Größe noch eindeutig rekonstruieren zu können, oder umgekehrt: Objekte welcher Größe kann ein gegebener Tomograph noch rekonstruieren?

Wir untersuchen zunächst in diesem Kapitel, unter welchen Voraussetzungen sich eine diskret abgetastete Funktion eindeutig erkennen lässt. Hierzu nutzen wir die Poissonsche Formel, die einen überraschenden Zusammenhang zwischen einer diskret abgetasteten Funktion und ihrer Fouriertransformierten herstellt.

Satz 4.3.1. (Poissonsche Formel)

Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

$$\sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \hat{f}(\xi + 2\pi l/h) = (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) e^{-ikh\xi}$$

und insbesondere für $\xi = 0$

$$\sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \hat{f}(2\pi l/h) = (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh).$$

Zur Interpretation: Die rechte Seite ist die Diskretisierung von $\hat{f}(\xi + 2\pi l/h)$ mit der Trapezregel an den Punkten $f(kh)$, $l \in \mathbb{Z}^n$ beliebig. Für jedes l bekommt man dieselbe Diskretisierung, deshalb bekommen wir auf der linken Seite eine Summe aller dieser Auswertungen. Die Formel als Approximation ist also ganz natürlich, die Überraschung ist, dass sie exakt ist.

Beweis: Da die linke Seite der Gleichung die Periode $2\pi/h$ hat in ξ und stetig ist, können wir sie in eine Fourierreihe entwickeln auf $[-\pi/h, \pi/h]^n$. Für die Fourierkoeffizienten g_k gilt

$$\begin{aligned}
g_k &= (2\pi/h)^{-n} \int_{[-\pi/h, \pi/h]^n} g(\xi) e^{i(kh) \cdot \xi} d\xi \\
&= (2\pi/h)^{-n} \int_{[-\pi/h, \pi/h]^n} \sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \widehat{f}(\xi + 2\pi l/h) e^{i(kh) \cdot \xi} d\xi \\
&= (2\pi/h)^{-n} \sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \int_{[-\pi/h, \pi/h]^n} \widehat{f}(\xi + 2\pi l/h) e^{i(kh) \cdot \xi} d\xi \\
&= (2\pi/h)^{-n} \sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \int_{[-\pi/h, \pi/h]^n + 2\pi l/h} \widehat{f}(\xi) e^{i(kh) \cdot \xi} \underbrace{e^{-2\pi i k \cdot l}}_{=1} d\xi \\
&= (2\pi/h)^{-n} \sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(\xi) e^{i(kh) \cdot \xi} d\xi \\
&= (2\pi)^{-n/2} h^n f(kh)
\end{aligned}$$

und damit nach Definition von g

$$\sum_{l \in \mathbb{Z}^n} \widehat{f}(\xi + 2\pi l/h) = g(\xi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} g_k e^{-i(hk) \cdot \xi} = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} (2\pi)^{-n/2} h^n f(kh) e^{-i(hk) \cdot \xi}.$$

□

Falls wir also $\widehat{f}(\xi)$ bestimmen wollen, so gilt

$$\widehat{f}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) e^{-i(hk) \cdot \xi} - \underbrace{\sum_{l \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}} \widehat{f}(\xi + 2\pi l/h)}_{\text{Aliasing-Fehler}}.$$

In der Akustik ist der Aliasing-Fehler ein wohlbekanntes Phänomen. Beim Abtasten eines Signals erzeugen Obertöne mit zu hoher Frequenz Geistertöne, die von solchen mit niedriger Frequenz nicht zu unterscheiden sind. Dies lässt sich aber einfach umgehen: Falls wir dafür sorgen, dass in der Formel in der Summe alle Terme verschwinden, so wird die Formel exakt, und es treten keine Geistertöne mehr auf. (TODO: Bilder)

Sei also nun $|\xi| < \Omega'$. Dann treten in der Summe nur Auswertungen von \widehat{f} an Stellen ξ' mit $|\xi'| > 2\pi/h - \Omega'$. Mit einem vorgeschalteten analogen Filter sorgt man nun dafür, dass $\widehat{f}(\xi) = 0$ für $|\xi| \geq \Omega$. Falls $\Omega \leq 2\pi/h - \Omega'$, so treten keine Geistertöne (kein Aliasing) auf. Damit alle auftretenden Frequenzen erkannt werden können, muss die Ungleichung erfüllt sein für $\Omega' = \Omega$, und wir erhalten Nyquists Abtastbedingung

$$h \leq \pi/\Omega.$$

In Techniker–Sprechweise bedeutet dies: Man muss eine Funktion mindestens zweimal pro maximaler Wellenlänge abtasten. Ist die Bedingung nicht erfüllt, so spricht man von Undersampling (sampling=Abtasten). Ist die Bedingung übererfüllt, so spricht man von Oversampling. Unterabtastung führt zu Artefakten (Schwebungen, Moiré–Muster).

Beispiel: Das menschliche Ohr nimmt Frequenzen etwa im Bereich von 20 bis 20.000 Hz auf. Um die maximale Frequenz erkennen zu können, wird bei CDs mit 44.100 Hz abgetastet (statt, wie nötig, mit 40.000 Hz), es wird also leicht überabgetastet. Der Grund ist, dass analoge Filter nicht hart abschneiden, sie brauchen einen langsamen Übergang im Fourierraum. Sie werden daher so gebaut, dass bis 20 KHz keine Änderung im Fourierraum stattfindet, und dann bis $44.100/2 = 22.050$ Hz bis auf 0 heruntergefiltert wird. Tatsächlich ist dies sogar noch zu knapp und wird nur mit zusätzlichen technischen Tricks erreicht. Wichtig ist hier aber, zu bemerken: Mit rein digitalen Aufnahmeverfahren kommt man nicht weiter, es muss vor der ersten Digitalisierung immer eine analoge Stufe vorgeschaltet werden.

Es macht also Sinn, sich mit Funktionen zu beschäftigen, deren Fouriertransformierte jenseits einer Grenze Ω verschwindet.

Definition 4.3.2. Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. f heißt (wesentlich) Ω –bandbeschränkt, falls $\widehat{f}(\xi)$ (fast) $= 0$ für $\|\xi\| > \Omega$.

Beispiel: Sei $x \in \mathbb{R}^n$ und

$$\text{sinc}(x) := \text{sinc}(x_1) \cdot \dots \cdot \text{sinc}(x_n).$$

Dann gilt

$$\widehat{\text{sinc}}(\xi) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{n/2} \chi_{[-1,1]^n}(\xi).$$

Insbesondere ist der Sinc bandbeschränkt mit Bandbreite 1. Mit

$$\text{sinc}_\Omega(x) := \text{sinc}(\Omega x)$$

ist sinc_Ω bandbeschränkt mit Bandbreite Ω .

Korollar 4.3.3. Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Dann verschwindet der Aliasing–Fehler

$$\sum_{l \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}} \widehat{f}(\xi + 2\pi l/h)$$

für Ω –bandbeschränkte Funktionen für $h \leq \pi/\Omega$. Für $\xi = 0$ gilt sogar

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x) dx = \widehat{f}(0) = (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh)$$

für $h \leq 2\pi/\Omega$, d.h. die Trapezregel ist exakt.

Man kann sich fragen, was die Bandbeschränktheit im Ortsraum für die Detailauflösung bedeutet. Eine einfache Deutung ist: Ω -bandbeschränkte Funktionen können eindeutig rekonstruiert werden, wenn der Abstand zwischen zwei Auswertepunkten π/Ω ist. Die Detailauflösung ist also offensichtlich durch π/Ω nach unten beschränkt, andererseits werden größere Details zumindest bemerkt. Wir weisen daher den Ω -bandbeschränkten Funktionen die Auflösung π/Ω zu. Dies entspricht auch ungefähr der technischen Definition (FWHM, full width/half Maximum).

Satz 4.3.4. (Shannonsches Abtasttheorem (Claude Shannon, 1916-2001, Nyquist, Wiener, Whitacker, Kotelnikov, ...))

Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ und Ω -bandbeschränkt, $h \leq \pi/\Omega$. Dann ist f eindeutig und stabil bestimmt durch die Werte $f(kh)$, $k \in \mathbb{Z}^n$ und es gilt

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) \operatorname{sinc}(\pi/h(x - kh)) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) \operatorname{sinc}(\pi x/h - k\pi).$$

Beweis: Natürlich mit der Poissonschen Formel (4.3.1).

Wegen $\Omega \leq \pi/h$ ist f auch bandbeschränkt mit der Bandbreite $\Omega' = \pi/h$. Für $\|\xi\| \leq \Omega'$ verschwindet also wegen $h \leq \pi/\Omega' = h$ der Aliasing-Fehler und es gilt

$$\begin{aligned} \widehat{f}(\xi) &= (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) e^{-ikh\xi} \\ &= (2\pi)^{-n/2} h^n \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} f(kh) e^{-ikh\xi} \chi_{[-\pi/h, \pi/h]^n}. \end{aligned}$$

Da aber sowohl linke als auch rechte Seite verschwinden für $\|\xi\| > \pi/h$, gilt die Gleichung auch dort, und der Satz folgt durch inverse Fouriertransformation. \square

Korollar 4.3.5. Seien f und g Ω -bandbeschränkt. Dann ist für $h \leq \pi/\Omega$

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)g(x) dx = h^n \sum_k f(kh)g(kh).$$

Beweis: Einsetzen der Sincreihe, der sinc ist ein ONS. \square

Bemerkung: Das Shannon-Theorem gilt (mit angepassten Definitionen) auch für Distributionen, wenn man $h < \pi/\Omega$ wählt (ohne Beweis).

Dies ist eine sehr wichtige Aussage: Damit gilt das Theorem insbesondere auch für periodische Funktionen. Die Fouriertransformierte periodischer Funktionen sind Delta-Distributionen, gewichtet mit den Fourierkoeffizienten (betrachte hierzu einfach die Fourierreihe und beachte $e^{ik\xi}$. Wendet man das Shannontheorem für periodische Funktionen an, so ergibt sich

Korollar 4.3.6. Sei f eine stetige, periodische Funktion auf \mathbb{R} mit Periode 2π . Die Fourierkoeffizienten f_k von Ω mit $|k| > \Omega$ seien (im wesentlichen) 0 (periodisch bandbeschränkt). Dann ist f bereits eindeutig bestimmt durch die Werte $f(kh)$, $h = \pi/M$, $M \geq \Omega$, M ganz. Seien f und g periodisch bandbeschränkt, dann gilt

$$\int_0^{2\pi} f(x)g(x) dx = \pi/M \sum_{l=0}^{2M-1} f(lh)g(lh).$$

Diese Sätze wollen wir zur Implementation von Inversionsformeln zur Radon–Transformation nutzen. Angenommen, unser Bild enthält Details bis zur Größe $h = \pi/\Omega$. Wie genau müssen wir die Radon–Transformation messen, und wie müssen wir die analytischen Formeln anpassen, damit die Details gerade noch gesehen werden? Wie können wir den Aufwand möglichst klein halten? Das werden wir im nächsten Abschnitt untersuchen.

4.3.2 Implementation der gefilterten Rückprojektion

Wir nutzen 4.2.25 zur Implementation. Im ganzen Abschnitt ist immer $n = 2$. Seien also $g = Rf$ die gemessenen Daten. Sei $v \in \mathcal{S}(C)$ und $V = R^*v$. Dann wird 4.2.25 zu

$$V * f = R^*(v * g). \quad (4.2)$$

Wählen wir v so, dass V die Dirac–Delta–Distribution ist, so liefert dies eine exakte Rekonstruktionsformel.

Wir wollen aber die Idee der approximativen Inverse nutzen, die wir schon auf dem Übungszettel betrachtet hatten. Wir wollen also nicht f exakt ausrechnen, sondern V so wählen, dass $f * V$ eine Mittelung von f ist. Auf dem Blatt hatten wir gezeigt, dass dies eine Regularisierung der Inversion darstellt.

Im Lichte des letzten Kapitels: Wir nehmen an, dass f keine Details jenseits einer Grenze enthält, in unserer Sprechweise also bandbeschränkt ist mit Bandbreite Ω . Idealerweise sollte V abhängig von Ω so gewählt sein, dass $f * V$ für bandbeschränkte Funktionen das exakte Ergebnis liefert. Wir möchten also V vorgeben und daraus v berechnen. Wir wählen V rotationsinvariant (also: $V(x) = V(|x|)$), und damit auch \widehat{V} rotationsinvariant. Dies ist gesichert, wenn wir $v(\theta, s) = v(s) = v(-s)$ wählen. In diesem Fall kann man tatsächlich v und V leicht ineinander umrechnen.

Satz 4.3.7. Sei $v \in \mathcal{S}(C)$, $V = R^*v$, $v(\theta, s) = v(s) = v(-s)$. Dann gilt im distributionellen Sinne

$$\widehat{V}(\xi) = 2(2\pi)^{(n-1)/2} |\xi|^{1-n} \widehat{v}(|\xi|).$$

Beweis: Sei $w \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ eine Testfunktion. Dann gilt

$$\begin{aligned}
T_{\widehat{R^*v}}(w) &= (\widehat{R^*v}, w)_{L^2(\mathbb{R}^n)} \\
&= (R^*v, \widehat{w})_{L^2(\mathbb{R}^n)} && \text{Parseval} \\
&= (v, R\widehat{w})_{L^2(C)} && \text{Adjungierte} \\
&= (\widehat{v}, \widehat{(R\widehat{w})})_{L^2(C)} && \text{Parseval} \\
&= (2\pi)^{(n-1)/2} \int_{S^{n-1}} \int_{\mathbb{R}} \widehat{v}(\sigma) w(\sigma \cdot \theta) d\sigma d\theta && \text{Fourier Slice} \\
&= 2(2\pi)^{(n-1)/2} \int_{\mathbb{R}^n} \|\xi\|^{1-n} \widehat{v}(\|\xi\|) w(\xi) d\xi \\
&= T_{2(2\pi)^{(n-1)/2} \|\xi\|^{1-n} \widehat{v}(\|\xi\|)}(w).
\end{aligned}$$

□

Dieser Satz klärt nun auch, wie wir v für die exakte Rekonstruktion wählen müssen. Für $V = \delta$ erhalten wir als Fouriertransformierte die konstante Funktion $1/(2\pi)$ und damit Riesz (4.2.28) als (unstetige!) Rekonstruktionsformel.

Wir wählen aber nun

$$\widehat{V_\Omega}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \widehat{\varphi}(\|\xi\|/\Omega)$$

und

$$\widehat{\varphi}(\sigma) = \begin{cases} \sim 1 & \sigma < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Somit ist V_Ω eine Ω -bandbeschränkte Funktion. Wählt man die Gleichheit in $\widehat{\varphi}$, so ist die Rekonstruktion Ω -bandbeschränkter Funktion nach 4.2 und dem Faltungssatz 4.2.5 exakt. v können wir mit Hilfe von 4.3.7 bestimmen und erhalten

$$\widehat{v_\Omega}(\sigma) = \frac{1}{2} (2\pi)^{1/2-n} |\sigma|^{n-1} \widehat{\varphi}(\sigma/\Omega).$$

Wir sehen natürlich sofort, dass dies eine Implementation der Inversionsformel 4.2.27 ist im Fall $\alpha = 0$, bei der die Multiplikation mit dem Betrag des Arguments der Fouriertransformierten nur für Frequenzen bis Ω durchgeführt wird. Es ist sofort klar, dass die Fehlerverstärkung maximal Ω ist und damit die approximative Inversion stetig.

Die Wahl der Filterfunktion ist in der Praxis entscheidend für die Glattheit der Bilder. Da die Bilder nicht tatsächlich bandbeschränkt sind, bewirkt die Wahl der Gleichheit in der Definition von φ (Ram-Lak-Filter nach Ramachandran und Lakshminarayanan, 1971) ein hartes Abschneiden im Fourierraum, was zu sichtbaren Artefakten führt. Deshalb wählt man häufig weiche Übergänge. Sofort einfallen würde einem ein Übergang mit Hilfe der Sinc-Funktion (Shepp-Logan-Filter) oder der Cosinusfunktion (Cosinus-Filter). Hier gibt es natürlich keine

optimale Wahl, die Wahl bleibt dem Betrachter überlassen, und so bieten denn tatsächlich die Rekonstruktionsprogramme der CT-Hersteller (und auch Matlab in iradon) bis zum Anwender herunter die Wahl eines Filters als Option an. Wir werden uns hier ausschließlich mit dem einfachsten Ram–Lak–Filter beschäftigen.

Für diese Wahl ergibt sich (Übungen)

$$v_{\Omega}(s) = \Omega^2/4\pi^2 u(\Omega s), \quad u(s) = \text{sinc}(s) - \frac{1}{2}(\text{sinc}(s/2))^2. \quad (4.3)$$

Nachdem analytisch die Wahl des Filters geklärt ist, bleibt die Frage, wie wir die Rückprojektion verlustfrei mit Hilfe des Abtasttheorems implementieren. Wir beschränken uns dabei auf die (nicht praxisgerechte) parallele Abtastung: Sei also nun $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ ein (wesentlich) Ω -bandbeschränktes Bild mit Träger im Einheitskreis, $g = Rf$. Es stehen Messungen der Form

$$g_{kl} = g(\theta_k, s_l), \quad \theta_k = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_k) \\ \sin(\varphi_k) \end{pmatrix}, \quad \varphi_k = k\pi/p, \quad s_l = l/p, \\ k = 0 \dots p-1, \quad l = -q \dots q$$

zur Verfügung.

Wegen

$$\widehat{f}(\sigma\theta) = (2\pi)^{(n-1)/2} \widehat{g}(\theta, \sigma)$$

ist mit f auch g Ω -bandbeschränkt (natürlich in der zweiten Variablen).

Zur Implementation von 4.2 müssen wir zunächst v und g falten. Dies tun wir mit der Trapezregel, also

$$(v_{\Omega} * g)(\theta, s) \sim h \sum_l v_{\Omega}(s - s_l) g(lh).$$

v_{Ω} ist nach Definition Ω -bandbeschränkt, g auch (siehe oben), damit ist die Approximation durch die Trapezregel exakt, wenn $h \leq \pi/\Omega$ (4.3.5) und damit

$$q \geq \Omega/\pi.$$

Abschließend müssen wir noch die Rückprojektion implementieren. Sei x konstant. Dann müssen wir das Integral

$$\int_{S^1} (v_{\Omega} * g)(\theta, x \cdot \theta) d\theta$$

diskretisieren. Wir betrachten dieses Integral für festes x und den Integranden abhängig vom Winkel φ . Mit einer sehr ähnlichen Rechnung wie in 4.2.9 (und insbesondere derselben Rechenregel aus dem Abramowitz–Stegun) gilt für die Fourierkoeffizienten des Integranden

$$c_k = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{\|y\| < 1} f(y) e^{-ik\psi} \int_{-\Omega}^{\Omega} \widehat{v_{\Omega}}(\sigma) J_k(\sigma \|x - y\|) i^k d\sigma dy \quad (4.4)$$

wobei ψ das Argument von $(x - y)$ ist. Wieder mit Eigenschaften der speziellen Funktion J_k ist $J_k(x)$ klein für $|k| > |x|$ (Debye's Beziehung). Also ist c_k klein für $k > 2\Omega$. Also ist der Integrand wesentlich periodisch-bandbeschränkt mit Bandbreite 2Ω . Mit Korollar 4.3.6 ist die Diskretisierung durch die Trapezregel also exakt für $\pi/p \leq (2\pi)/\Omega$ und damit

$$p \geq \Omega.$$

Insgesamt erhalten wir damit zusammengefasst:

Korollar 4.3.8. *Sei $p \geq \Omega$ und $q \geq \Omega/\pi$. Sei f eine (wesentlich) Ω -bandbeschränkte Funktion mit Träger im Einheitskreis und $g = Rf$. g sei äquidistant an p Richtungen und $(2q + 1)$ Abständen abgetastet. Dann ist die Rekonstruktionsformel*

$$f(x) = \frac{2\pi}{p} \frac{1}{q} \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{l=-q}^q v_{\Omega}(x \cdot \theta_j - s_l) g(\theta_j, s_l)$$

exakt (für den Ram-Lak-Filter).

Das Korollar hat eine kleine Einschränkung: Da f nur wesentlich bandbeschränkt ist, kommt ein kleiner Aliasing-Fehler für Frequenzen jenseits von Ω hinzu.

Wenn wir eine vorgegebene Auflösung Ω rekonstruieren wollen, erhalten wir also Bedingungen an die Anzahl der Winkel und die Abstände. Wenn wir nichts verschenken wollen, sollten wir $p = \Omega$ und $q = \Omega/\pi$ wählen und damit das optimale Verhältnis

$$p = \pi \cdot q.$$

Es bringt also nichts, etwa die Anzahl der Winkel zu erhöhen, sofern man nicht gleichzeitig auch den Abstand der Detektoren verringert.

Implementiert man die Formel genau so wie angegeben, ist der Aufwand groß. Damit f geeignet rekonstruiert wird, muss es an $O(\Omega^2)$ Stellen ausgewertet werden (f hat Bandbreite Ω und liegt im Einheitskreis!). Die Auswertung erfordert jeweils wieder $O(\Omega^2)$, also erhalten wir $O(\Omega^4)$, das ist zuviel.

Mit einem kleinen Trick können wir diesen Aufwand entscheidend verringern. Wir berechnen zunächst für alle j und k $(v * g(\theta_j, \cdot))(s_k)$ und dann den Wert an der Stelle $x \cdot \theta_j$ durch Interpolation. Damit erhalten wir den Algorithmus:

1. Berechne

$$h_{j,k} = \frac{1}{q} \sum_{l=-q}^q v_{\Omega}(s_k - s_l) g_{j,l}, \quad k = -q \dots q, \quad j = 0 \dots p-1.$$

2. Berechne für alle x auf dem Rekonstruktionsgitter

$$f(x) = \frac{2\pi}{p} \sum_{j=0}^{p-1} h_j(x \cdot \theta_j)$$

wobei h_j eine beliebige Interpolationsfunktion ist mit $h_j(s_k) = h_{j,k}$.

Für den Interpolationsschritt hat man wieder eine große Auswahl, Beispiele sind Spline, Nearest Neighbor, Lineare Interpolation. Bis auf Nearest Neighbor liefern alle eine vergleichbare Rekonstruktionsqualität, die Auswahl überlassen die Rekonstruktionsprogramme häufig wieder dem Anwender (wie auch Matlab).

Wir berechnen wieder den Aufwand. Im ersten Schritt müssen $O(\Omega^2)$ Werte ausgerechnet werden, jeder benötigt eine Summation der Länge $O(\Omega)$, macht insgesamt ein $O(\Omega^3)$. Nutzen wir zur Berechnung der Faltungen den Faltungssatz und schnelle Fouriertransformationen, so reichen hier sogar $O(\Omega^2 \log \Omega)$. Im zweiten Schritt müssen wir wieder $O(\Omega^2)$ Werte ausrechnen mit einer Summation der Länge $O(\Omega)$, macht wieder insgesamt $O(\Omega^3)$, die sich aber diesmal leider nicht verringern lassen. Dies ist ärgerlich – tatsächlich wurden aber vor einigen Jahren approximative Algorithmen zur schnellen Rückprojektion entwickelt, so dass man zumindest für approximative Ergebnisse tatsächlich mit $O(\Omega^2 \log \Omega)$ auskommt.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die auf dem Fourier–Slice–Theorem basierenden Algorithmen natürlich immer nur $O(\Omega^2 \log \Omega)$ Rechenoperationen benötigen (für die schnellen Fouriertransformationen).

Zur Implementation benötigt man die Auswertungen von v_Ω an den Stellen $v_\Omega(k/q) = v_\Omega(k\pi/\Omega)$ für die optimale Beziehung $q = \Omega/\pi$. Hier kann man die Werte häufig besonders einfach angeben. Eingesetzt in die Formel für Ram–Lak etwa ergibt sich

$$v_\Omega(l\pi/\Omega) = \Omega^2/(2\pi^2) \begin{cases} 1/4 & l = 0 \\ 0 & l \neq 0 \text{ gerade} \\ -1/(\pi^2 l^2) & l \text{ ungerade} \end{cases} .$$

Diese Werte wurden auch im Original–Paper von Ram/Lak angegeben und dort anders hergeleitet.

Dieser Algorithmus ist für die CT am Ende im Grunde wertlos, denn die tatsächlichen Daten sind, wie schon mehrfach erwähnt, keine Daten aus Parallelgeometrien. Tatsächlich lässt sich der Algorithmus aber auf die echten Daten anpassen.

Wir schließen damit die Behandlung analytischer Methoden für die Inversion der Radon–Transformation ab. Wir haben gezeigt: Die Inversion ist ein (mild) schlecht gestelltes Problem der Ordnung $1/2$.

4.4 Was fehlt?

Fanbeam. Interlaced (Übungen). Fourier Reconstruction.

Kapitel 5

Iterative Methoden

In den meisten Anwendungen ist das direkte Problem sehr viel besser verstanden als das zugehörige inverse Problem. In vielen Fällen existieren sogar ausgereifte numerische Codes zum Lösen des direkten Problem. Im Operator-Framework der vorherigen Kapitel bedeutet dies, dass es Software zur Berechnung von Tx für ein beliebiges Element $x \in X$ gibt. Daher ist es natürlich, die vorhandenen Algorithmen im Rahmen von iterativen Methoden auch zur Lösung des inversen Problems einzusetzen.

Wir stellen im folgenden einige dieser Methoden, sowohl für lineare als auch nichtlineare, Operatoren vor. Insbesondere werden wir zeigen, dass viele iterative Methoden eine inherente Regularisierung besitzen wenn sie nach einer endlichen Anzahl von Iterationsschritten beendet werden. Mit anderen Worten: Die Anzahl der Iterationsschritte entspricht dem Regularisierungsparameter α und die Abbruchregel der Parameterwahl.

5.1 Landweber-Methoden

Die meisten iterativen Methoden zur Approximation von $T^\dagger y$ basieren auf der Transformation der Normalengleichung

$$T^*Tx = T^*y$$

in eine äquivalente Fixpunktgleichung wie

$$x = x - T^*(Tx - y).$$

Der einfachste iterative Algorithmus wäre

$$x_{k+1} = x_k - T^*(Tx_k - y), \quad k \in \mathbb{N}$$

Führen wir noch einen Relaxierungsparameter $\tau \in \mathbb{R}$ ein so erhalten wir

$$x_{k+1} = x_k - \tau T^*(Tx^k - y) = (I - \tau T^*T)x_k + \tau T^*y, \quad k \in \mathbb{N} \quad (5.1)$$

die sogenannte *Landweber iteration*. Für lineare Gleichungen ist die Standardwahl des Startwertes $x_0 = 0$.

Bemerkung 5.1.1. Die Landweber iteration ist äquivalent zu der Gradientenmethode für das kleinste Quadrate-Problem

$$J(x) := \frac{1}{2} \|Tx - y\|^2 \rightarrow \min_{x \in X},$$

die definiert ist durch

$$x_{k+1} := x_k - \tau J'(x) = x_k - \tau T^*(Tx_k - y)$$

und mit Hilfe der bekannten Resultate über Gradientenmethoden folgt, dass das kleinste Quadrate-Funktional während der iteration kleiner wird, falls τ klein genug gewählt ist.

Wir zeigen zunächst, dass für $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ die Landweber Methode tatsächlich konvergiert:

Theorem 5.1.2 (Konvergenz der Landweber-Methode). Sei $y \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ und $0 < \tau < \frac{2}{\|T\|^2}$, dann gilt

$$x_k \rightarrow T^\dagger y, \text{ wenn } k \rightarrow \infty.$$

Fall $y \notin \mathcal{D}(T^\dagger)$ gilt $\|x_k\| \rightarrow \infty$ wenn $k \rightarrow \infty$.

Beweis. Mit Hilfe der Singulärwertzerlegung mit Singulärsystem (σ_n, u_n, v_n) erhalten wir folgende äquivalente Darstellung von (5.1):

$$\sum_{n=1}^{\infty} (x_{k+1}, u_n) u_n = \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \tau \sigma_n^2) (x_k, u_n) u_n + \tau \sigma_n (y, v_n) u_n.$$

Aus der linearen Unabhängigkeit der Basisvektoren folgt

$$(x_{k+1}, u_n) = (1 - \tau \sigma_n^2) (x_k, u_n) + \tau \sigma_n (y, v_n)$$

für den n -ten Koeffizienten. Mit $x_0 = 0$ und mit Hilfe der Formel für die geometrische Reihe erhalten wir:

$$\begin{aligned} (x_k, u_n) &= \tau \sigma_n (y, v_n) \sum_{j=1}^k (1 - \tau \sigma_n^2)^{k-j} = \frac{(1 - (1 - \tau \sigma_n^2)^{k+1})}{\tau \sigma_n^2} \tau \sigma_n (y, v_n) \\ &= \left(1 - (1 - \tau \sigma_n^2)^{k+1}\right) \frac{1}{\sigma_n} (y, v_n). \end{aligned}$$

Falls $|1 - \tau \sigma_n^2| < 1$, dann gilt $(1 - \tau \sigma_n^2)^{k+1} \rightarrow 0$ und damit

$$(x^k, u_n) \rightarrow \frac{1}{\sigma_n} \langle y, v_n \rangle = \langle x^\dagger, u_n \rangle.$$

Wir benötigen also $0 < \tau \sigma_n^2 < 2$ für alle n um die Konvergenz der Koeffizienten in der Singulärwertzerlegung zu garantieren. Da $\sigma_1 = \max_n \sigma_n = \|T\|$, bedeutet dies $0 < \tau < \frac{2}{\|T\|^2}$. \square

Interpretation als Regularisierungsmethode

Wenn wir $\alpha := \frac{1}{k}$ als Regularisierungsparameter interpretieren gilt

$$g_\alpha(\sigma) = \left(1 - (1 - \tau\sigma^2)^{1/(\alpha-1)}\right) \frac{1}{\sigma}.$$

Für $\tau\sigma^2 < 2$ konvergiert $g_\alpha(\sigma)$ offensichtlich zu $1/\sigma$ für $\alpha = \frac{1}{k} \rightarrow 0$. Mit den Satz 3.1.1 aus Kapitel 3 schließen wir daher, dass $x^k \rightarrow x^\dagger$ für $k \rightarrow \infty$. Ebenfalls analog zu Kapitel 3 kann die Konvergenz jedoch beliebig langsam sein wenn die Daten nicht zusätzliche Glattheitsbedingungen erfüllen.

Bemerkung 5.1.3. *Under der obigen Bedingung an τ können wir zeigen, dass das kleinste-Quadrate Funktional kleiner wird, wenn es gilt*

$$\begin{aligned} \|Tx_{k+1} - y\|^2 &= \|Tx_k - y - \tau TT^*(Tx_k - y)\|^2 \\ &= \|Tx_k - y\|^2 + \tau^2 \|TT^*(Tx_k - y)\|^2 - 2\tau \langle Tx_k - y, TT^*(Tx_k - y) \rangle \\ &= \|Tx_k - y\|^2 + \tau (\tau \|TT^*(Tx_k - y)\|^2 - \|T^*(Tx_k - y)\|^2) \\ &\leq \|Tx_k - y\|^2 + \tau \|T^*(Tx_k - y)\|^2 \underbrace{(\tau \|T\|^2 - 2)}_{\leq 0} \leq \|Tx_k - y\|^2. \end{aligned}$$

Konvergenzraten

Um ein Konvergenzrate zu erhalten, nehmen wir an, dass die folgende Quellbedingung erfüllt ist:

$$x^\dagger = T^*p \text{ for } p \in Y.$$

Dann gilt für die Singulärwerte im Singulärsystem (σ_n, u_n, v_n) :

$$(x_k - x^\dagger, u_n) = \left(1 - (1 - \tau\sigma_n^2)^k\right) \frac{1}{\sigma_n} (y, v_n) - (x^\dagger, u_n) = -\sigma_n (1 - \tau\sigma_n^2)^{k-1} (p, v_n).$$

Die positive Funktion $r(\sigma) := \sigma(1 - \tau\sigma^2)^{k-1}$ hat ein eindeutiges Maximum in dem Intervall $(0, \sqrt{\frac{2}{\tau}})$ an der Stelle $\bar{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\tau(2k-1)}}$ und daher

$$|(x_k - x^\dagger, u_n)| \leq r(\bar{\sigma}) \|p\| \leq \frac{1}{\sqrt{\tau(2k-1)}} \|p\|.$$

Damit gilt für den Fehler

$$\|x_k - x^\dagger\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right).$$

Beispiel: Seitwärts Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten als Beispiel das sogenannt Inverse Heat Conduction Problem (IHCP):

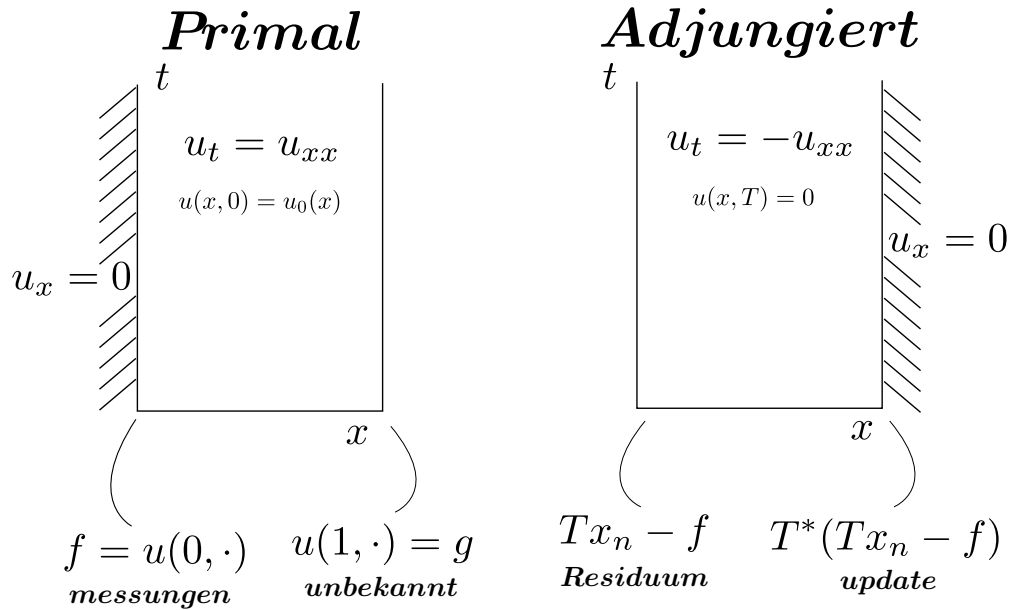


Abbildung 5.1: Das inverse head conduction Problem

Verrauschte Daten

Wir betrachten nun den Fall von verrauschten Daten, d.h. wir haben y^δ mit

$$\|y - y^\delta\| \leq \delta.$$

Um die Abhängigkeit vom Rauschen zu verdeutlichen schreiben wir im folgenden x_k^δ .

$$x_{k+1}^\delta = x_k^\delta - \tau T^*(Tx_k^\delta - y^\delta) = (I - \tau T^*T)x_k^\delta + \tau T^*y^\delta. \quad (5.2)$$

Da in dieser iteration nur die (stetigen) Operatoren T und T^* angewandt werden müssen ist diese Methode wohldefiniert für beliebige k , insbesondere auch für $k \rightarrow \infty$. Da wir jedoch $\alpha = \frac{1}{k}$ als Regularisierungsparameter interpretiert haben und daher α immer positiv sein muss folgern wir dass für verrauschte Daten die Iteration nach endlich vielen Schritten abgebrochen werden sollte. Insbesondere sollte die Anzahl der Iterationen k_* von den verrauschten Daten und dem Rauschlevel δ anhängen, also $k_* = k_*(\delta, y^\delta)$.

Wir benutzen wieder die Singulärwertzerlegung und schreiben den Fehler als

$$\begin{aligned} \langle x_\delta^k - x^\dagger, u_n \rangle &= \left(1 - (1 - \tau \sigma_n^2)^{k-1}\right) \frac{1}{\sigma_n} \langle y^\delta, v_n \rangle - \frac{1}{\sigma_n} \langle y, v_n \rangle \\ &= \left(1 - (1 - \tau \sigma_n^2)^{k-1}\right) \frac{1}{\sigma_n} \langle y^\delta - y, v_n \rangle + (1 - \tau \sigma_n^2)^{k-1} \frac{1}{\sigma_n} \langle y, v_n \rangle. \end{aligned}$$

Da der zweite Term in der Summe exponentiel gegen Null konvergiert für $k \rightarrow \infty$ folgt

$$(1 - \tau \sigma_n^2)^{k-1} \frac{1}{\sigma_n} \langle y, v_n \rangle = (1 - \tau \sigma_n^2)^{k-1} \langle x^\dagger, v_n \rangle.$$

Für $k > 1$ kann der Betrag des ersten Term abgeschätzt werden durch

$$\left(1 - (1 - \tau\sigma_n^2)^{k-1}\right) \frac{1}{\sigma_n} |\langle y^\delta - y, v_n \rangle| = \tau\sigma_n \sum_{j=0}^{k-2} (1 - \tau\sigma_n^2)^j |\langle y^\delta - y, v_n \rangle| \leq \tau\sigma_n k\delta.$$

Betrachten wir nun den Fehler zwischen der exakten und der regularisierten Lösung genauer. Ihr Komponenten in der Singulärwertzerlegung können mit den gleichen Methoden wie oben abgeschätzt werden als

$$|\langle x_\delta^{k_*(\delta)} - x^\dagger, u_n \rangle| \leq \tau\sigma_n k_* \delta + (1 - \tau\sigma_n^2)^{k-1} \|x^\dagger\|.$$

Wählen wir also, für $\delta \rightarrow 0$, denn Stop-Index so dass $k_*(\delta) \rightarrow \infty$ und $k_*(\delta)\delta \rightarrow 0$, dann konvergieren alle Komponenten gegen Null und damit, $x_\delta^{k_*(\delta)} \rightarrow x^\dagger$, d.h. die Landweber-Iteration ist eine konvergenze Regularisierungsmethode. Für solche iterativen Methoden ist es sehr einfach a-posteriori Stop-Regeln wie das Diskrepanzprinzip zu benutzen:

$$k_*(\delta, y^\delta) := \inf\{k \in \mathbb{N} \mid \|Tx_k^\delta - y^\delta\| < \eta\delta\},$$

mit $\eta \geq \frac{2}{2-\tau\|T\|}$. Grob bedeutet dies, dass wir die Iteration stoppen, sobald der Fehler zum ersten mal kleiner oder gleich dem Rauschen ist. Um diese Regel zu implementieren muss man also nur $Tx_k^\delta - y^\delta$ (das ohnehin in jeder Iteration berechnet wird) auswerten und mit dem Rauschlevel vergleichen. Um dieses Diskrepanzprinzip besser zu verstehen betrachten wir wieder den Fehler:

$$\begin{aligned} \|x_{k+1}^\delta - x^\dagger\|^2 - \|x_k^\delta - x^\dagger\|^2 &= \tau^2 \|T^*(Tx_k^\delta - y^\delta)\|^2 - 2\tau \langle x_k^\delta - x^\dagger, T^*(Tx_k^\delta - y^\delta) \rangle \\ &= \tau^2 \|T^*(Tx_k^\delta - y^\delta)\|^2 - 2\tau \langle Tx_k^\delta - y, Tx_k^\delta - y^\delta \rangle \\ &\leq \tau^2 \|T\| \|Tx_k^\delta - y^\delta\|^2 - 2\tau \|Tx_k^\delta - y^\delta\|^2 - 2\tau \langle y^\delta - y, Tx_k^\delta - y^\delta \rangle \\ &\leq -\tau \|Tx_k^\delta - y^\delta\| \left((2 - \tau\|T\|) \|Tx_k^\delta - y^\delta\| - 2\delta \right) \\ &\leq -\frac{\tau}{\eta} \|Tx_k^\delta - y^\delta\| \left(\|Tx_k^\delta - y^\delta\| - \eta\delta \right). \end{aligned}$$

So lange $k < k_*$ können wir die Negativität der rechten Seite garantieren und damit

$$\|x_\delta^{k+1} - x^\dagger\|^2 \leq \|x_\delta^k - x^\dagger\|^2,$$

d.h. der Fehler verringert sich mindestens bis der Stop-Index erreicht ist.

Man kann weiterhin zeigen (cf. [4]) dass auch das Diskrepanzprinzip eine konvergente Regularisierungsmethode liefert. Falls x^\dagger zusätzlich noch eine Quellbedingung der Art $x^\dagger = T^*p$ für $p \in Y$ erfüllt gilt sogar

$$\|x_\delta^{k_*} - x^\dagger\| = \mathcal{O}(\sqrt{\delta}),$$

also ein Resultat analog zu den stetigen Regularisierungsmethoden aus Kapitel 3.

Nichtlineare Probleme

Wir diskutieren nun die Erweiterung der Landweber-Iteration auf nichtlineare Probleme der Form

$$F(x) = y.$$

Motivation ist die Beobachtung dass die Landweber-Iteration im nichtlinearen Fall gerade die Gradienten-Abstiegsmethode für das zugehörige kleinste-Quadrate Funktional $\frac{1}{2}\|Tx-y\|^2$ ist. Im Fall eines nichtlinearen Problems $F(x) = y$ betrachten wir daher das Funktional

$$J(x) := \frac{1}{2}\|F(x) - y^\delta\|^2.$$

Seine Ableitung ist gegeben durch

$$J'(x) = F'(x)^*(F(x) - y)$$

und wir erhalten damit die nichtlineare Landweber-Iteration:

$$x_\delta^{k+1} = x_\delta^k - \tau F'(x_\delta^k)^*(F(x_\delta^k) - y). \quad (5.3)$$

Im nichtlineare Fall ist die Wahl des Anfangswertes von besonderer Bedeutung denn x_0 spielt die selbe Rolle wie die a-priori Information x^* bei der Tikhonov-Regularisierung und kann (im Fall von mehreren Lösungen) festlegen, gegen welche Lösung der Algorithmus konvergiert. Wir betrachten nun den Fehler genauer (für eine detaillierte Analyse des Algorithmus siehe [4]), ähnlich zum linearen Fall gilt:

$$\begin{aligned} & \|x_{k+1}^\delta - x^\dagger\|_2 - \|x_k^\delta - x^\dagger\|_2 \\ &= \tau_2 \|F'(x_k^\delta)^*(F(x_k^\delta) - y^\delta)\|_2 - 2\tau \langle x_k^\delta - x^\dagger, F'(x_k^\delta)^*(F(x_k^\delta) - y^\delta) \rangle \\ &\leq \tau_2 \|F'(x_k^\delta)\|_2 \|F(x_k^\delta) - y^\delta\|_2 - 2\tau \langle F(x_k^\delta) - y, F(x_k^\delta) - y^\delta \rangle \\ &\quad + 2\tau \langle F(x_k^\delta) + F'(x_k^\delta)(x_k^\delta - x^\dagger) - F(x^\dagger), F(x_k^\delta) - y^\delta \rangle \end{aligned}$$

Die ersten beiden Terme sind analog zum linearen Fall während der dritte, zusätzliche Term die nichtlinearität des Problems widerspiegelt. Da $F(x_k^\delta) + F'(x_k^\delta)(x_k^\delta - x^\dagger) - F(x^\dagger)$ eine erste Ordnung Taylorentwicklung ist erwartet man (zumindest lokal um die Lösung) eine Abschätzung der Art

$$\|F(x_k^\delta) + F'(x_k^\delta)(x_k^\delta - x^\dagger) - F(x^\dagger)\| \leq c \|x_k^\delta - x^\dagger\|^2.$$

Wie wir bereits früher gesehen haben kann der Fehler $\|x_k^\delta - x^\dagger\|^2$ viel größer sein als $\|F(x_k^\delta) - F(x^\dagger)\|$ und damit wird uns eine solche Abschätzung nicht helfen um zu zeigen dass der Fehler in jeder Iteration kleiner wird. Für die Konvergenzanalyse zeigt sich, dass eine Bedingung der Form

$$\|F(x_k^\delta) + F'(x_k^\delta)(x_k^\delta - x^\dagger) - F(x^\dagger)\| \leq c \|F(x_k^\delta) - F(x^\dagger)\| \quad (5.4)$$

mit $c < \frac{1}{2}$ ausreichend ist, zumindest lokal um eine Lösung. Die Bedingung 5.4 beschränkt die Art der nichtlinearität des Operators F und wird *tangential cone condition* genannt. Diese Bedingung ersetzt in gewisser Weise die stetige Invertierbarkeit des Operators $F'(x^\dagger)$, die bei der Konvergenzanalyse wohlgestellter Probleme eine zentraler Voraussetzung ist. Conditions on the nonlinearity are not just artificial inventions, it can be shown that a slightly weaker condition than (5.4) is actually necessary for the convergence of the Landweber iteration (cf. [?]).

5.2 Newton-artige Methoden

Die grundlegende Idee von Newton-Methoden für nichtlineare Probleme wie (??) ist eine lokale Linearisierung. Daher beinhaltet jeder Schritt der Methode die Lösung des linearen Problems

$$F'(x^k)(x^{k+1} - x^k) = -(F(x^k) - y). \quad (5.5)$$

Da $F'(x^k)$ jedoch im Fall schlecht-gestellter Probleme keine regulärer Operator ist, ist die Gleichung zur Berechnung von selbst ein schlecht-gestelltes, lineares Problem und x^{k+1} muss damit nicht wohl-definiert sein. Eine gebräuchliche Strategy to Konstruktion von Newton-Methoden für nichtlineare, schlecht-gestellte Probleme ist daher Gleichung (5.5) mit einer Methode für lineare Problem zu regularisieren. Zum Beispiel ergibt Tikhonov-Regularisierung (wobei $x^{k+1} - x^k$ als die Unbekannte interpretiert wird)

$$(F'(x^k)^* F'(x^k) + \alpha_k I)(x^{k+1} - x^k) = -F'(x^k)^* (F(x^k) - y), \quad (5.6)$$

die sogenannte *Levenberg-Marquardt-Methode*. Alternativ kann man die Tikhonov-Regularisierung auch mit anderen a-priori Informationen versehen, die gebräuchlichste Form ist der Startwert x_0 in jedem Iterationsschritt:

$$(F'(x^k)^* F'(x^k) + \alpha_k I)(x^{k+1} - x^k) = -F'(x^k)^* (F(x^k) - y) + \alpha_k (x^0 - x^k). \quad (5.7)$$

Diese Verfahren wird *iterativ regularisierte Gauss-Newton-Methode* genannt. Der zusätzliche Term erhöht in einigen Fällen die Stabilität der Methode. Wir bemerken, dass in beiden Fällen immernoch der Stop-Index der Regularierungsparameter ist, nicht α_k ! Der Parameter α_k kann so gewählt werden, dass er gegen Null konvergiert für $k \rightarrow \infty$, um eine Überdämpfung der Newton-Methode zu vermeiden. Im fall der Gauss-Newton-Methode ist $\alpha_k \rightarrow 0$ sogar eine notwendige Voraussetzung für die Konvergenz der Methode, denn für $\alpha_k \rightarrow \alpha_\infty > 0$ würde man die Lösung des Tikhonov-Regularisierten Problems approximieren und nicht die Lösung von (??).

The convergence analysis of Newton-type method is rather involved and shall therefore be omitted here, we only mention that similar (sometimes weaker) nonlinearity conditions as for the nonlinear Landweber iteration are used.

We finally mention that any suitable linear regularization method can be applied to the Newton step, in particular also linear iterative methods such as Landweber iteration or conjugate gradient methods, leading to methods called *Newton-Landweber* or *Newton-CG*. The above decay of α_k to zero corresponds to an increase of the inner iteration number in such cases.

5.3 Iterative Methods als Zeit-Diskrete Flüße (time-discrete flows)

Wir schließen diese Kapitel mit der Interpretation iterativer Regularisierungsmethoden als Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen. We starten wieder mit der Landweber-Iteration die wir umschreiben als

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau} = -T^*(Tx_k - y)$$

Wenn wir τ als Schrittweite und $x^k = x(k\tau)$ als Zeitschritte eines Flusses interpretieren, dann entspricht die Landweber-Iteration einer expliziten (forward Euler) diskretisierung

$$\frac{dx}{dt}(t) = -T^*(Tx(t) - y), \quad (5.8)$$

d.h. einer asymptotischen Regularisierung. Analog erhalten wir für das Newton-Verfahren

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau} = -F'(x^k)(F(x^k) - y).$$

underbrace

$$\frac{dx}{dt}(t) = -F'(x(t))^*(F(x(t)) - y), \quad (5.9)$$

From this correspondance to the flow (5.9) it seems natural to try other time discretizations. The implicit time discretization (backward Euler) yields the nonlinear equation

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau} = -F'(x^{k+1})(F(x^{k+1}) - y),$$

which is the optimality condition of the optimization problem

$$\|F(x) - y\|^2 + \frac{1}{\tau} \|x^{k+1} - x^k\|^2 \rightarrow \min_{x \in X},$$

well-known from Tikhonov regularization. The corresponding iterative procedure is therefore called *iterated Tikhonov regularization*. If we perform a semi-implicit time discretization, i.e., approximating $F'(x)^*$ explicitly and $F(x)$ by a first-order Taylor expansion around the last time step x^k we end up with the Levenberg-Marquardt method. The iteratively regularized Gauss-Newton method corresponds to a non-consistent semi-implicit time discretization.

From this motivation it is not surprising that general Runge-Kutta methods (even non-consistent ones) applied to the flow (5.9) yield convergent iterative regularization methods, as recently shown by Rieder [?].

5.4 Konjugierte-Gradienten-Verfahren

Die Methode der konjugierten Gradienten ist vermutlich das am weitesten verbreitete Schema für die Lösung linearer Gleichungssysteme mit positiv-definiten Operatoren. Ohne die Voraussetzung, dass T symmetrisch und positiv-definit ist kann man das Konjugierte-Gradienten-Verfahren nur auf die Gauß-Normalengleichung

$$T^*Tx = T^*y \quad (5.10)$$

anwenden (Conjugate Gradient Method on the Normal Equations, CGNE). Die wichtigste Eigenschaft des Verfahrens ist, dass das Residuum in einem Krylov-Unterraum minimiert wird (verschoben um x_0 in Falle eines nicht-homogenen Startwertes), d.h.

$$\|Tx^k - y\| = \min\{\|Tx - y\| \mid x - x^0 \in \mathcal{K}_k(T^*(y - Tx^0), T^*T)\},$$

mit

$$\mathcal{K}_k(z, B) := \{ B^j z \mid j = 0, 1, 2, \dots, k \}.$$

Da die Minimierung von $\|Tx^k - y\|$ im allgemeinen ein schlecht-gestelltes Problem ist, kann dies als Regularisierung durch Projektion in den kompakten, endlich-dimensionalen Unterraum $\mathcal{K}_k(T^*(y - Tx^0), T^*T)$ interpretiert werden. Der komplette Algorithmus lautet dann:

- Initialisiere $x^0, d^0 = y - Tx^0, p^1 = s^0 = T^*d^0$.
- Für $k = 1, 2, \dots$ und solange $s^{k-1} \neq 0$: Berechne

$$\begin{aligned} q^k &= Tp^k \\ \alpha^k &= \|s^{k-1}\|^2 / \|q^k\|^2 \\ x^k &= x^{k-1} + \alpha^k p^k, \\ d^k &= d^{k-1} - \alpha^k q^k, \\ s^k &= T^*d^k, \\ \beta^k &= \|s^k\|^2 / \|s^{k-1}\|^2, \\ p^{k+1} &= s^k + \beta^k p^k. \end{aligned}$$

From the iteration procedure one observes that the conjugate gradient method is a nonlinear iteration scheme, which is the most fundamental difference to all regularization methods considered above. This means that the conjugate gradient method (even for linear ill-posed problems) is a nonlinear regularization method. The convergence analysis can therefore not be based on general results obtain for linear regularization methods as above, but has to be carried out by other means. Fortunately, the nonlinearity is not too strong to destroy the possibility of using the singular value decomposition for most parts of the analysis (cf. [?, ?]).

5.5 Konjugierte Gradienten (Frank)

Wir wollen nun eins der am häufigsten genutzten iterativen Verfahren auf seine Eigenschaften im Sinne der schlecht gestellten Probleme untersuchen. Die Grundeigenschaften werden in den Anfängervorlesungen ([19]) behandelt. Die Beweise zu den allgemeinen Eigenschaften von CG finden sich z.B. bei Braess ([2]) und Anne Greenbaum ([8]). Die Anwendungen auf inverse Probleme werden zum Beispiel im klassischen Buch von Louis ([12]) untersucht.

5.5.1 Krylovraumverfahren

Krylovraumverfahren sind iterative Verfahren für lineare Gleichungssysteme mit positiv definiter Systemmatrix. Die Lösung des Gleichungssystems wird mit dem folgenden Satz durch die Minimierung eines Funktionalen ersetzt.

Satz 5.5.1. Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv definit, $b \in \mathbb{R}^n$, und

$$J : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}, J(x) = \frac{1}{2}(x, Qx) - (b, x).$$

Dann gilt

$$\tilde{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} J(x) \iff Q\tilde{x} = b.$$

Der Satz gilt für allgemeine Hilberträume, zum Beweis setze $x = \tilde{x} + \lambda u$ und differenziere nach λ . Für $n = 1$:

Beweis:

$$\tilde{x} \text{ Minimum von } J \iff J'(\tilde{x}) = 0 (Q > 0) \iff Q\tilde{x} = b. \quad \square$$

Zur Lösung des Gleichungssystems stehen damit die klassischen Minimierungsverfahren zur Verfügung. Als erstes einfallen würde das Verfahren des steilsten Abstiegs, das wegen

$$\nabla J(x_k) = Qx_k - b =: r_k$$

wird zu

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k r_k$$

wobei das α_k optimal gewählt wird, so dass $J(x_{k+1})$ minimiert wird.

Wegen

$$r_k = Qx_k - b = Q(x_{k-1} + \alpha_k r_{k-1}) - b = \alpha_k Qr_{k-1} + (Qx_{k-1} - b) = \alpha_k Qr_{k-1} + r_{k-1}$$

gilt

$$r_k \in V_k(Q, r_0), V_k(Q, r_0) = \{r_0, Qr_0, Q^2r_0, \dots, Q^k r_0\} = \{P(Q)r_0, P \in \mathcal{P}_k\}$$

und die $V_k(Q, r_0)$ heißen Krylovräume. Offensichtlich gilt wegen der Definition der x_k

$$x_{k+1} - x_0 = P(Q)r_0 \in V_k(Q, r_0), P \in \mathcal{P}_k. \quad (5.11)$$

Es liegen also alle Iterierten im Unterraum $x_0 + V_k$. Verfahren mit dieser Eigenschaft heißen Krylovraum-Verfahren.

Es stellt sich heraus, dass die Konvergenz für den Gradientenabstieg recht langsam ist. Wir wählen daher x_k optimal im Unterraum $x_0 + V_k$, also als

$$x_k = \arg \min_{x \in x_0 + V_k(Q, r_0)} J(x). \quad (5.12)$$

Dies führt zum Verfahren der konjugierten Gradienten

$$\begin{aligned} d_0 &= -r_0 \\ \alpha_k &= \frac{(d_k, r_k)}{(d_k, Qd_k)} \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k \\ r_{k+1} &= Qx_{k+1} - b = r_k + \alpha_k Qd_k \\ \beta_k &= \frac{(r_{k+1}, Qd_k)}{(d_k, Qd_k)} \\ d_{k+1} &= -r_{k+1} + \beta_k d_k \end{aligned}$$

Bemerkung: Dies ist einfach nur das normale Gradientenverfahren mit einer kleinen Modifikation, im letzten Schritt wird die Abstiegsrichtung $d_{k+1} = -r_{k+1}$ zu d_k orthogonalisiert bzgl. des Skalarprodukts $(x, y) = (x, Qy)$. Offensichtlich ist CG ein Krylovraumverfahren. Pro Schritt des Verfahrens wird eine Anwendung von Q auf einen Vektor benötigt.

Mit der Optimalitätseigenschaft (5.12) folgt wegen $V_n = \mathbb{R}^n$ die Konvergenz des Verfahrens, nach n Schritten ist das Verfahren beendet und liefert die korrekte Lösung. Natürlich wird man nie bis zu diesem Punkt iterieren, ansonsten könnte man billiger gleich die komplette Inverse ausrechnen.

5.5.2 CG für schlecht gestellte Probleme

Die Diskretisierung von linearen schlecht gestellte Problemen der Form $Af = g$ ist im Allgemeinen über- oder unterbestimmt und selten positiv definit. Wir betrachten daher das CG-Verfahren immer für $Q = A^*A$ und $b = A^*g$. Der Einfachheit halber wählen wir immer den Startwert $x_0 = 0$.

Wegen (5.11) gilt dann also

$$x_{k+1} = -P_k(A^*A)A^*b$$

für ein $P_k \in \mathcal{P}_k$.

Eingesetzt in (5.12) und mit Hilfe der Singulärwertzerlegung zeigt Louis ([12]) den Satz (S. 123, nach Korrektur der Schreibfehler dort) und $\nu = 2$:

Satz 5.5.2. *Gesucht sei die Lösung von $A^*Af = A^*g$. Dann gilt für ungestörte Daten und die 2-Norm*

$$\|f - f_m\| \leq c \min \{ \sigma_{m+1}^2 \|R_m g\|, m^{-2} \|A^*g\| \}$$

wobei $R_m g$ die Projektion von g auf den von den Singulärvektoren v_k , $k > m$, aufgespannten Unterraum ist.

Sei die Lösung von $Af = g$ nun schlecht gestellt von der Ordnung α , d.h. $\sigma_k \sim k^{-\alpha}$, so ist für mäßig schlecht gestellte Operatoren ($\alpha < 1$, etwa die Radontransformation) die Konvergenz von der Ordnung m^{-2} , für stark schlecht gestellt Operatoren sogar von der Ordnung $m^{-2\alpha}$.

Der Satz sagt insbesondere, dass CG mit N Iterationen exakt ist für die ersten N Singulärvektoren, und liefert damit etwas sehr ähnliches wie die abgeschnittene Singulärwertzerlegung, ohne dass diese extra berechnet werden müsste. Die einfache Idee ist nun: Gegeben ein Problem $Af = g$. Wähle a priori eine Abbruchbedingung basierend auf g und A , d.h. wir stoppen nach N Schritten und wählen f_N als Approximation für f . Dies wird nicht funktionieren, denn nach unseren Erfahrungen wird man das Abbruchkriterium in Abhängigkeit von der Güte der Daten ϵ wählen müssen. Wir erwarten, dass es eine gute Idee ist, die Abbruchbedingung so zu wählen, dass für das verbleibende Residuum r_N mit dem Diskrepanzprinzip gilt

$$\|r_n\| \sim \epsilon$$

und tatsächlich liefert diese Wahl eine Regularisierung des Problems.

Unser Vorgehen zeigt nochmals deutlich, wie bei der Untersuchung numerischer Methoden auf ihre Tauglichkeit für inverse Probleme vorgegangen werden muss. Die Lösung besteht aus gut bestimmten Teilen (in Singulärvektoren zu großen Singulärwerten) und schlecht bestimmten Teilen (in Singulärvektoren zu kleinen Singulärwerten). Ein gutes iteratives numerisches Verfahren wird im Laufe der Iteration die guten Anteile zuerst bestimmen und die schlechten Anteile spät. Bricht man nun die Iteration vorzeitig ab (early stopping, etwa mit dem Diskrepanzprinzip), so enthalten die Iterierten nur die gut bestimmten Anteile.

5.6 Kaczmarz–Methoden

Das Kaczmarz–Verfahren ist eng mit dem Landweber–Verfahren verwandt. Ein Problem des Landweber–Verfahrens ist, dass es umso komplexer wird, einen einzelnen Iterationsschritt auszuführen, je größer die Matrix ist. Beispiel: Ein Problem $Af = g$ ist heftig überbestimmt. Nun wird die Anzahl der Messungen noch einmal verdoppelt (worüber wir uns im Sinne der schlecht gestellten Probleme freuen sollten, weil es den durchschnittlichen Datenfehler reduziert). Aber: Durch die Vergrößerung der Matrix kann es passieren, dass das Verfahren

jetzt gar nicht mehr durchführbar ist, denn um überhaupt einmal zur nächsten Iterierten zu kommen, muss die komplette Matrix zweimal angewandt werden. Kaczmarz lieferte hierzu eine interessante Idee: Wir teilen unser Problem $Ax = b$ auf in Teilprobleme $A_j x = b_j$, $j = 1 \dots N$, wobei jedes A_j einen Teil der Gleichungen enthält. Diese Aufteilung drängt sich in inversen Problemen häufig ohnehin auf, etwa, indem man die Messdaten zu einer Detektorposition im CT oder zu einer Einfallsrichtung im Ultraschall zusammenfasst.

In jeder Iteration benutzen wir nun nur die Messdaten für ein j zur Inversion, lösen also im k . Iterationsschritt nur die Gleichung

$$A_{j_k} x_k = b_{j_k}.$$

Der Einfachheit halber schreiben wir in Zukunft gleich k für j_k .

Dies ist im Allgemeinen ein unterbestimmtes System, wir müssen also die Moore–Penrose–Lösung ansetzen, und wir wollen ein iteratives Verfahren definieren, das auf x_k aufbaut. Wir setzen also $x_k = x_{k-1} + d_k$. Wegen

$$b_k = A_k x_k = A_k (x_{k-1} + d_k)$$

wählen wir d_k als Moore–Penrose–Lösung. Zusammen mit einem Iterationsparameter ω erhalten wir also die Iterationsvorschrift

$$x_k = x_{k-1} + \omega A_k^t (A_k A_k^t)^{-1} (b_k - A_k x_{k-1}).$$

Zur exakten Durchführung muss also in jedem Schritt eine Matrix, wenn auch kleinerer Ordnung, invertiert werden. Aus diesem Grund ersetzt man noch $A_k A_k^t$ durch eine einfach zu invertierende Matrix C_k . Damit ist alles komplett. Wir geben die Version für Matrizen, natürlich lässt sich eine entsprechende Version für lineare Operatoren zwischen vollständigen Vektorräumen definieren.

Definition 5.6.1. (*Kaczmarz–Verfahren*) Zu lösen sei das System von Gleichungssystemen $A_j x = b_j$, $j = 1 \dots N$, $A_j \in \mathbb{R}^{m_j \times n}$, $b_j \in \mathbb{R}^{m_j}$. Die Folge der A_k und b_k werde für $k > N$ durch dieselben Matrizen und Vektoren fortgesetzt (also $A_k = A_{j_k}$ und $b_k = b_{j_k}$ mit $j_k \leq N$). Sei weiter ω fest und $C_k \in \mathbb{R}^{m_k \times m_k}$ positiv definit. Dann heißt die Folge

$$x_k = x_{k-1} + \omega A_k^t C_k^{-1} (b_k - A_k x_{k-1})$$

Kaczmarz–Verfahren zur Lösung des Systems.

Wir betrachten zur Illustration drei einfache Beispiele.

1. Sei $N = 1$ und $C_k = I$. Dann ist das Kaczmarz–Verfahren das Landweber–Verfahren.
2. Sei $N = 1$, $\omega = 1$ und $C_k = (A A^t)$. Dann konvergiert das Verfahren in einem Schritt und es ist x_1 die Moore–Penrose–Lösung.

3. Sei $m_j = 1$, $\omega = 1$, $C_k = (A_k A_k^t) \in \mathbb{R}$. Dann wird zum Update nur eine Zeile der Matrix genutzt, und der Update wird so gewählt, dass die zugehörige Gleichung gelöst wird. Aus dieser Beschreibung wird schon klar, dass es sich um eine Variante des Einzelschrittverfahrens (Gauss–Seidel–Verfahren) handeln muss. Für $\omega \neq 1$ erhält man das SOR–Verfahren, und tatsächlich kann man auch umgekehrt Kaczmarz als einen Spezialfall des SOR–Verfahrens ansehen (Björck und Elfving, ([1])).

Die Konvergenz scheint auf den ersten Blick an einer geschickten Wahl von C_j zu liegen. Daher ist das folgende allgemeine Konvergenzresultat vielleicht überraschend.

Satz 5.6.2. *Im Kaczmarzverfahren für die Systeme $R_j f = g_j$, $R_j : X \mapsto Y_j$, $j = 0 \dots p-1$, gelte $(C_j x, x) \geq (R_j R_j^t x, x) \forall x$, $f_0 = 0$ und $0 < \omega < 2$. Das System sei lösbar, und jede Gleichung werde unendlich oft benutzt. Dann konvergiert das Kaczmarzverfahren gegen die Minimum–Norm–Lösung von*

$$Rf = g, R : X \mapsto Y_0 \times Y_1 \times \dots \times Y_{p-1}, (Rf)_j = (R_j)f, (g)_j = g_j.$$

Wir haben die Notation leicht verändert, um sie im nächsten Abschnitt direkt auf die CT anwenden zu können. Wir werden im Radonfall R_j als Projektionsmatrix zu einem festen Winkel θ wählen, wovon wir bei der Parallelgeometrie gerade p haben.

Der Satz sagt also: Teilt man das große Gleichungssystem in viele kleine auf und führt das Kaczmarz–Verfahren durch, so konvergiert es gegen die Minimum–Norm–Lösung, falls C_j nicht zu klein gewählt wurde. Auf die Annahme der Lösbarkeit kann man verzichten, wir zeigen hier nur die einfache Version.

Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass, nachdem alle Gleichungen benutzt wurden, wieder von vorn angefangen wird, also $j_k = k \bmod p$. Eine solche Gruppe von Wiederholungen nennen wir einen Sweep. Wir bezeichnen mit f_k^j die Iterierte $(kp + j)$ des Kaczmarzverfahrens, also die Iterierte vor Anwendung der Gleichung j im k . Sweep. Weiter setzen wir $f_k = f_k^0$, das sind die Iterierten nach jeweils einem kompletten Sweep, also nachdem alle Gleichungen k –mal angewendet wurden. Wir zeigen, dass die f_k konvergieren.

Beweis: Sei $f^+ = R^+g$, also $Rf^+ = g$ und $f^+ \in \text{Ker}(R)^\perp$. Sei

$$Q_j := (I - \omega R_j^t C_j^{-1} R_j)$$

und

$$Q = Q_{p-1} \cdots Q_0.$$

Dann gilt

$$f_k^{j+1} - f^+ = f_k^j + \omega R_j^t C_j^{-1} (\underbrace{g_j}_{=R_j f^+} - R_j f_j) - f^+ = Q_j(f_k^j - f^+)$$

und damit für das Residuum

$$e_k := f_k - f^+ = Q e_{k-1}.$$

Insbesondere gilt also

$$e_k = Q^k e_0 = Q^k f^+$$

wegen unserer Wahl von f_0 . Wir sind also fertig, falls $\|Q\| < 1$ in irgendeiner Norm. Dies kann aber wegen $Q|_{\text{Ker}(R)} = I$ nicht der Fall sein. Glücklicherweise liegt f^+ aber im Orthogonalraum, es reicht also zu zeigen, dass $\|Q|_{\text{Ker}(R)^\perp}\| < 1$.

Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \|Q_j f\|_2^2 &= \|f\|_2^2 - 2\omega(f, R_j^t C_j^{-1} R_j f) + \omega^2 \underbrace{(R_j R_j^t C_j^{-1} R_j f, C_j^{-1} R_j f)}_{\leq (C_j C_j^{-1} R_j f, C_j^{-1} R_j f)} \\ &\leq \|f\|_2^2 - \underbrace{(2\omega - \omega^2)}_{>0} (R_j f, C_j^{-1} R_j f) \\ &\leq \|f\|_2^2 \end{aligned}$$

mit Gleichheit nur für f im Kern von R_j , denn C_j^{-1} ist positiv definit. Dann ist aber auch

$$\|Qf\|_2^2 \leq \|f\|_2^2$$

mit Gleichheit nur für f im Kern von R . Falls X endlichdimensional ist, so gilt: Die Einheitskugel ist kompakt, also ist auch der Schnitt von $\text{Ker}(R)^\perp$ mit der Einheitskugel kompakt und stetige Funktionen nehmen ihr Maximum dort an. Also gilt

$$\|Q|_{\text{Ker}(R)^\perp}\|_2^2 = \sup_{\|f\|=1, f \in \text{Ker}(R)^\perp} \|Qf\|_2^2 < 1$$

und der Satz ist bewiesen. Für unendlichdimensionales X muss man hier noch etwas rechnen ([15]). \square

Zurück zum Landweber–Beispiel: Für $p = 0$ wählen wir $C_k = \sigma_0^2 I$, σ_0 der größte Singulärwert von A . Dann erhalten wir das Landweber–Verfahren mit dem Iterationsparameter

$$\tau = \omega^2 / \sigma_0^2$$

und Konvergenz des Landweber–Verfahrens für $\tau < 2/\sigma_0^2$, dies ist der schon bekannte Satz. Die bekannten Konvergenzsätze des SOR–Verfahrens lassen sich ebenso ableiten.

In den inversen Problemen muss ω typischerweise extrem klein gewählt werden. Die Konvergenzgeschwindigkeit hängt stark von der Anordnung der Gleichungen ab, dies werden wir im nächsten Kapitel sehen.

Bemerkung: Kaczmarz ist eine sehr attraktive Methode auch für nichtlineare Probleme. In diesem Fall wird in jedem Schritt durch Bildung der Jakobi–Matrix

linearisiert. Seien also nun die $R_k(f)$ nichtlinear, und sei $R'_k(f)$ die Jakobimatrix von R_k an der Stelle f , bzw. die Frechet-Ableitung im Fall kontinuierlicher Operatoren. Wir ersetzen dann im j . Schritt

$$g_k = R(f_{k+1}) = R_k(f_k + \tilde{f}) \sim R_k(f_k) + R'_k(f_k)\tilde{f}$$

und damit für den Updateschritt, ganz analog zum linearen Fall,

$$f_{k+1} = f_k + \omega R'_k(f_k)^t (R'_k(f_k) R'_k(f_k)^t)^{-1} (g_k - R_k(f_k)).$$

5.7 Iterative Methoden für die Computertomographie

Am Anfang des Kapitels über die Computertomographie haben wir bereits ein diskretes Modell diskutiert. Wir wollen dies nun mit dem Kaczmarz-Verfahren lösen.

Es stellt sich die Frage, warum man überhaupt daran interessiert ist, das diskrete System zu invertieren, wir haben ja im Kapitel über die CT gezeigt, dass die Radon-Transformation mit der gefilterten Rückprojektion eine gut implementierbare analytische Inverse besitzt.

Leider ist diese in Nicht-Standard-Fällen nicht anwendbar. Wir sind von der einfachen Parallelgeometrie ausgegangen, tatsächlich braucht jede Messgeometrie einen eigenen Inversionsalgorithmus. Den diskreten Verfahren dagegen ist die Geometrie völlig egal, der Lösungsalgorithmus ist grundsätzlich immer derselbe. Wir werden der Einfachheit halber trotzdem wieder die Parallelgeometrie im \mathbb{R}^2 betrachten.

Das Standard-Iterationsverfahren ist das Kaczmarz-Verfahren. Wir erinnern kurz an das Beispiel aus Abschnitt 4.1. Wir haben p Richtungen θ_k , für die wir $g_k(s) = Rf(\theta_k, s) = (R_k f)(s)$ messen (wir diskretisieren zunächst nur im Winkel, nicht im Abstand). Jede Richtung liefert uns dann die lineare Gleichungssysteme

$$(R_k f)(s) = g_k(s)$$

mit

$$R_k : L_2(|x| < 1) \mapsto L_2(|s| < 1), (R_k f)(s) = (Rf)(\theta_k, s).$$

Wir wollen dies so weit wie möglich analytisch in s betrachten, dann gilt ($f \in L_2(|x| < 1)$, $g \in L_2(|s| < 1)$):

$$\begin{aligned} (g, (R_j f)) &= \int_{-1}^1 g(s) \int_{x \cdot \theta_j = s} f(x) \, dx \, ds \\ &= \int_{|x| < 1} \underbrace{g(x \cdot \theta_j)}_{=(R_j^* g)(x)} f(x) \, dx \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 (R_j R_j^* g)(s) &= \int_{x \cdot \theta_j = s, \|x\| < 1} g(x \cdot \theta_j) \, dx \\
 &= \int_{x \cdot \theta_j = s, \|x\| < 1} g(x \cdot \theta_j) g(s) \, ds \\
 &= 2\sqrt{1-s^2} g(s).
 \end{aligned}$$

Damit nimmt das klassische Kaczmarz–Verfahren in der CT die Form an

$$f_k^{j+1}(x) = f_k^j(x) + \omega \frac{1}{2\sqrt{1-(x \cdot \theta_j)^2}} (g_j - R_j f_k^j)(x \cdot \theta_j).$$

Informell lautet der Algorithmus für einen Schritt also:

1. Berechne die Linienintegrale von f_k^j in Richtung θ_j^\perp (diskretisiert: durch Anwendung der Systemmatrix).
2. Für jedes x in der Diskretisierung: Berechne den Defekt zwischen Messung und Schätzung für die Linie durch diesen Punkt (durch Interpolation wie bei der gefilterten Rückprojektion) und teile durch die Länge des Schnitts der Linie mit der Einheitskugel. Erhöhe den Wert der Schätzung in x um die so berechnete Zahl.

Üblicherweise wird nun diese Form diskretisiert und implementiert als Alternative zur gefilterten Rückprojektion, sie ist unter dem Namen “ART” (algebraic reconstruction technique) bekannt.

Ein Wort zur Konvergenzgeschwindigkeit: Man zeigt leicht, dass die Q_j orthogonale Projektoren sind. Damit ist die Konvergenzgeschwindigkeit umso größer, je orthogonaler aufeinanderfolgende Projektoren sind. Dies ist gewährleistet, wenn die Winkel so angeordnet werden, dass aufeinanderfolgende Richtungen möglichst senkrecht aufeinander stehen.

Es kam also ein Wettbewerb auf, in dem verschiedene Autoren (etwa Hamaker und Solmon ([9]), Herman and Meyer ([11])) optimale Anordnungen entwickelten, der OSEM (Ordered Subset...)–Algorithmus etwa hat daher seinen Namen. Unglücklicherweise stellte sich später heraus, dass der Gewinn durch optimale Anordnungen sehr klein ist. Man darf keinesfalls eine clockwise Anordnung wählen, alles andere ist aber fast egal, eine zufällige Anordnung etwa liefert fast dasselbe wie eine optimale Anordnung.

5.8 EM–Verfahren und statistische Methoden

Zum Schluss wollen wir noch einen statistischen Ansatz diskutieren, der ebenfalls zu einem iterativen Verfahren führt. Die Idee ist, die statistischen Eigenschaften der Messungen, die wir machen, in der Regularisierung zu nutzen und

entsprechend statistisch optimale Rekonstruktionsverfahren zu entwickeln. Aus Zeitgründen gehen wir nur sehr oberflächlich auf die Verfahren ein, eine bessere Diskussion findet sich beispielsweise bei Louis ([12]). Wir setzen einige einfache statistische Grundkenntnisse voraus.

5.8.1 Poisson–Verteilung und Emissionstomographie

Bei der Messung eines physikalischen Werts gehen wir üblicherweise davon aus, dass die Messwerte statistische Realisierungen einer Gauss–Normalverteilung sind, deren Mittelwert der korrekte physikalische Wert ist. Wir werden sehen, dass darauf aufbauende statistische Regularisierungsverfahren leider nur das Tikhonov–Verfahren zurückliefern, das damit zwar eine statistische Begründung besitzt, uns aber nichts Neues sagt.

Interessanter wird es, wenn wir den Grenzfall für diskrete Messungen betrachten, wie er etwa bei der Emissionstomographie (PET, SPECT) auftritt. Hierbei wird ein radioaktiv markierter Stoff einem Patienten gespritzt, die radioaktiven Zerfälle des Stoffs auf Geraden durch den Körper werden gezählt. Offensichtlich ist, falls die Zahl der Zerfälle sehr groß ist, die Messung proportional zur Menge des Stoffs auf der Geraden. Aber: Häufig ist die Anzahl sehr klein (meist ca. 10) und natürlich ganzzahlig, wir müssen also genauer hinschauen.

Die Anzahl radioaktiver zerfallender Teilchen in einem Volumen genügt der Poisson–Verteilung. Diese wollen wir ganz kurz sehr heuristisch herleiten. Sei $p_k(t)$ die Wahrscheinlichkeit, dass in einem Zeitintervall der Länge t genau k Teilchen zerfallen. Für sehr kleines t ist die Wahrscheinlichkeit, dass man überhaupt nur einen Zerfall findet, proportional zur Länge des Intervalls, also

$$p_1(\Delta t) = c\Delta t$$

und damit

$$p_0(\Delta t) = 1 - c\Delta t, \quad p_0(0) = 1.$$

Unter der Annahme, dass wir sehr viele Teilchen haben, ist die Wahrscheinlichkeit, dass in einem Zeitintervall ein Teilchen zerfällt, nicht davon abhängig, wie viele vorher schon zerfallen sind. Die Ereignisse “es passiert nichts in $[0, t]$ ” und “es passiert nichts in $[0, t + \Delta t]$ ” sind also unabhängig, und es gilt

$$p_0(t + \Delta t) = p_0(t)p_0(\Delta t) = p_0(t)(1 - c\Delta t).$$

Teilen durch Δt und betrachten des Limes $\Delta t \mapsto 0$ liefert

$$p_0'(t) = -cp_0(t)$$

und damit

$$p_0(t) = e^{-ct}$$

wegen der Nebenbedingung $p_0(t) = 1$. Mit derselben Begründung gilt

$$p_{k+1}(t + \Delta t) = p_{k+1}(t)p_0(\Delta t) + p_k(t)p_1(\Delta t) = p_{k+1}(t)(1 - c\Delta t) + p_k(t)c\Delta t$$

mit der GDGL

$$p_{k+1}(t) = c(p_k(t) - p_{k+1}(t)), p_{k+1}(0) = 0$$

und damit rekursiv

$$p_k(t) = \frac{(ct)^k}{k!} e^{-ct}.$$

Sei nun t fest, $\lambda = ct$, dann gilt für die Zufallsvariable X , die die Anzahl der zerfallenden Teilchen im Zeitintervall t angibt,

$$p(X = k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}.$$

Nach der Herleitung erwarten wir, dass in einem Intervall der Länge t im Durchschnitt ct Zerfälle auftreten, tatsächlich gilt:

$$E(X) = \text{Var}(X) = \lambda.$$

Wir betrachten nun ein voll diskretes Modell in \mathbb{R}^2 . Wir nehmen an, dass die gesamte radioaktive Verteilung im Einheitskreis liegt, der mit Pixeln diskretisiert ist. Sei φ_i die Anzahl der Teilchen, die in einem Pixel in einer gegebenen Zeit zerfällt. φ_i ist Realisierung einer Zufallsvariable mit der Poisson-Verteilung

$$p(\varphi_i = k) = e^{-f_i} \frac{f_i^k}{k!}$$

für $k \in \mathbb{N}$. Es gilt

$$E(\varphi_i) = f_i$$

und nach der Vorbemerkung ist f_i proportional zur Länge des Zeitintervalls und zur Menge der Radioaktivität in Pixel i .

Sei a_{ij} die Wahrscheinlichkeit, dass ein im Pixel i emittiertes Teilchen auf der Messlinie L_j gemessen wird, und sei $A = (a_{ji})$. Sei γ_j die Zufallsvariable der Anzahl der gemessenen Teilchen auf Linie L_j . Dann ist γ_j wieder eine Poisson-verteilte Zufallsvariable. Im Durchschnitt werden aus Pixel i $a_{ji}f_i$ Teilchen auf die Linie j emittiert, wir erhalten also für den Erwartungswert von γ_j

$$E(\gamma_j) = \sum_i a_{ji}f_i = (Af)_j$$

und damit ist der Parameter der Poisson-Verteilung bestimmt.

Wie wahrscheinlich ist es, dass bei tatsächlich vorliegender Realisierung der Radioaktivitätsverteilung f ein Messvektor g gemessen wird? Wir haben gerade gesehen

$$p(\gamma_j = g_j) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^{g_j}}{g_j!}, \quad \lambda = (Af)_j.$$

Unter der Annahme, dass die γ_j unabhängig sind, ergibt sich also

$$L(f) := p(\gamma = g|f) = \prod_{j=1}^n \frac{(Af)_j^{g_j}}{g_j!} e^{-(Af)_j} =: L(f).$$

$L(f)$ heißt Likelihoodfunktion. Man kann sich nun fragen: Grundsätzlich ist es ja (durch den Zufallscharakter der Messungen) möglich, bei jedem vorliegenden f jedes g zu messen. Die Wahrscheinlichkeiten sind aber deutlich unterschiedlich. Gegeben eine Messung g , welches f würde die Messung g mit höchster Wahrscheinlichkeit liefern? Dieses f maximiert offensichtlich die Likelihoodfunktion, also

$$f_{\text{ML}} = \arg \max L(f)$$

und heißt deshalb (Überraschung) Maximum-Likelihood-Lösung von $Af = g$. Man könnte auch fragen: Gegeben ein g , was ist der Erwartungswert für f unter der Voraussetzung $\gamma = g$, also

$$f_{\text{Bayes}} = E(f|\gamma = g).$$

Das so definierte f heißt Bayes-Schätzer für f .

Maximum Likelihood werden wir im folgenden für Poisson, die Bayes-Schätzer für die Gaussverteilung untersuchen.

5.8.2 Statistische Regularisierung: Bayes-Schätzer für die Normalverteilung

Eine übliche Annahme für Messfehler ist, dass sie unabhängig voneinander normalverteilt sind mit Mittelwert 0. In diesem Teil zeigen wir: Bayes-Schätzer für diesen Fall liefern (mit sehr harten Annahmen!) die Tikhonov-Regularisierung.

Satz 5.8.1. (statistische Grundbegriffe)

1. Sei $K \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv definit, $\mu \in \mathbb{R}^n$, und Y eine Zufallsvariable im \mathbb{R}^n mit

$$p(Y = y) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} |K|^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}(y-\mu)^t K^{-1}(y-\mu)}$$

wobei $|K|$ die (positive) Determinante von K ist. Dann heißt Y (μ, K) -normalverteilt, mit Mittelwert μ und Kovarianzmatrix K .

2. Sei Y (μ, K) -normalverteilt, $Z = CY$, $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär. Dann ist Z $(C\mu, CKC^t)$ -normalverteilt.

3. Sei

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}, \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, K = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{12}^t & K_{22} \end{pmatrix}$$

und Y (μ, K) -normalverteilt. Dann ist $Y_1|Y_2 = g$ ebenfalls normalverteilt mit Mittelwert $\mu_1 + K_{12}K_{22}^{-1}(g - \mu_2)$ und Kovarianz $K_{11} - K_{12}K_{22}^{-1}K_{12}^t$.

Dabei ist die bedingte Wahrscheinlichkeit definiert durch

$$p(Y_1 = f | Y_2 = g) = \frac{p(Y = (f, g))}{\int p(Y = (y, g)) dy}$$

Beweis: Alle ohne Beweis, durch einfaches Nachrechnen in den Übungen. \square

Mit dieser Vorbemerkung können wir in einem einfachen Fall den Bayes-Schätzer direkt ausrechnen. Zu bestimmen sei die Realisierung einer Zufallsvariable f mit Mittelwert \bar{f} . Es steht eine Messung, d.h. eine Realisierung \bar{g} der Zufallsvariable $g = Af + n$ zur Verfügung, wobei n ein $(0, \sigma^2 I)$ -normalverteiltes Rauschen ist. Wir machen weiter die Annahme, dass f ebenfalls normalverteilt ist mit (\bar{f}, F) und dass f und n voneinander unabhängig sind. Auf diese letzte (unrealistische) Annahme lässt sich verzichten, sie macht aber die Rechnung extrem einfach.

Wir betrachten die Zufallsvariable $Y = (f, n)^t$, sie ist

$$\left(\begin{pmatrix} \bar{f} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} F & 0 \\ 0 & \sigma^2 I \end{pmatrix} \right) -$$

normalverteilt. Wir wählen

$$C = \begin{pmatrix} I & 0 \\ A & I \end{pmatrix}, Z = CY = \begin{pmatrix} f \\ Af + n \end{pmatrix}.$$

Damit ist nach Teil 2 des Satzes Z

$$\left(\begin{pmatrix} \bar{f} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} F & FA^t \\ AF & AFA^t + \sigma^2 I \end{pmatrix} \right) -$$

normalverteilt. Mit dem dritten Teil des Satzes gilt dann

$$\begin{aligned} f_{\text{Bayes}} &= E(f | (g = \bar{g})) \\ &= \bar{f} + FA^t (AFA^t + \sigma^2 I)^{-1} (\bar{g} - A\bar{f}). \end{aligned}$$

Wir müssen nun noch klären, was wir mit \bar{f} meinen. Dies ist das mittlere Bild, das wir bei vielen Messungen als Durchschnitt erhalten würden. Falls wir also eine Schätzung für dieses mittlere Bild kennen, also ungefähr wissen, was auf den Bildern zu sehen ist, so wählen wir \bar{f} als diese Schätzung. Dies ist bei allen Regularisierungen sinnvoll: Falls man ungefähr weiß, wie das Ergebnis aussieht, sollte man als Regularisierungsterm die Abweichung von diesem Idealtyp ("prior") bestrafen, nicht die Größe der Norm selbst. Falls nicht, wählen wir $\bar{f} = 0$ und erhalten die normale Tikhonov-Regularisierung zurück:

$$f_{\text{Bayes}} = FA^t (AFA^t + \sigma^2 I)^{-1} \bar{g}$$

und das ist die erweiterte Form der Tikhonov–Regularisierung mit dem Spezialfall $F = I$, den wir bereits im zweiten Kapitel behandelt haben.

Nun zu F : F gibt an, wie die einzelnen Komponenten von f_k zusammenhängen. In einem Bild etwa würde man vermuten, dass es einen deutlichen Zusammenhang zwischen den Werten benachbarter Pixel gibt (über viele Bilder gemittelt). Die Kovarianz zwischen zwei Pixeln sollte also von ihrer Entfernung abhängen und schnell fallen. Die genaue Wahl von F hängt dann natürlich wieder vom persönlichen Geschmack ab. Ein ausgebreitetes F mit großem Zusammenhang der Pixel führt zu glatten Ergebnissen.

Im Allgemeinen führt uns also die Annahme normalverteilter Fehler und Zufallsvariablen auf die schon bekannte Tikhonov–Regularisierung (oder eine ihrer Varianten). Im Fall poissonverteilter Variablen sind die Verhältnisse besser, wir erhalten ein neues Verfahren.

5.8.3 Statistische Regularisierung: Maximum Likelihood und EM–Verfahren für die Poissonverteilung

Gesucht ist eine Lösung des linearen Gleichungssystems

$$Af = g$$

mit $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ und $g \in \mathbb{N}^n$. Dies interpretieren wir im Sinne der Vorbemerkungen z.B. für die Emissionstomographie als:

Seien F, G Poisson–verteilte Zufallsvariablen. Sei f der Mittelwert von F , und es gelte

$$E(AF) = Af = E(G).$$

Bekannt sei *eine* Realisierung g von G . Bestimme die Maximum–Likelihood–Lösung als Maximierer von L .

Nach der Modellierung gilt $(a_{ij}) \geq 0$ und insbesondere die Nebenbedingung $f_i \geq 0$. Wir schränken uns also bei der Suche auf diesen (physikalisch sinnvollen) Unterraum ein.

Bemerkung: Formale Ersetzung der Multiplikation durch die Addition und der Division durch die Subtraktion (also: formales Logarithmieren) liefert einfach nur das Kaczmarz–Verfahren. Tatsächlich lässt sich das EM–Verfahren als multiplikatives Kaczmarz–Verfahren deuten und analysieren.

Kapitel 6

Parameter Identifikation

Literaturverzeichnis

- [1] Å. Björck and T. Elfving. Accelerated projection methods for computing pseudoinverse solutions of systems of linear equations. *BIT*, 19(2):145–163, 1979.
- [2] D. Braess. *Finite elements. Theory, fast solvers and applications in elasticity theory. (Finite Elemente. Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie.)* 2., überarb. Aufl. Springer-Lehrbuch. Berlin: Springer. xvi, 317 S. DM 69.00; öS 503.70; sFr. 61.00 , 1997.
- [3] M. Burger and C. Brune. Partielle Differentialgleichungen, Vorlesungsscript, SS 2011. http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/PartDGL_SS11/.
- [4] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of inverse problems*, volume 375 of *Mathematics and its Applications*. Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht, 1996.
- [5] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, second edition, 2010.
- [6] O. Forster. *Analysis: Integralrechnung im \mathbb{R}^n mit Anwendungen*. Analysis. Vieweg + Teubner, 2009.
- [7] K. Fourmont. Non-equispaced fast fourier transforms with applications to tomography. *Journal of Fourier Analysis and Applications*, 9:431–450, 2003. 10.1007/s00041-003-0021-1.
- [8] A. Greenbaum. *Iterative methods for solving linear systems*. Frontiers in Applied Mathematics. 17. Philadelphia, PA: SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics. xiv, 220 p. \$ 41.00 , 1997.
- [9] C. Hamaker and D. Solmon. The angles between the null spaces of X rays. *J. Math. Anal. Appl.*, 62:1–23, 1978.
- [10] S. Helgason. *The Radon transform*. Progress in mathematics. Birkhäuser, 1999.

- [11] G. Herman, L. Meyer, and U. of Pennsylvania. Medical Image Processing Group. *Algebraic reconstruction techniques can be made computationally efficient*. Medical Image Processing Group technical report. Dept. of Radiology, University of Pennsylvania, 1992.
- [12] A. Louis. *Inverse und schlecht gestellte Probleme. (Inverse and ill-posed problems)*. Teubner Studienbücher: Mathematik. Stuttgart: B. G. Teubner. 205 S. DM 26.80 , 1989.
- [13] P. Maass. The interior radon transform. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 52(3):pp. 710–724, 1992.
- [14] F. Natterer. *The mathematics of computerized tomography*. Classics in applied mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.
- [15] F. Natterer and F. Wübbeling. *Mathematical methods in image reconstruction*. SIAM monographs on mathematical modeling and computation. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.
- [16] W. Rudin. *Functional analysis*. International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill, 1991.
- [17] L. Schwartz. *Theorie des distributions*. Hermann, 1957.
- [18] F. Wübbeling. Numerische analysis, Vorlesungsscript, SS 2011. http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/NumAna_SS11/NumUebung/skript.pdf.
- [19] F. Wübbeling. Numerische lineare algebra, Vorlesungsscript, WS 2010/2011.