Angewandte Mathematik

ESNM: Ein rauschunterdrückendes EM–Verfahren für die Emissionstomographie

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

vorgelegt von
Bernd Setzepfandt
aus Schwelm

1992

Dekan:	Prof. Dr. Elisabeth Peveling
Erster Referent:	Prof. Dr. F. Natterer
Zweiter Referent:	Prof. Dr. L. Rüschendorf

Mündliche Prüfung: 13.7 und 14.7 1992
Tag der Promotion: 14.7.1992

Zusammenfassung

Nach einer kurzen Einführung in das Thema Emissionstomographie wird das EM–Verfahren zur Maximierung der Log–Likelihood–Funktion erläutert. Dieses Verfahren hat leider den Nachteil, daß die rekonstruierten Bilder mit Fortschreiten der Iteration immer verrauschter werden. Um dieses Verhalten zu vermeiden, maximiert man nicht mehr die Likelihood–Funktion alleine, sondern führt noch einen zusätzlichen Strafterm ein. Ein solches Vorgehen ist äquivalent zur Maximierung der a posteriori Wahrscheinlichkeit. Durch das Einführen eines Strafterms ist im M–Schritt eines EM–Verfahrens zur Maximierung dieser Wahrscheinlichkeit dann aber ein großes nichtlineares Gleichungssystem zu lösen.
In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, wie man zur Lösung dieses Systems das SOR–Newton–Verfahren einsetzen und einen sinnvollen Strafterm wählen kann. Für das so entstehende ESNM–Verfahren (ESNM = expectation SOR–Newton maximization) werden Bedingungen für die Erhaltung der Positivität der sukzessiven Approximationen hergeleitet und die lokale Konvergenz der inneren Iteration bewiesen. Das Konvergenzverhalten des gesamten Verfahrens läßt sich schließlich mit Resultaten über die Konvergenz allgemeiner EM–Verfahren erklären.
Nach einem kurzen Literaturüberblick, in dem einige andere iterative Verfahren der Computertomographie beschrieben sind, werden experimentelle Rechnungen mit einigen dieser Verfahren und einem ESNM–Verfahren durchgeführt. Dabei zeigt es sich, daß das ESNM–Verfahren den anderen bezüglich Rauschunterdrückung und l_2–Fehler deutlich überlegen ist.

Inhaltsverzeichnis

1 Emissionstomographie **4**
- 1.1 Einleitung 4
- 1.2 Lösungsansätze 7
- 1.3 Allgemeine Konventionen und Voraussetzungen 10

2 EM–Verfahren **12**
- 2.1 Maximum–Likelihood EM 12
- 2.2 Bayessche Methoden 24

3 ESNM–Verfahren **27**
- 3.1 Das SOR–Newton–Verfahren 27
- 3.2 Konstruktion von ESNM–Verfahren 30
- 3.3 Konvergenz eines ESNM–Verfahrens 33
- 3.4 Implementation 37
- 3.5 Das direkte SOR–Newton–Verfahren 45

4 Literaturüberblick **47**
- 4.1 Modifikationen des EM–Verfahrens 47
- 4.2 Multiplikative Verfahren 53
- 4.3 Sonstige Verfahren 55

5 Numerische Ergebnisse **59**
- 5.1 Datensimulation und Bildbeurteilung 59
- 5.2 EM und andere iterative Verfahren 60
- 5.3 Ergebnisse mit ESNM–Verfahren 66

Literaturverzeichnis **78**

Index **85**

Abbildungsverzeichnis

1.1 Kollimation bei SPECT 5
1.2 Kollimation bei PET 5

2.1 Poisson–Verteilung 13

3.1 ESNM–Algorithmus 32

5.1 EM–Rekonstruktionen mit Startwert 1 61
5.2 EM-Rekonstruktionen mit zufälligem Startwert 62
5.3 Fourier–Transformierte von EM–Rekonstruktionen 62
5.4 Konvergenz bei fehlerfreien Daten 63
5.5 Rekonstruktionen verschiedener Verfahren 64
5.6 Konvergenz von ART, Landweber und EM 65
5.7 Konvergenz von EMS, OSL und MAP 66
5.8 ESNM–Rekonstruktionen des CONTRAST–Phantoms 67
5.9 Konvergenzkurven von ESNM und MAP 68
5.10 Konvergenz bei verschiedenen Startvektoren 69
5.11 Rekonstruktionen des PET–Phantoms 70
5.12 Rekonstruktionen des CIRCLE Phantoms mit $f^{\mathrm{ap}} > 0$ 71
5.13 a priori Information für CIRCLE 72
5.14 Rekonstruktionen aus realen Daten 73
5.15 Rekonstruktionen aus Patientenuntersuchungen 74
5.16 Auswirkung verschiedener a priori Bilder 75
5.17 Konvergenzverhalten des ESNM–Verfahrens 76
5.18 Konvergenzverhalten des direkten SOR–Newton–Verfahrens . 77

Tabellenverzeichnis

3.1 Abhängigkeit der Konvergenzgeschwindigkeit der inneren Iteration von den Parametern γ und ρ. 44

5.1 Datenfehler der benutzten Phantome 59
5.2 Vergleich verschiedener Rekonstruktions–Verfahren. 65
5.3 Auswirkung von Parametern und a priori Information beim ESNM–Verfahren 68
5.4 Vergleich von MAP und ESNM–Rekonstruktionen 69

Kapitel 1

Emissionstomographie

In diesem Kapitel sollen die mathematischen Probleme, die bei der Emissionstomographie auftreten, dargelegt werden. In Paragraph 1.1 werden die zugrunde liegenden physikalischen Gegebenheiten erläutert und in Paragraph 1.2 prinzipielle Lösungsansätze vorgestellt. Der letzte Paragraph dient zur Festlegung einiger Konventionen, die im gesamten Verlauf dieser Arbeit gültig sein sollen.

1.1 Einleitung

In der Emissionstomographie ist man daran interessiert, die Verteilung von Strahlungsquellen innerhalb eines Objekts aufgrund von Messungen der emittierten Strahlung außerhalb des Objekts zu bestimmen. Die Verteilung der Strahlungsquellen sei durch die Funktion f gegeben. In Zusammenhang mit bildgebenden Verfahren wird f üblicherweise als Dichtefunktion bezeichnet. Außerdem ist noch die Dämpfung der emittierten Strahlung durch das Objekt zu berücksichtigen. Diese Dämpfung sei durch die Funktion μ gegeben. Dreidimensionale Objekte werden in der Tomographie Schicht für Schicht untersucht, so daß f und μ als reellwertige Funktionen des $\mathbf{R}^2$ betrachtet werden können. Eine Ausnahme ist hier allerdings die 3D–Tomographie (s. [61], [56], [11], [12], [4], [30], [5], [37]), in der f und μ als Funktionen des $\mathbf{R}^3$ aufzufassen sind. Dieser Fall soll hier jedoch nicht betrachtet werden.
Das wohl bekannteste Beispiel für die Emissionstomographie findet man in der Nuklearmedizin. Hier wird die Verteilung einer radioaktiv markierten Substanz innerhalb eines Organs gesucht. $f(x)$ ist somit die Intensität der Strahlung im Punkt $x \in \mathbf{R}^2$, welche proportional zur Konzentration der gesuchten Substanz ist. $\mu(x)$ ist die Dämpfung der Strahlung durch das Körpergewebe. In letzter Zeit gibt es aber auch ein zunehmendes Interesse an technischen Anwendungen der Emissionstomographie.
Man unterscheidet in der Emissionstomographie prinzipiell zwei Methoden zur Messung der Strahlung. Im technisch einfacheren Fall werden die Detektoren so durch Bleiabschirmungen kollimiert, daß sie nur Strahlung entlang einer geraden Linie L registrieren (Abb. 1.1). Für die in solch einem Detektor

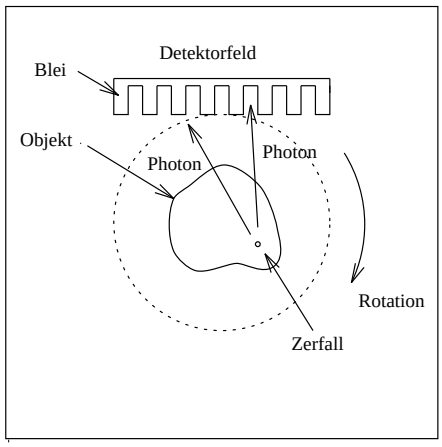

Abbildung 1.1: Kollimation bei SPECT

gemessene Strahlungsintensität I gilt

$$I = \int_L f(x) e^{-\int_{L(x)} \mu(y)dy} dx, \tag{1.1}$$

wobei $L(x)$ der Abschnitt von L ist, der sich zwischen x und dem Detektor befindet. Diese Art der Emissionstomographie wird als SPECT (single photon emission computerized tomography) bezeichnet.
Bei der anderen Methode benutzt man radioaktive Isotope, die die Eigenschaft haben, gleichzeitig zwei Photonen in annähernd entgegengesetzte Richtungen auszusenden. Diese Photonen erreichen aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit quasi gleichzeitig zwei gegenüberliegende Detektoren. Schaltet man die Detektoren nun in Koinzidenz, das heißt es werden nur Ereignisse gezählt bei denen 2 Detektoren gleichzeitig ein Photon registrieren, so erhält man eine elektronische Kollimation (Abb. 1.2). Ist L die Verbindungslinie

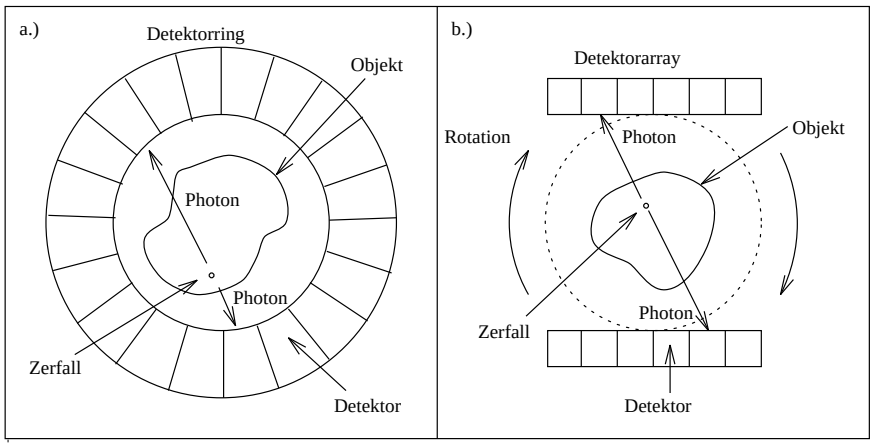

Abbildung 1.2: Kollimation bei PET

zwischen zwei solchen Detektoren und sind $L_+(x)$, $L_-(x)$ die beiden Teillinien von L mit Endpunkt x, so gilt für die zwischen diesen beiden Detektoren

gemessene Strahlungsintensität I:

$$\begin{aligned} I &= \int_L f(x) e^{-\int_{L_+(x)} \mu(y)dy - \int_{L_-(x)} \mu(y)dy} dx \\ &= e^{-\int_L \mu(y)dy} \int_L f(x)dx \end{aligned} \tag{1.2}$$

Diese Methode wird mit PET (positron emission tomography) bezeichnet.
In der Emissionstomographie interessiert man sich für die Bestimmung von f, nicht aber für μ. Falls μ aber nicht vernachlässigbar klein ist, wird sich dessen Bestimmung zur Berechnung von f nicht umgehen lassen. Dies kann zum Beispiel durch eine zusätzliche Transmissionstomographie [29], [23], [24], [48], geschehen. In der Praxis können natürlich nur Integrale über endlich viele Linien L gemessen werden. Die Anordnung dieser Linien wird als Abtastgeometrie bezeichnet. Eine häufig benutzte Abtastgeometrie ist die sogenannte standard parallele Geometrie. Hier wird über Bündel von gleichabständigen parallelen Linien aus verschiedenen Richtungen gemessen, wobei die Richtungen äquidistant auf einem Winkelbereich von 360° (SPECT) oder 180° (PET) verteilt sind. Zur Erzeugung dieser Abtastgeometrien wird bei SPECT ein rotierendes Feld von entsprechend kollimierten Detektoren benutzt (Abb.1.1). Bei PET kann man zwei gegenüberliegende Felder benutzen, bei denen die jeweils gegenüberliegenden Detektoren in Koinzidenz geschaltet sind (Abb. 1.2b.). Für PET wird aber häufiger ein Detektorring benutzt, wie er in Abb. 1.2a. zu sehen ist, bei dem alle Detektoren in Koinzidenz geschaltet sind. Man kann spezielle Algorithmen entwickeln, um die von solch einem Ring bereitgestellten Abtastgeometrien zu benutzen, oder die Daten durch geeignete Interpolation auf die einer standard parallelen Geometrie umrechnen.
Die Messungen bei der Emissionstomographie unterliegen vielen Fehlern. Zunächst einmal ist die Intensität, die an den Detektoren gemessen wird, sehr viel schwächer als bei der Transmissionstomographie. Dies liegt teilweise daran, daß nur ein geringer Teil der emittierten Photonen überhaupt einen Detektor erreicht. Andererseits kann man, vor allem in medizinischen Anwendungen, nicht beliebig stark radioaktive Substanzen verwenden, um Schädigungen des Patienten auszuschließen. Zu guter Letzt möchte man auch keine sehr langen Meßzeiten verwenden, was zum Teil finanzielle Gründe hat und zum anderen durch die geringen Halbwertszeiten der verwendeten radioaktiven Isotope bedingt ist. Die Schwierigkeiten, die sich durch die Messung einer geringen Anzahl von Ereignissen ergeben, sind ein zentraler Gegenstand dieser Arbeit und werden in Paragraph 2.1 genauer erläutert.
Bei PET ergeben sich weitere Schwierigkeiten. Es kann zum Beispiel passieren, daß zwei Zerfälle gleichzeitig stattfinden und somit auch vier Photonen quasi gleichzeitig an den Detektoren ankommen. Es ist dann nur noch vom Zufall abhängig, ob die beiden Ereignisse den richtigen Linienintegralen zugeordnet werden oder nicht.

Auch ist es vorstellbar, daß ein Photon innerhalb des Objekts gestreut wird, bevor es einen Detektor trifft. In diesem Fall wird das Ereignis, dem dieses Photon entstammt, also auch dem falschen Linienintegral zugeordnet.
Die Datenfehler, die sich durch diese beiden zuletzt geschilderten Störungen, welche als Scattering bezeichnet werden, ergeben, sind jedoch vergleichsweise klein und sollen im folgenden nicht weiter betrachtet werden.
In der medizinischen Praxis wird aufgrund wenig ausgereifter Methoden die Größe μ bei SPECT–Untersuchungen oft vernachlässigt oder durch die charakteristische Funktion einer Ellipse grob approximiert. Bei PET–Untersuchungen ist es üblich μ mittels einer Transmissionstomographieuntersuchung zu bestimmen. Aufgrund von Gleichung 1.2 hat man f dann nur noch aus seinen Linienintegralen zu bestimmen. Trotzdem hat auch SPECT seine Berechtigung, da die benötigten Geräte wesentlich billiger sind als die für PET benötigten. Für weitere Informationen zur Emissionstomographie sei auf [14] und [2] verwiesen.

1.2 Lösungsansätze

Für eine Funktion $f : \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}$ des Schwartzschen Raums der schnell fallenden Funktionen [48], [71] definiert man die Radontransformation R durch

$$(Rf)(\theta, s) := \int\limits_{\langle x,\theta\rangle = s} f(x)dx, \quad \theta \in S^{n-1},\ s \in \mathbf{R}$$

Dabei ist S^{n-1} die Einheitssphäre des $\mathbf{R}^n$, und $\langle x, \theta\rangle$ bezeichnet das kanonische innere Produkt des $\mathbf{R}^n$. Für die Anwendungen in der Emissionstomographie ist natürlich nur der Fall $n = 2$ interessant.[1]
Ist $f : \mathbf{R}^2 \longrightarrow \mathbf{R}$ eine Funktion mit kompaktem Träger, so ist die gedämpfte Radontransformation R_μ gegeben durch:

$$(R_\mu f)(\theta, s) := \int\limits_{\langle x,\theta\rangle = s} f(x) e^{-\int_0^\infty \mu(x+t\theta^\perp)dt} dx, \quad \theta \in S^1,\ s \in \mathbf{R}$$

Hierbei ist μ eine reellwertige Funktion des $\mathbf{R}^2$, $\theta^\perp \in S^1$ ein Vektor mit $\langle \theta, \theta^\perp\rangle = 0$ und $\det(\theta, \theta^\perp) = +1$. Nach 1.1 und 1.2 ist das mathematische Problem bei PET also die Inversion der Radontransformation, bei SPECT die Inversion der gedämpften Radontransformation. Für weitere Theorie zur Radontransformation sei auf [21] und [48] verwiesen.
Bei den Rekonstruktionsverfahren soll hier zwischen diskreten Methoden und analytischen Methoden unterschieden werden. Natürlich ist jede Methode, die auf einem Rechner implementiert wird letztendlich diskret. Die Ausgangsüberlegungen bei den analytischen Methoden sind jedoch nicht–diskret.

[1] In der 3–D Tomographie betrachtet man die dreidimensionale Röntgentransformation (s. [48]).

In dieser Arbeit stehen Methoden, die auf einem diskreten Ansatz beruhen im Vordergrund. Daher soll dieser Ansatz hier zuerst behandelt werden, wobei wir zunächst die ungedämpfte Radontransformation betrachten.
Seien $L_1, \ldots, L_m$ Geraden entlang denen Intensitäten $g_1, \ldots, g_m$ gemessen werden. Nach 1.2 gilt dann unter Vernachlässigung der Dämpfung μ

$$\int_{L_i} f(x)dx = g_i, \quad i = 1, \ldots, m, \tag{1.3}$$

wobei vorausgesetzt ist, daß der Träger von f im Einheitskreis liegt. Zunächst überdecken wir den Einheitskreis mit kleinen Quadraten $P_1, \ldots, P_n$, den sogenannten Pixeln (für picture elements), und nehmen an, f sei in jedem dieser Pixel konstant. Sei f_j der Wert von f in P_j und $F := (f_1, \ldots, f_n)^t$. a_{ij} sei definiert als die Länge des Schnitts von L_i mit P_j. Nach 1.3 gilt dann offenbar:

$$(a_{i1}, \ldots, a_{in})F = g_i$$

Setzt man nun noch

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_m \end{pmatrix},$$

so erhält man aus 1.3 das lineare Gleichungssystem:

$$AF = g$$

Dieses System wird im allgemeinen nicht eindeutig oder sogar gar nicht lösbar sein. Also ist nach Methoden zu suchen, eine sinnvolle verallgemeinerte Lösung, wie zum Beispiel die Moore-Penrose Inverse [45], zu berechnen. Dieser diskrete Ansatz kann verfeinert werden, indem man die g_i nicht als Linienintegrale, sondern als Integrale über schmale, eventuell konisch zulaufende Streifen auffaßt. Genaueres hierzu kann [48] entnommen werden.
Bei SPECT ist nun noch die Dämpfung μ zu berücksichtigen. Ist μ bekannt, so kann man die Matrixkoeffizienten $\tilde{a}_{ij}$ gemäß

$$\tilde{a}_{ij} := a_{ij} e^{-\int_{L_i'} \mu(y)dy}$$

berechnen, und erhält auch hier ein lineares Gleichungssystem mit der Systemmatrix $\tilde{A} := (\tilde{a}_{ij})$. L_i' ist hierbei der Teil von L_i, der zwischen Pixel P_j und Detektor i liegt.
Bei dem diskreten Ansatz unterscheiden sich die Rekonstruktionsmethoden für PET und SPECT somit lediglich in der Berechnung der Systemmatrix. Eine brauchbare gemeinsame Bestimmung von f und μ aus den Daten der Radontransformation ist bisher nicht gelungen. Durch grobe Approximationen für μ erhält man meist bessere Ergebnisse als bei der gemeinsamen Bestimmung dieser beiden Größen.

Bei den analytischen Methoden versucht man, eine Inversionsformel für die zugrundeliegende Integraltransformation zu finden, und implementiert dann eine diskrete Version dieser Formel. Das SPECT Problem ist, bei unbekanntem μ, natürlich nur lösbar, wenn man gewisse Voraussetzungen über μ macht (siehe [48] und die dortigen Literaturhinweise).
Das heutzutage gebräuchlichste Verfahren, sowohl in der Transmissions– als auch in der Emissionstomographie, ist die gefilterte Rückprojektion. In Paragraph 5.3 ist diese Methode auch zur Berechnung von a priori Bildern verwendet worden, weshalb sie hier kurz dargestellt werden soll.
Als Ausgangspunkt zur Herleitung der gefilterten Rückprojektion kann die Formel

$$W_b * f = R^{\#}(w_b * Rf), \quad W_b := R^{\#} w_b$$

([48], Seite 14) betrachtet werden. Hierbei steht der Stern für eine Faltung in $\mathbf{R}$ und $R^{\#}$ ist der zu R duale Operator. Dieser ist gegeben durch

$$(R^{\#}\phi)(x) := \int\limits_{S^{n-1}} \phi(\theta, \langle x, \theta \rangle) d\theta, \quad x \in \mathbf{R}^n,$$

wobei ϕ auf dem Einheitszylinder $S^{n-1} \times \mathbf{R}$ definiert sein soll. $R^{\#}$ wird auch als Rückprojektion bezeichnet. Die Grundidee ist nun w_b so zu wählen, daß W_b für große b gegen die δ–Distribution [71] strebt, und eine diskrete Form der Formel

$$R^{\#}(w_b * Rf)(x) = \int\limits_{S^1} \int\limits_{\mathbf{R}} w_b(\langle x, \theta \rangle - t)(Rf)(\theta, t) dt d\theta$$

zu implementieren. Die Auflösung der berechneten Bilder hängt von b ab. Je größer man b wählt, um so höher ist auch das Auflösungsvermögen dieses Verfahrens, während die Wahl eines kleinen Werts für b einer Glättung entspricht. Genaueres zur Implementierung, sowie weitere mathematische Untersuchungen zur gefilterten Rückprojektion sind in Kapitel V von [48] zu finden.
In der medizinischen Praxis werden Matrixmethoden bis heute kaum benutzt. Dies lag bisher im wesentlichen daran, daß diese Methoden einen wesentlich höheren Speicher– und Rechenaufwand erfordern, als die gefilterte Rückprojektion. Da die Rechenleistung der Computer in den letzten Jahren aber drastisch verbessert worden ist, sollte dies heutzutage kaum noch ein Problem darstellen. Die Vorteile von Matrixmethoden liegen zum Einen darin, daß Algorithmen für beliebige Abtastgeometrien entwickelbar sind, zum Anderen kann man verschiedene Störeffekte, wie zum Beispiel die Dämpfung bei SPECT, einfach durch geeignete Berechnung der Systemmatrix berücksichtigen.

1.3 Allgemeine Konventionen und Voraussetzungen

Vergleichsoperatoren zwischen Vektoren oder Matrizen sollen komponentenweise aufgefaßt werden, zwischen Funktionen gelten sie auf dem zugrundeliegenden Definitionsbereich. Mit positiv soll immer > 0, mit nicht negativ ≥ 0 für alle Komponenten gemeint sein. Entsprechendes gilt für die Sprechweisen negativ und nicht positiv. Die Menge $\{f \in \mathbf{R}^n : f > 0\}$ wird mit $\mathbf{R}^n_+$ bezeichnet. Ein Vektor der Länge n, bei dem alle Komponenten gleich eins sind, wird mit dem Symbol 1_n bezeichnet. Für $f \in \mathbf{R}^n$ ist mit $\|f\|$ die euklidische Norm von f gemeint, die auch als l_2–Norm bezeichnet wird, während $\|f\|_\infty$ die Maximums– bzw. l_∞–Norm von f ist.
$A \in \mathbf{R}^{m\times n}$ sei die Systemmatrix des zu lösenden Gleichungssystems, $g \in \mathbf{R}^m$ der Vektor der gemessenen Intensitäten. Abweichend von den vorherigen Paragraphen, soll der Vektor der Dichtewerte in den einzelnen Pixeln im folgenden mit f bezeichnet werden, da dieses Symbol nicht weiter zur Bezeichnung der kontinuierlichen Dichtefunktion benötigt wird.
Für A soll immer die Voraussetzung

$$A^{\mathrm{t}} 1_m = 1_n \tag{1.4}$$

gelten. Dies bedeutet im Prinzip keine wesentliche Einschränkung. Auch wenn die gemäß Paragraph 1.2 berechnete Systemmatrix A diese Bedingung normalerweise nicht erfüllt, so kann man einfach eine Diagonalmatrix D mit Diagonalelementen

$$d_j := \sum_{i=1}^{m} a_{ij}, \quad j = 1, \ldots, n$$

berechnen, und dann

$$\tilde{A} := AD^{-1}$$

bilden. Da jedes Pixel von mindestens einer Linie L_i getroffen werden sollte, kann man die d_j als positiv voraussetzen, so das D^{-1} existiert. $\tilde{A}$ erfüllt dann offenbar die Bedingung 1.4. Ist nun f eine (verallgemeinerte) Lösung von

$$g = \tilde{A}\tilde{f} = AD^{-1}\tilde{f}$$

so ist $f := D^{-1}\tilde{f}$ eine (verallgemeinerte) Lösung von

$$Af = g.$$

Aus physikalischen Gründen gilt natürlich $A \geq 0$ und $g \geq 0$. Man kann ohne Einschränkung sogar $g > 0$ voraussetzen. Ist nämlich ein $g_i = 0$, so setzt man einfach $f_j = 0$ für Pixel welche von L_i geschnitten werden und betrachtet das entsprechend reduzierte Gleichungssystem.
Für die praktischen Rechnungen in Kapitel 5, sowie für Effizienzuntersuchungen, unterteilen wir das kleinste Quadrat, welches den Einheitskreis enthält,

in $B \times B$ Pixel. Von diesen B^2 Pixeln sind später natürlich nur die zu berücksichtigen, welche den Einheitskreis überlagern. Also gilt $n \approx \frac{\pi}{4}B^2$. Für Effizienzüberlegungen wird im folgenden aber einfach $n = B^2$ benutzt. Dies ist auch insofern gerechtfertigt, als man in einfachen Implementationen zur Berechnung der Systemmatrix alle B^2 Pixel berücksichtigen kann.
Als Abtastgeometrie wird immer eine standard parallele Geometrie vorausgesetzt. Ist $L(\theta, s)$ eine Gerade in Richtung $\theta = \binom{\cos\phi}{\sin\phi}$, $\phi \in [0, \pi)$, mit Abstand $s \in \mathbf{R}$ vom Ursprung, so ist eine standard parallele Geometrie gegeben durch die Geraden $L(\theta_j, s_l)$ mit:

$$\begin{aligned} &\theta = \tbinom{\cos\phi_j}{\sin\phi_j} \quad \phi_j = \tfrac{\pi(j-1)}{p},\ j = 1, \ldots, p\,, \\ &s_l = hl,\ l = -q, \ldots, q,\ h = \tfrac{1}{q}\,. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Sinnvoller Weise sollte der Abstand der parallelen Geraden kleiner als die Seitenlänge eines Pixels sein. Daher wählen wir B und q so, daß die Relation $B = 2q$ besteht. In [48], Kapitel III, wird außerdem hergeleitet, daß man bei einer standard parallelen Geometrie die Bedingung $p = \pi q$ einhalten sollte. Dies soll hier zu $p = 3q$ vereinfacht werden. Somit gilt

$$B = 2q = \frac{2}{3}p. \tag{1.6}$$

Eine Kombination der Diskretisierung des Rekonstruktionsgebiets und der oben beschriebenen Abtastgeometrie soll hier als Standardgeometrie bezeichnet werden. Für die Dimensionen m und n der Systemmatrix ergibt sich bei einer solchen Standardgeometrie:

$$\begin{aligned} n &= B^2 = \frac{4}{9}p^2 \\ m &= p(2q+1) = \frac{2}{3}p^2 + p \end{aligned}$$

m und n können also alleine durch die Anzahl p der Meß–Richtungen ausgedrückt werden. Dies ermöglicht es nur von p abhängige Laufzeitabschätzungen anzugeben.
Da jedes L_i nur einen geringen Teil aller Pixel schneidet, sind die meisten Matrixeinträge Null. In jeder Matrixzeile werden, grob geschätzt, $\sqrt{n}$ Komponenten positiv sein. Diese Dünn–Besetztheit der Matrix kann man ausnutzen, um Algorithmen zu entwickeln, die in Hinsicht auf Speicherbedarf und Rechenzeitbedarf auf heutigen Computern ohne weiteres durchführbar sind.

Kapitel 2

EM–Verfahren

Im allgemeinen versteht man unter einem EM–Verfahren eine iterative Technik zur Berechnung von Maximum–Likelihood Schätzungen. Die Beschreibung dieses allgemeinen Verfahrens und Beweise für dessen Konvergenz sind in [13], [1] und [72] zu finden.
In Paragraph 2.1 wird ein EM–Algorithmus zur Maximierung der Likelihood–Funktion des PET–Problems betrachtet und in Paragraph 2.2 die Idee der Bayesschen Rekonstruktionsverfahren aufgegriffen.

2.1 Maximum–Likelihood EM

Hier soll das EM–Verfahren der Emissionstomographie behandelt werden, das auf eine Idee von L. A. Shepp und Y. Vardi zurückgeht [62], [70]. Dazu wird zunächst das in Paragraph 1.2 angegebene Modell präzisiert:
Sei X_{ij}, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$ die Anzahl der Photonen die aus Pixel P_j stammen und auf Linie L_i registriert werden[1]. Da radioaktive Zerfallsprozesse einer Poisson–Statistik unterliegen, faßt man die X_{ij} als unabhängige Zufallsvariablen mit Poissonverteilung auf. Damit sind dann auch

$$\gamma_i := \sum_{j=1}^{n} X_{ij} \quad i = 1, \ldots, m$$

und

$$\varphi_j := \sum_{i=1}^{m} X_{ij} \quad j = 1, \ldots, n$$

unabhängige Zufallsvariablen mit Poissonverteilung. γ_i ist eine Zufallsvariable für die Anzahl der Photonen die auf L_i registriert werden[2], φ_j eine für die Anzahl der Photonen die aus Pixel P_j stammen. Dementsprechend interpretiert man g_i nicht mehr einfach als Integral der Dichtefunktion über L_i, sondern als Realisierung einer Poisson–Zufallsvariablen, deren Mittelwert gerade dieses Integral ist.

[1] Im Sinne von [13] sind die X_{ij} die vollständigen, aber unbeobachteten Daten
[2] Im Sinne von [13] sind die γ_i die beobachteten, aber unvollständigen Daten.

Eine Poisson–Zufallsvariable z mit Erwartungswert λ nimmt den Wert $k \in \mathbf{N}$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$\mathrm{P}(z = k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}$$

an [15]. In Abb. 2.1 ist $\mathrm{P}(z = k)$ für $\lambda = 10$ als Funktion von k aufgetragen[3]. Wie man dieser Abbildung entnehmen kann, entspricht der Wert $k = \lambda$

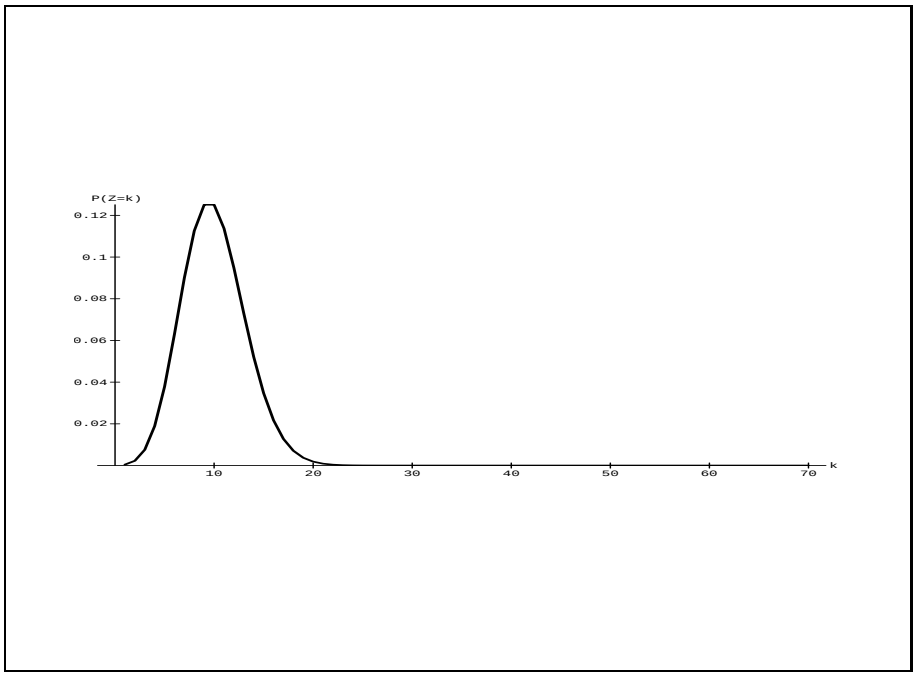

Abbildung 2.1: Poisson–Verteilung

der höchsten Wahrscheinlichkeit. Jeder andere Wert kann aber auch angenommen werden, wobei die Wahrscheinlichkeit mit zunehmender Entfernung vom Erwartungswert rasch abnimmt. Für die Varianz einer solchen Poisson–Zufallsvariablen gilt $\mathrm{Var}\, z = \lambda$. Da die Varianz durch

$$\mathrm{Var}\, z := \mathrm{E}\,(z - \lambda)^2$$

definiert ist, kann man sie als Erwartungswert für den quadrierten absoluten Fehler $|z - \lambda|$ betrachten. Für den relativen Fehler ergibt sich somit

$$\frac{\sqrt{\mathrm{E}|z - \lambda|}}{\lambda} = \frac{\sqrt{\mathrm{Var}\, z}}{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}.$$

Je größer der Erwartungswert λ ist, um so kleiner wird also der zu erwartende relative Fehler. In der Emissionstomographie ist die Größe der entsprechenden Erwartungswerte von der Meßzeit und der Konzentration der Strahlung abhängig.

[3] Für $k \notin \mathbf{N}$ is $k!$ durch $\Gamma(k + 1)$ zu ersetzen.

Wie in Paragraph 1 bereits erwähnt wurde, sind die Intensitäten, die bei PET–Untersuchungen an den Detektoren gemessen werden, sehr viel schwächer als bei der Transmissionstomographie. Dies bedeutet, nach dem zuvor gesagten, daß PET–Daten einen sehr viel höheren relativen Fehler haben, als Daten aus einer Transmissionsuntersuchung. Deshalb ist man bestrebt, für PET andere, geeignetere mathematische Methoden zur Bildrekonstruktion zu finden.
In dem von Shepp und Vardi vorgeschlagenen Modell betrachtet man ein Matrixelement a_{ij} als die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Photon auf Linie L_i registriert wird, unter der Bedingung, daß es in Pixel P_j emittiert wurde. Da nicht alle Photonen die emittiert werden einen Detektor erreichen, gilt

$$\sum_{i=1}^{m} a_{ij} \leq 1\,, \quad j = 1, \ldots, n.$$

In [70] wird jedoch hergeleitet, daß ohne Einschränkung

$$\sum_{i=1}^{m} a_{ij} = 1\,, \quad j = 1, \ldots, n.$$

angenommen werden kann. Eine Methode zur Berechnung der bedingten Wahrscheinlichkeiten a_{ij} ist ebenfalls in [70] angegeben. In der vorliegenden Arbeit werden die a_{ij} aber abweichend von der dort beschriebenen Methode gemäß Paragraph 1.2 berechnet und wie in Paragraph 1.3 normiert. Auch die so berechneten Matrixelemente lassen sich als bedingte Wahrscheinlichkeiten interpretieren.
Nach der Diskretisierung der Dichtefunktion kann man die Meßwerte g_i also als Realisierungen von paarweise unabhängigen Poisson–Zufallsvariablen γ_i mit Erwartungswerten

$$\mathrm{E}(\gamma_i) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} f_j = (Af)_i\,, \quad i = 1, \ldots, m$$

auffassen.
Es sei nochmal explizit darauf hingewiesen, daß mit g die wirklich gemessenen Daten gemeint sind, während die gesuchte Größe f proportional zur Konzentration der gesuchten Substanz sein soll. Dies bedeutet aber, daß $f_j = \mathrm{E}\varphi_j$ ist, also den Erwartungswert für die Anzahl der in Pixel P_j emittierten Photonen repräsentiert und nicht die wirkliche Anzahl der zur Meßzeit emittierten Photonen. In diesem Sinne stellt g also eine gestörte Version der theoretisch exakten Daten (Af) dar.
Die Likelihood–Funktion der beobachteten Daten ist gegeben durch [15]:

$$\mathrm{L}(f) := \prod_{i=1}^{m} \frac{(Af)_i^{g_i}}{g_i!} e^{-(Af)_i}$$

Es soll nun ein Vektor f^* bestimmt werden, der L maximiert. Zur Vereinfachung kann man anstelle von L die Log-Likelihood–Funktion

$$l(f) := \log \mathrm{L}(f) = \sum_{i=1}^{m} \Big(g_i \log(Af)_i - (Af)_i \Big)$$

betrachten, wobei der von f unabhängige Summand $-\log(g_i!)$ vernachlässigt worden ist.

Satz 2.1.1 *$l(f)$ ist konkav. Insbesondere ist also jedes Maximum von l ein globales Maximum.*

Beweis: Zunächst berechnen wir die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von l. Seien $\mu, \nu \in \{1, \ldots, n\}$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial l}{\partial f_\nu}(f) &= \sum_{i=1}^{m} g_i \frac{a_{i\nu}}{(Af)_i} - a_{i\nu} \\ &= -1 + \sum_{i=1}^{m} \frac{a_{i\nu} g_i}{(Af)_i} \end{aligned} \tag{2.1}$$

wobei 1.4 benutzt wurde.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 l}{\partial f_\mu \partial f_\nu}(f) &= \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial}{\partial f_\mu} \left(\frac{a_{i\nu} g_i}{(Af)_i} \right) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} \frac{a_{i\nu} a_{i\mu} g_i}{(Af)_i^2} \end{aligned} \tag{2.2}$$

Wählt man nun ein beliebiges $x \in \mathbf{R}^n$, so ergibt sich für die quadratische Form von x mit der Hesse–Matrix (Hess l) von l:

$$\begin{aligned} x^{\mathrm{t}} (\mathrm{Hess}\, l)(f) x &= \sum_{\mu=1}^{n} \sum_{\nu=1}^{n} x_\mu x_\nu \frac{\partial^2 l}{\partial f_\mu \partial f_\nu}(f) \\ &= \sum_{\mu=1}^{n} \sum_{\nu=1}^{n} x_\mu x_\nu \left(-\sum_{i=1}^{m} \frac{a_{i\nu} a_{i\mu} g_i}{(Af)_i^2} \right) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} \frac{g_i}{(Af)_i^2} \underbrace{\sum_{\nu=1}^{n} a_{i\nu} x_\nu}_{=(Ax)_i} \underbrace{\sum_{\mu=1}^{m} a_{i\mu} x_\mu}_{=(Ax)_i} \\ &= -\sum_{i=1}^{m} g_i \frac{(Ax)_i^2}{(Af)_i^2} \leq 0 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Dies bedeutet aber gerade, daß (Hess l)(f) für alle $f \in \mathbf{R}^n$ negativ semidefinit, und l somit konkav ist. $\diamond$

Zur Bestimmung eines Maximierers f^* von L soll nun das EM–Verfahren benutzt werden. Dieses Verfahren läßt sich in zwei Schritte unterteilen.

Gegeben sei eine Approximation f^σ. Zunächst sind nun Schätzungen für die Erwartungswerte der X_{ij}, unter der Voraussetzung, daß g gemessen wurde und f^σ vorliegt, zu berechnen. Wir wissen zwar, daß die X_{ij} Zufallsvariablen mit Poissonverteilung sind, deren Erwartungswerte sind jedoch nicht bekannt. Setzt man aber voraus, daß die Radioaktivitätsverteilung f^σ gegeben ist, und interpretiert man die a_{ij} wie zuvor erläutert als bedingte Wahrscheinlichkeiten, so kann man $a_{ij}f_j^\sigma$ als Erwartungswert von X_{ij} interpretieren. Also betrachtet man die X_{ij}, bei einer gegebenen Approximation f^σ, als Poisson–Zufallsvariable mit Erwartungswert $a_{ij}f_j^\sigma$. Sei

$$X_i := \begin{pmatrix} X_{i1} \\ \vdots \\ X_{in} \end{pmatrix}, \ i = 1, \ldots, m,$$

und für $k \in \mathbf{N}$ sei

$$A_k := \{\eta : \eta \in \mathbf{N}^n \wedge \eta_1 + \ldots + \eta_n = k\},$$

wobei $\mathbf{N}$ hier die Menge der natürlichen Zahlen einschließlich Null ist. Dann ist $\mathrm{E}(X_i|A_{g_i})$ der zu berechnende bedingte Erwartungswert. In diesem Sinne ist

$$\mathrm{E}(X_{ij}|g, f^\sigma) := \Big(\mathrm{E}(X_i|A_{g_i})\Big)_j, \quad j = 1, \ldots, n, \ i = 1, \ldots, m,$$

der Erwartungswert von X_{ij} unter der Bedingung, daß g gemessen wurde und f^σ vorliegt. Nach [32] ist

$$\mathrm{E}(X_i|A_{g_i}) = \frac{1}{\mathrm{P}A_{g_i}} \sum_{\eta \in A_{g_i}} \eta \mathrm{P}\{\eta\}.$$

Da die X_{ij} als Poisson–Zufallsvariablen mit Erwartungswert $a_{ij}f_j^\sigma$ aufzufassen sind, gilt für die Wahrscheinlichkeit $\mathrm{P}\{\eta\}$, daß X_i den Wert η annimmt:

$$\begin{aligned} \mathrm{P}\{\eta\} &= \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} e^{-a_{ij}f_j^\sigma} \\ &= \prod_{j=1}^{n} e^{-a_{ij}f_j^\sigma} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} \\ &= e^{-\sum_{j=1}^{n} a_{ij}f_j^\sigma} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} \\ &= e^{-(Af^\sigma)_i} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} \end{aligned}$$

Also erhält man für die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses A_{g_i}:

$$\begin{aligned} \mathrm{P}A_{g_i} &= \sum_{\eta \in A_{g_i}} P\{\eta\} \\ &= \sum_{\eta \in A_{g_i}} e^{-(Af^\sigma)_i} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} \end{aligned}$$

Für den zu berechnenden Erwartungswert ergibt sich somit:

$$\mathrm{E}(X_i|A_{g_i}) = \frac{1}{\sum\limits_{\eta\in A_{g_i}} e^{-(Af^\sigma)_i} \prod\limits_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}} \sum_{\eta\in A_{g_i}} \eta e^{-(Af^\sigma)_i} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}$$

Der Ausdruck $e^{-(Af^\sigma)_i}$, der in beiden Summen vorkommt, ist nicht von η abhängig und kann somit vor die Summe gezogen und gekürzt werden. Nach dieser Vereinfachung erhält man schließlich:

$$\mathrm{E}(X_i|A_{g_i}) = \frac{1}{\sum\limits_{\eta\in A_{g_i}} \prod\limits_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}} \sum_{\eta\in A_{g_i}} \eta \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}$$

Der folgende Satz liefert nun eine sehr einfache Möglichkeit zur Berechnung von $\mathrm{E}(X_{ij}|g, f^\sigma)$.

Satz 2.1.2 *Für $i = 1, \ldots, m$, $k = 1, \ldots, n$ gilt:*

$$\mathrm{E}(X_{ik}|g, f^\sigma) = \frac{a_{ik}f_k^\sigma g_i}{(Af^\sigma)_i}$$

Beweis: Nach der Definition von $\mathrm{E}(X_{ik}|g, f^\sigma)$ ist zu zeigen:

$$\begin{aligned}
\frac{a_{ik}f_k^\sigma g_i}{(Af^\sigma)_i} &= \Big(\mathrm{E}(X_i|A_{g_i})\Big)_k \\
&= \frac{\sum\limits_{\eta\in A_{g_i}} \eta_k \prod\limits_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}}{\sum\limits_{\eta\in A_{g_i}} \prod\limits_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}}, \quad k = 1, \ldots, n
\end{aligned}$$

Betrachten wir zunächst den Zähler des Bruchs auf der rechten Seite der Gleichung. Ist $k \in \{1, \ldots, n\}$ beliebig aber fest gewählt und e_k der k–te Einheitsvektor, so gilt für die Menge A_{g_i}:

$$\begin{aligned}
A_{g_i} &= \{\eta : \eta \in \mathbf{N}^n \wedge \eta_1 + \ldots + \eta_n = g_i\} \\
&= \underbrace{\{\eta + e_k : \eta \in \mathbf{N}^n \wedge \eta_1 + \ldots + \eta_n = g_i - 1\}}_{=A_{g_i-1}+e_k} \\
&\quad \cup \underbrace{\{\eta : \eta \in \mathbf{N}^n \wedge \eta_1 + \ldots + \eta_n = g_i \wedge \eta_k = 0\}}_{=:A_{g_i}^k}. \\
&= (A_{g_i-1} + e_k) \cup A_{g_i}^k
\end{aligned}$$

Hiermit haben wir eine Aufteilung von A_{g_i} in zwei disjunkte Teilmengen. Also gilt:

$$\sum_{\eta\in A_{g_i}} \eta_k \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} = \sum_{\eta\in A_{g_i-1}+e_k} \eta_k \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} + \sum_{\eta\in A_{g_i}^k} \underbrace{\eta_k}_{=0} \prod_{j=1}^{n} \frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{\eta\in A_{g_i-1}} (\eta_k+1)\frac{(a_{ik}f_k^\sigma)^{\eta_k+1}}{(\eta_k+1)!}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n}\frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}\\
&= a_{ik}f_k^\sigma \sum_{\eta\in A_{g_i-1}} (\eta_k+1)\frac{(a_{ik}f_k^\sigma)^{\eta_k}}{(\eta_k+1)\eta_k!}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n}\frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}\\
&= a_{ik}f_k^\sigma \sum_{\eta\in A_{g_i-1}} \prod_{j=1}^{n}\frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!}\\
&= \frac{a_{ik}f_k^\sigma}{(g_i-1)!}\sum_{\eta\in A_{g_i-1}} \frac{(g_i-1)!}{\prod_{j=1}^{n}\eta_j!}\prod_{j=1}^{n}(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}\\
&= \frac{a_{ik}f_k^\sigma}{(g_i-1)!}\left(\sum_{j=1}^{n}a_{ij}f_j^\sigma\right)^{g_i-1}\\
&= \frac{a_{ik}f_k^\sigma (Af^\sigma)_i^{g_i-1}}{(g_i-1)!}
\end{aligned}
$$

Im vorletzten Schritt wurde dabei der Polynomische Satz [27] verwendet. Für den Nenner des Bruchs auf der rechten Seite erhält man, wieder mit dem Polynomischen Satz,

$$\sum_{\eta\in A_{g_i}}\prod_{j=1}^{n}\frac{(a_{ij}f_j^\sigma)^{\eta_j}}{\eta_j!} = \frac{(Af^\sigma)_i^{g_i}}{g_i!}\,.$$

Insgesamt ergibt sich somit:

$$
\begin{aligned}
\Big(\mathrm{E}(X_i|A_{g_i})\Big)_k &= \frac{a_{ik}f_k^\sigma (Af^\sigma)_i^{g_i-1}}{(g_i-1)!}\frac{g_i!}{(Af^\sigma)_i^{g_i}}\\
&= \frac{a_{ik}f_k^\sigma g_i}{(Af^\sigma)_i}
\end{aligned}
$$

womit der Satz gezeigt ist. $\diamond$

Kommen wir nun zurück zum ersten Schritt des EM–Verfahrens. Hier berechnet man zunächst die Größen

$$N_{ij}^\sigma := \frac{a_{ij}f_j^\sigma g_i}{(Af^\sigma)_i}, \quad i=1,\ldots,m,\ j=1,\ldots,n. \tag{2.4}$$

Wie oben erklärt, kann man N_{ij} auffassen als Erwartungswerte für die Anzahl der Photonen, die aus Pixel P_j stammen und auf Linie L_i registriert werden, unter der Voraussetzung, daß f^σ vorliegt und g gemessen wurde. Daher nennt man diesen Schritt Erwartungswertbildung oder kurz E–Schritt.
Im nächsten Schritt, dem sogenannten Maximierungs– oder kurz M–Schritt, wird ein Maximierer $f^{\sigma+1}$ der Log–Likelihood–Funktion $\tilde{l}^\sigma$ der N_{ij}^σ bestimmt. Für die aktuelle Approximation f^σ ist $\tilde{l}^\sigma$ gegeben durch:

$$\tilde{l}^\sigma(f) := \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\Big(N_{ij}^\sigma \log(a_{ij}f_j) - a_{ij}f_j\Big)$$

$f^{\sigma+1}$ ist dann das Ergebnis nach einem Schritt des EM–Verfahrens. Zur Vereinfachung der Notation wird der Index σ bei $\tilde{l}$ und N_{ij} im folgenden vernachlässigt.
Wir wollen $f^{\sigma+1}$ explizit berechnen. Zunächst werden dazu die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von $\tilde{l}$ benötigt.

$$\frac{\partial \tilde{l}}{\partial f_\nu}(f) = -1 + \frac{1}{f_\nu}\sum_{i=1}^{m} N_{i\nu} \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{l}}{\partial f_\mu \partial f_\nu}(f) = \begin{cases} -\frac{1}{f_\nu^2}\sum_{i=1}^{m} N_{i\nu} & , \quad \mu = \nu \\ 0 & , \quad \mu \neq \nu \end{cases} \tag{2.6}$$

$f^{\sigma+1}$ wird nun als Nullstelle von $\nabla\tilde{l}$, des Gradienten von $\tilde{l}$ bestimmt. Nach 2.5 berechnet sich eine solche Nullstelle gemäß

$$\begin{aligned} f_\nu^{\sigma+1} &= \sum_{i=1}^{m} N_{i\nu} \\ &= f_\nu^\sigma \sum_{i=1}^{m} \frac{a_{i\nu} g_i}{(Af^\sigma)_i}, \quad \nu = 1, \ldots, n. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Setzt man nun $f^\sigma, g > 0$ voraus, so ist auch $f^{\sigma+1} > 0$ und nach 2.6 ist $(\text{Hess}\ \tilde{l})(f^{\sigma+1})$ eine Diagonalmatrix mit negativen Diagonalelementen

$$(\text{Hess}\ \tilde{l})(f^{\sigma+1})_{jj} = -\frac{1}{(f_j^{\sigma+1})^2}\sum_{i=1}^{m} N_{ij}^\sigma, \quad j = 1, \ldots, n.$$

$(\text{Hess}\ \tilde{l})(f^{\sigma+1})$ ist also negativ definit und $f^{\sigma+1}$ somit ein absolutes Maximum von $\tilde{l}$. Insbesondere ist damit $\tilde{l}(f)$ für jedes $f \in \mathbf{R}^n$ negativ definit und $\tilde{l}$ somit konkav.
Zusammenfassend ist ein Schritt des EM–Verfahrens also gegeben durch:

$$\begin{aligned} \text{EM}_j(f^\sigma) &:= f_j^\sigma \sum_{i=1}^{m} \frac{a_{ij} g_i}{(Af^\sigma)_i} \\ f^{\sigma+1} &:= EM(f^\sigma) := \begin{pmatrix} \text{EM}_1(f^\sigma) \\ \vdots \\ \text{EM}_n(f^\sigma) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.8}$$

Nach 2.7 und 2.8 gilt trivialerweise

$$\text{EM}_j(f^\sigma) = \sum_{i=1}^{m} N_{ij}^\sigma.$$

Diese einfache Beziehung wird später bei der Darstellung modifiezierter EM–Verfahren öfters benutzt.

Da in einer Matrixzeile ca. $\sqrt{n}$ Komponenten von Null verschieden sind, benötigt man für die Anwendung von A und A^t jeweils $m\sqrt{n}$ Operationen. Insgesamt ist der Rechenzeitbedarf für einen Schritt des EM–Verfahrens somit durch $2(n + m\sqrt{n})$ gegeben. Mit der Standardgeometrie 1.6 ergibt sich so ein Rechenaufwand von $\frac{8}{9}p^3 + \frac{20}{9}p^2$.
Üblicherweise wird dabei als Startwert $f^0 = 1_n$ benutzt. Nach der obigen Iterationsvorschrift ist dann $f^\sigma > 0$ für jedes $\sigma \in \mathbf{N}$, falls $g > 0$ gilt. Bei der Durchführung auf einem Rechner können natürlich aufgrund der begrenzten Rechengenauigkeit Werte $f_j^\sigma = 0$ auftreten. In diesem Fall setzt man einfach $f_j = 0$ und rechnet mit einem entsprechend reduzierten System weiter.
Beweise für die Konvergenz dieses Verfahrens sind in [62], [70], [35] und [47] zu finden. Außerdem wird dort noch gezeigt, daß die durch das EM–Verfahren berechnete Folge (f^σ) monoton wachsendes Likelihood hat. Das heißt es gilt $l(f^\sigma) \leq l(f^{\sigma+1})$ und $l(f^\sigma) = l(f^{\sigma+1})$ genau dann, wenn $f^\sigma = f^{\sigma+1}$ ist.
Eine weitere Eigenschaft des EM–Verfahrens ist die Erhaltung der gemessenen Countrate $\sum_{i=1}^m g_i$. Für jedes $\sigma > 0$ gilt nämlich:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^m f_j^\sigma &= \sum_{j=1}^n f_j^{\sigma-1} \sum_{i=1}^m \frac{a_{ij} g_i}{(Af^{\sigma-1})_i} \\
&= \sum_{i=1}^m \frac{g_i}{(Af^{\sigma-1})_i} \underbrace{\sum_{j=1}^m a_{ij} f_j^{\sigma-1}}_{=(Af^{\sigma-1})_i} \\
&= \sum_{i=1}^m g_i
\end{aligned}$$

Nach Satz 2.1.1 ist l nur konkav, nicht aber streng konkav. Man wird somit im allgemeinen nicht erwarten können, daß l ein eindeutiges Maximum besitzt. Der Vektor f^{EM}, gegen den das EM–Verfahren konvergiert, wird somit von der Wahl des Startvektors f^0 abhängen. Eine genauere Aussage über die Eindeutigkeit des Maximums von l macht der folgende Satz.

Satz 2.1.3 *Sei $g > 0$. Das Maximum von l auf $\mathbf{R}_+^n$ ist genau dann eindeutig bestimmt, wenn* $\ker(A) = \{0\}$ *ist.*

Beweis: l hat genau dann ein eindeutiges Maximum auf $\mathbf{R}_+^n$, wenn (Hess l)(f) für alle $f \in \mathbf{R}_+^n$ negativ definit ist. Dies ist äquivalent dazu, daß mindestens ein Summand $g_i \frac{(Ax)_i^2}{(Af)_i^2}$ in 2.3 positiv, bzw. die Wurzel eines Summanden von Null verschieden ist. (Hess l)(f) ist also genau dann *nicht* negativ definit, wenn es ein $x \in \mathbf{R}^n$, $x \neq 0$ mit

$$\frac{\sqrt{g_i}}{(Af)_i}(Ax)_i = 0 \text{ für } i = 1, \ldots, m$$

gibt. Nach Voraussetzung ist $\frac{\sqrt{g_i}}{(Af)_i} > 0$. Die obige Gleichung ist somit äquivalent zu:

$$Ax = 0$$

Ein solches x existiert genau dann, wenn $\ker A$ nicht der Nullraum ist, womit die Behauptung bewiesen ist. $\diamond$

Nehmen wir nun an, das Gleichungssystem $Af = g$ hätte eine exakte Lösung f^*. Im folgenden soll erläutert werden, wie diese exakte Lösung mit einem Fixpunkt des EM–Verfahrens und einem Maximum von $\mathrm{L}(f)$ zusammenhängt.
Es ist wohlbekannt, daß die Funktion

$$\varphi : [0, \infty) \longrightarrow \mathbf{R}, \quad \varphi(x) := \frac{x^k}{k!} e^{-x}, \quad k \in \mathbf{N}$$

ein eindeutig bestimmtes Maximum in $x = k$ hat. Also hat die Funktion

$$\Phi : [0, \infty)^n \longrightarrow \mathbf{R}, \quad \Phi(x) := \prod_{i=1}^{m} \frac{x_i^{k_i}}{k_i!} e^{-x_i}, \quad k_i \in \mathbf{N}$$

ein eindeutiges Maximum in $x = (k_1, \ldots, k_n)^{\mathrm{t}}$. Da nun ein f^* mit $Af^* = g$ existiert, muß f^* also L unter allen $f \in \mathbf{R}^n$ mit $Af \geq 0$ maximieren. Das Problem

$$\text{Maximiere } \mathrm{L}(f) \text{ unter } Af \geq 0 \tag{2.9}$$

wird also durch eine exakte Lösung f^* von $Af = g$ gelöst.
In [62], [70] und [35] ist die Aussage zu finden, daß der EM–Algorithmus gegen ein Maximum von $\mathrm{L}(f)$ bzw. $l(f)$ konvergiert. Nach der Iterationsvorschrift 2.8 erzeugt der EM–Algorithmus nur Vektoren $f^\sigma \geq 0$, falls er wie üblich mit $f^0 = 1_n$ gestartet wird. Nach den obigen Überlegungen kann es aber vorkommen, daß es Lösungen von 2.9 mit negativen Komponenten gibt, nämlich exakte Lösungen von $Af = g$ mit negativen Komponenten. Genau betrachtet konvergiert der EM–Algorithmus also gegen eine Lösung von:

$$\text{Maximiere } \mathrm{L}(f) \text{ unter } f \geq 0 \tag{2.10}$$

Daß es durchaus Vektoren f mit negativen Komponenten geben kann, die ein höheres Likelihood als ein Grenzwert des EM–Verfahrens haben, zeigt auch das folgende Beispiel.
Betrachten wir die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.5 & 0.2 \\ 0.1 & 0.2 & 0.1 \\ 0.3 & 0.1 & 0.5 \\ 0.4 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$$

und den Datenvektor

$$g = \begin{pmatrix} 0.6 \\ 0.4 \\ 2.8 \\ 2.2 \end{pmatrix}.$$

Das System $Af = g$ hat dann die exakte Lösung

$$f^* = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

mit $l(f^*) = -2.05547$. Der EM–Algorithmus mit $f^0 = 1_3$ konvergiert hier gegen

$$f^{\mathrm{EM}} = \begin{pmatrix} 3.24 \\ 0 \\ 2.76 \end{pmatrix}$$

mit $l(f^{\mathrm{EM}}) = -2.4916$. In diesem Fall konvergiert der EM–Algorithmus also keinesfalls gegen ein Maximum von L, sondern lediglich gegen eine Lösung von 2.10.
Hat das System $Af = g$ aber positive Lösungen, so muß der EM–Algorithmus nach den obigen Überlegungen gegen eine dieser positiven Lösungen konvergieren. Daß dies der Fall ist, läßt sich auch alleine durch Benutzung der Fixpunktgleichung des EM–Algorithmus zeigen. Hierzu ist es zweckmäßig, die Iteration 2.8 in Matrixschreibweise darzustellen. Diese Matrixdarstellung des EM–Verfahrens lautet

$$\mathrm{EM}(f) := \mathrm{diag}(f) A^{\mathrm{t}} \left(\frac{g}{Af} \right),$$

wobei $\mathrm{diag}(f)$ eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen f_j, $j = 1, \ldots, n$ ist, und man die Division von Vektoren komponentenweise aufzufassen hat.
Der Zusammenhang zwischen einer exakten Lösung von $Af = g$ und einem Fixpunkt des EM–Verfahrens ist durch folgenden Satz gegeben.

Satz 2.1.4 *Sei $f^{\mathrm{EM}} > 0$ ein Vektor mit $f^{\mathrm{EM}} = \mathrm{EM}(f^{\mathrm{EM}})$ und sei $g > 0$. Ist $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$ eine Matrix mit vollem Rang, so gilt für $m \leq n$ $Af^{\mathrm{EM}} = g$. Ist $m > n$ und gibt es ein f^* mit $Af^* = g$, so gilt $f^{\mathrm{EM}} = f^*$.*

Beweis: Da f^{EM} ein Fixpunkt des EM–Verfahrens ist gilt:

$$f^{\mathrm{EM}} = \mathrm{diag}(f^{\mathrm{EM}}) A^{\mathrm{t}} \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}}$$

Durch Multiplikation mit $\mathrm{diag}(f^{\mathrm{EM}})^{-1}$ erhält man hieraus:

$$1_n = A^{\mathrm{t}} \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}}$$

Bringt man den Term 1_n auf die rechte Seite, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} 0 &= A^{\mathrm{t}} \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_n \\ &= A^{\mathrm{t}} \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - A^{\mathrm{t}} 1_m \\ &= A^{\mathrm{t}} \left(\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m \right) \end{aligned}$$

Diese Gleichung besagt gerade, daß $\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m$ im Kern von A^{t} liegt. Es gilt also:

> f^{EM} ist genau dann Fixpunkt des EM–Verfahrens, wenn
> $\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m$ im Kern von A^{t} liegt.

Im Fall $m \leq n$ ist $\ker A^{\mathrm{t}} = \{0\}$, also gilt $\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m = 0$, was sich sofort zu $g = Af^{\mathrm{EM}}$ umformen läßt. Für $m \leq n$ ist der Satz damit gezeigt.
Betrachten wir nun die Situation das $m > n$ ist und ein Lösung f^* existiert. In diesem Fall ist $\ker A^{\mathrm{t}} \supsetneq \{0\}$. Sei $x \in \ker A^{\mathrm{t}}$ mit

$$x = \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m. \tag{2.11}$$

Da $\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} > 0$ ist, gilt $x = \frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m > -1_m$ und somit ist $x + 1_m$ positiv. Aus Gleichung 2.11 erhält man

$$Af^{\mathrm{EM}} = \frac{g}{x + 1_m},$$

also muß $\frac{g}{x+1_m}$ im Bild vom A liegen und ist somit orthogonal zum Kern von A^{t}. Da x aber im Kern von A^{t} liegt gilt:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x, \frac{g}{x + 1_m} \rangle \\ &= \sum_{j=1}^{m} g_j x_j (x_j + 1)^{-1} \end{aligned} \tag{2.12}$$

$Af = g$ ist lösbar, also muß g ebenfalls im Bild von A liegen und ist somit auch orthogonal zum Kern von A^{t}. Bildet man nun das Skalarprodukt von x mit g, so erhält man:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x, g \rangle \\ &= \sum_{j=1}^{m} g_j x_j \end{aligned} \tag{2.13}$$

Durch Subtraktion der Gleichungen 2.12 und 2.13 ergibt sich:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=1}^{m} g_j x_j (1 - \frac{1}{x_j + 1}) \\ &= \sum_{j=1}^{m} g_j \frac{x_j^2}{x_j + 1} \end{aligned} \tag{2.14}$$

Für alle $j = 1, \ldots, m$ ist $g_j > 0$ und $\frac{x_j^2}{x_j+1} \geq 0$. Damit Gleichung 2.14 erfüllt ist, muß also $x_j = 0$ für alle j gelten. Hieraus folgt das $\frac{g}{Af^{\mathrm{EM}}} - 1_m = 0$ sein muß, und wie im Falle $m \leq n$ folgt $Af^{\mathrm{EM}} = g$. Da A vollen Rang hat, ist die Lösung von $Af = g$ eindeutig bestimmt und somit gilt auch $f^* = f^{\mathrm{EM}}$ $\diamond$

Bemerkung: Auf den ersten Blick scheint Satz 2.1.4 im Widerspruch zum zuvor betrachteten Beispiel zu stehen. Bei genauerem Betrachten fällt jedoch auf, daß in dem Beispiel nicht $f^{\mathrm{EM}} > 0$ gilt und der Satz hier somit nicht anwendbar ist.

2.2 Bayessche Methoden

In Paragraph 2.1 wurde bereits darauf hingewiesen, daß der EM–Algorithmus die Countrate erhält, und eine Folge von Vektoren mit monoton steigendem Likelihood erzeugt. Außerdem erhält er auf einfache Weise die Positivität eines Startvektors $f^0 > 0$. Diese Eigenschaften wurden zunächst als Vorteile des EM–Verfahrens gegenüber den bis dahin gebräuchlichen herausgestellt. Es zeigte sich aber bald, daß auch der EM–Algorithmus sehr störende Artefakte in den rekonstruierten Bildern erzeugt (siehe [65]).
Insbesondere ist hier der sogenannte Schachbretteffekt zu erwähnen. In der einschlägigen Literatur versteht man hierunter das Auftreten starker, hochfrequenter Artefakte, wenn die Iteration wirklich bis zur Konvergenz fortgesetzt wird. Startet man den EM-Algorithmus mit $f^0 = 1_n$, so werden zunächst sehr glatte Bilder erzeugt, die noch nicht alle Details enthalten. Nach und nach werden dann auch kleinere Details sichtbar. Überschreitet man aber einen gewissen „optimalen“ Punkt, so werden die Rekonstruktionen immer verrauschter. Dieser Effekt, der ganz allgemein bei iterativen Methoden für schlecht gestellte Probleme zu beobachten ist (s. [48], Kapitel IV, [45]), ist in den Abbildungen 5.1 und 5.6 dargestellt.
Zur Vermeidung des Schachbretteffekts wird in [70] vorgeschlagen, mit einem glatten Startvektor zu beginnen und nach einer festen Anzahl von Iterationen zu stoppen. Da die immer verrauschter werdenden Bilder des EM–Algorithmus aber auch immer höheres Likelihood haben, stellt sich die Frage ob das Maximieren der Likelihood–Funktion ein geeignetes Prinzip für die Bildrekonstruktion aus tomographischen Daten ist. In [40] wurde daher vorgeschlagen, anstelle der Likelihood–Funktion die a posteriori Wahrscheinlichkeit zu maximieren. Hierzu betrachtet man das Bild f, d. h. die Verteilung der radioaktiven Substanz selbst, als die Realisierung eines Zufallsvektors Φ mit Verteilung $\mathrm{P}_A(f)$. Ist $\mathrm{P}(g)$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung für g, $\mathrm{P}_L(g|f)$ die Wahrscheinlichkeit für g, unter der Bedingung, daß f gegeben ist, und $\mathrm{P}_B(f|g)$ die Wahrscheinlichkeit für f unter der Bedingung, daß g gegeben ist, so gilt nach der Bayesschen Formel:

$$\mathrm{P}_B(f|g) = \mathrm{P}_L(g|f)\frac{\mathrm{P}_A(f)}{\mathrm{P}(g)} \tag{2.15}$$

Zu maximieren ist nun $\mathrm{P}_B(f|g)$. $\mathrm{P}_L(g|f)$ ist gerade die Likelihood–Funktion, und über $\mathrm{P}_A(f)$ kann gewisse a priori Information über f in den Rekonstruktionsprozess mit einbezogen werden. Dies können zum Beispiel Informationen über die Korrelation benachbarter Pixel sein, oder sogar ein bekanntes Bild, von dem man weiß, daß es dem gesuchten in gewisser Weise ähnlich ist. Gerade die Tatsache, daß der EM–Algorithmus die Korrelation zwischen benachbarten Pixeln nicht berücksichtigt, ist verantwortlich für das Auftreten des Schachbretteffekts. Die Einbeziehung von a priori Information ist eine gängige Methode zur Regularisierung schlecht gestellter Probleme. Das Prinzip der Maximierung der a posteriori Wahrscheinlichkeit wurde erstmalig

1975 von Hurwitz [28] für die Bildrekonstruktion verwendet.
Man mache sich klar, daß f in diesem verfeinerten Modell gleichzeitig zwei verschiedene Interpretationen besitzt. Zum einen ist f eine Realisierung der Zufallsvariablen Φ. Durch diese Sichtweise wird die Möglichkeit gegeben, gewisse Vorinformationen über f in den Rekonstruktionsprozeß mit einfließen zu lassen. Andererseits interpretiert man f aber auch als Erwartungswert des Zufallsvektors $(\varphi_1, \dots \varphi_n)^t$, wodurch die poissonsche Statistik der radioaktiven Zerfallsprozesse korrekt modelliert wird.
In [17], [16] wird vorgeschlagen, für $\mathrm{P}_A(f)$ einen Bayesschen Prior $\mathrm{P}_A(f) = e^{-U(f)}$ mit der Energiefunktion

$$U(f) = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} w_{kl} v(f_k - f_l)$$

zu verwenden. Hierbei sind w_{kl} positive Gewichte und $v : \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}^+$ heißt Potentialfunktion. U soll dabei so gewählt werden, daß Abweichungen von der a priori Information über f bestraft werden.
Logarithmiert man 2.15, so ergibt sich:

$$\log \mathrm{P}_B(f|g) = \log \mathrm{P}_L(g|f) + \log \mathrm{P}_A(f) - \log \mathrm{P}(g)$$

Anstelle von $\mathrm{P}_B(f|g)$ kann man natürlich genausogut

$$b(f) := \log \mathrm{P}_B(f|g),$$

die Log–a posteriori–Funktion der beobachteten Daten, maximieren. Der Term $-\log \mathrm{P}(g)$ ist nicht von f abhängig, und kann somit vernachlässigt werden. Benutzt man, daß $\mathrm{P}_L(g|f)$ gerade die Likelihood–Funktion ist und wählt $\mathrm{P}_A(f)$ als Bayesschen Prior, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} b(f) &= \log \mathrm{P}_L(g|f) + \log \mathrm{P}_A(f) \\ &= l(f) - U(f) \end{aligned} \tag{2.16}$$

In Paragraph 2.1 haben wir bereits gesehen, daß $l(f)$ im allgemeinen kein eindeutiges Maximum besitzt, insbesondere dann nicht, wenn das System unterbestimmt ist. Wählt man U nun so, daß (Hess U)(f) existiert und negativ definit ist, so muß aufgrund der Tatsache, daß (Hess l)(f) negativ semidefinit ist auch (Hess b)(f) negativ definit sein. Ist U also streng konkav, so muß damit auch b streng konkav sein, womit ein Maximum von b eindeutig bestimmt ist.
Zur Maximierung von b soll ebenfalls ein EM–Verfahren entwickelt werden. Zur Unterscheidung soll im folgenden mit EM immer der in Paragraph 2.1 entwickelte Algorithmus zur Maximierung der Likelihood–Funktion, mit MAP–EM ein Algorithmus zur Maximierung der a posteriori Wahrscheinlichkeit bezeichnet werden.
Der E–Schritt des MAP–EM–Verfahrens ist derselbe wie beim EM–Verfahren. Im M–Schritt wird dann anstelle der Log–Likelihood–Funktion

der N_{ij}^{σ} die Log–a posteriori–Funktion der N_{ij}^{σ} maximiert. Ist die Approximation f^{σ} gegeben, so bestimmt man $f^{\sigma+1}$ somit als das Maximum der Funktion

$$\tilde{b}^{\sigma}(f) := \tilde{l}^{\sigma}(f) - U(f) \tag{2.17}$$

durch Berechnung einer Nullstelle von $\nabla\tilde{b}^{\sigma}(f)$. Da U recht kompliziert sein kann, ist die Bestimmung einer solchen Nullstelle recht schwierig. In der Literatur werden verschiedene Vorschläge zur Durchführung des M–Schritts eines MAP–EM–Verfahrens gemacht (siehe Paragraph 4.1). Teils werden einfach Funktionen U gewählt, für die $\nabla\tilde{b}^{\sigma}(f)$ sehr einfach lösbar ist, teils werden die Nullstellen nur grob approximiert.
Eine weitere Methode ist der Einsatz eines Iterativen Verfahrens zur Lösung des im M–Schritt auftretenden nichtlinearen Gleichungssystems. Der entstehende MAP–EM Algorithmus besteht dann aus zwei ineinander verschachtelten Iterationen. Da die bei der Bildrekonstruktion auftretenden Dimensionen m und n sehr groß sind, muß bei dieser inneren Iteration sehr auf Effizienz geachtet werden. In Kapitel 3 wird der ESNM–Algorithmus, der zentraler Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist, aufgrund dieser Idee entwickelt, wobei für die innere Iteration ein SOR–Newton Verfahren verwendet wird.

Kapitel 3

ESNM–Verfahren

Das Neue an einem ESNM–Verfahren ist, daß zur Lösung des im Maximierungsschritt auftretenden nichtlinearen Gleichungssystems ein iteratives Verfahren benutzt wird. Der entstehende Algorithmus besteht also aus einer inneren und einer äußeren Iteration. Für diese innere Iteration erweist sich das SOR–Newton–Verfahren als sehr geeignet, weshalb es im ersten Paragraphen dieses Kapitels etwas näher betrachtet werden soll. Hieraus erklärt sich auch die Abkürzung ESNM, die für Expectation SOR–Newton–Maximization steht. In Paragraph 3.2 wird dann das ESNM–Verfahren für allgemeine Penalty–Funktionen U entwickelt, und die Konvergenz dieser Verfahren in 3.3 untersucht. Schließlich sollen in Paragraph 3.4 ESNM–Verfahren für spezielle Funktionen U betrachtet werden.
Es stellt sich natürlich die Frage, warum man das SOR–Newton–Verfahren nicht direkt zur Lösung von $\nabla b(x) = 0$ verwendet. In Paragraph 3.5 wird ein solches Verfahren für ein spezielles U hergeleitet, wobei sich aber später in 5.3 herausstellen wird, daß diese Art der Berechnung weit weniger geeignet ist als das zuvor betrachtete entsprechende ESNM–Verfahren.

3.1 Das SOR–Newton–Verfahren

Sei $\phi : \mathrm{D} \subset \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n$ eine stetig differenzierbare Funktion. Gesucht ist ein $x^* \in \mathrm{D}$ mit $\phi(x^*) = 0$. Die wohl bekannteste Methode zur Lösung dieses Problems ist das Newton–Verfahren:

$$x^{\tau+1} = x^\tau - (\phi'(x^\tau))^{-1}\phi(x^\tau)$$

Ein großer Nachteil dieses Verfahrens ist, daß die Funktionalmatrix $\phi'(x^\tau)$ explizit bestimmt werden muß, wozu immerhin die Berechnung von n^2 partiellen Ableitungen erforderlich ist. Da in der Tomographie die für n auftretenden Werte sehr groß sind, ist diese Verfahren hier sicherlich nicht praktikabel.
Eine Variante des Newton–Verfahrens entstammt der Idee, die Lösung eines Systems n nichtlinearer Gleichungen in n Unbekannten auf die sukzessive Lösung von n nichtlinearen Gleichungen in einer Unbekannten zurück-

zuführen. In Analogie zum Einzelschrittverfahren für lineare Gleichungssysteme [20] ist die j-te Komponente der $(\tau+1)$-ten Iterierten dann bestimmt durch die Gleichung:

$$\phi_j(x_1^{\tau+1},\ldots,x_{j-1}^{\tau+1},x_j^{\tau+1},x_{j+1}^{\tau},\ldots,x_n^{\tau})=0$$

Dies ist nun eine nichtlineare Gleichung in der Unbekannten $x_j^{\tau+1}$, welches mit der eindimensionalen Version des Newton–Verfahrens gelöst werden kann. Da die Bestimmung von $x_j^{\tau+1}$ aber ohnehin nur zu einer neuen Näherung für x^* führt, verzichtet man darauf, diese Iteration bis zum Eintreten eines Konvergenzkriteriums durchzuführen und berechnet statt dessen nur einen Schritt des Newton-Verfahrens. Entsprechend dem SOR–Verfahren für lineare Gleichungen [20] kann man nun noch einen Relaxationsparameter ω zur Konvergenzbeschleunigung einführen, und erhält so das folgende SOR–Newton–Verfahren [60],[51]:

$$x_j^{\tau+1}=x_j^{\tau}-\omega\left(\frac{\phi_j}{\frac{\partial\phi_j}{\partial x_j}}\right)(x_1^{\tau+1},\ldots,x_{j-1}^{\tau+1},x_j^{\tau},\ldots,x_n^{\tau}),\quad j=1,\ldots,n \tag{3.1}$$

Insbesondere braucht bei diesem Verfahren also nur die Diagonale von ϕ', d.h. n partielle Ableitungen, berechnet zu werden.
Für die nun folgende Darlegung der Konvergenzeigenschaften des SOR–Newton–Verfahrens sei im wesentlichen auf die Kapitel 7.6, 9.2, 10.1 und 10.3 in [51] verwiesen. Zunächst werden einige Definitionen benötigt.

Definition 3.1.1 *Ein Operator* $\mathrm{G}:\mathrm{D}\subset\mathbf{R}^n\longrightarrow\mathbf{R}^n$ *definiert einen „iterativen Prozeß“* [1] $\mathcal{I}=(\mathrm{G},\mathrm{D}^*)$ *mit „Definitionsgebiet“* $\mathrm{D}^*\subset\mathrm{D}$*, wenn gilt:*

i. $\mathrm{D}^*\neq\emptyset$

ii. Für jedes $x^0\in\mathrm{D}^*$ *liegen alle Vektoren der Folge* (x^τ)*, die gemäß* $x^{\tau+1}=\mathrm{G}x^\tau$ *gebildet wird, in* D*.*

Ein Punkt x^* *mit* $\lim\limits_{\tau\to\infty}x^\tau=x^*$ *heißt „Grenzwert des Prozesses“, und die Menge aller Folgen* (x^τ)*, die durch* $\mathcal{I}$ *generiert werden und gegen* x^* *konvergieren, wird mit* $\mathcal{C}(\mathcal{I},x^*)$ *bezeichnet.*

Auch die Iteration 3.1 kann auf die Form $x^{\tau+1}=\mathrm{G}x^\tau$ gebracht werden. Am einfachsten ist dies, wenn man die Komponenten $g_1,\ldots,g_n$ von G wie folgt in rekursiver Weise definiert.

$$g_j(x):=x_j-\omega\left(\frac{\phi_j}{\frac{\partial\phi_j}{\partial x_j}}\right)(g_1(x),\ldots,g_{j-1}(x),x_j,\ldots,x_n),\quad j=1,\ldots,n \tag{3.2}$$

Zur Quantifizierung der Konvergenzgeschwindigkeit wird in [51], Kapitel 9.2, die folgende Begriffsbildung eingeführt.

[1] Da nur iterative Prozesse dieser einfachen Art betrachtet werden, kann auf die wesentlich allgemeinere Form der Definition in [51] verzichtet werden.

Definition 3.1.2 *Sei (x^τ) eine Folge im $\mathbf{R}^n$ die gegen x^* konvergiert. Die Zahl*

$$\mathrm{R}_1(x^\tau) := \limsup_{\tau\to\infty} \|x^\tau - x^*\|^{1/\tau}$$

heißt „R–Faktor der Folge (x^τ)". Ist $\mathcal{I}$ ein iterativer Prozeß mit Grenzwert x^*, so heißt

$$\mathrm{R}_1(\mathcal{I}, x^*) := \sup\{\mathrm{R}_1(x^\tau) : (x^\tau) \in \mathcal{C}(\mathcal{I}, x^*)\}$$

„R–Faktor" von $\mathcal{I}$.

Bemerkungen

i. Es läßt sich leicht zeigen, daß die R–Faktoren unabhängig von der gewählten Norm sind.

ii. Ist $\mathrm{R}_1 := \mathrm{R}_1(\mathcal{I}, x^*) < 1$, so gibt es für jedes $\epsilon > 0$ mit $\mathrm{R}_1 + \epsilon < 1$ und jede Folge $(x^\tau) \in \mathcal{C}(\mathcal{I}, x^*)$ ein $\tau_0 \geq 0$ mit

$$\|x^\tau - x^*\| \leq (\mathrm{R}_1 + \epsilon)^\tau \qquad \text{für alle } \tau \geq \tau_0.$$

Dies bedeutet aber gerade, daß eine von $\mathcal{I}$ erzeugte Folge (x^τ) die gegen x^* strebt, asymptotisch linear mit der Konvergenzrate $(\mathrm{R}_1 + \epsilon)$ konvergiert.

Definition 3.1.3 *Sei $\mathrm{G} : \mathrm{D} \subset \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n$. x^* heißt „Attraktor" der Iteration $x^{\tau+1} = \mathrm{G}x^\tau$, wenn es eine offene Umgebung $\mathrm{S} \subset \mathrm{D}$ von x^* gibt, so daß für jedes $x^0 \in \mathrm{S}$ die Folge (x^τ) gegen x^* konvergiert und alle Vektoren der Folge in D liegen.*

Für die folgenden Ausführungen zerlegen wir nun die Matrix $\phi'(x)$ gemäß $\phi'(x) = D(x) - L(x) - R(x)$, wobei $D(x)$ den Diagonalteil, und $-L(x)$ bzw. $-R(x)$ den strengen linken bzw. strengen rechten Dreiecksteil von $\phi'(x)$ darstellen. Die Matrix $H_\omega(x)$ sei dann definiert durch:

$$H_\omega(x) := (D(x) - \omega L(x))^{-1}((1-\omega)D(x) + \omega R(x)) \tag{3.3}$$

Dies entspricht, bis auf die Abhängigkeit von x, genau der Bildung der SOR–Matrix[2] im linearen Fall [20]. Die wesentlichen Aussagen über die Konvergenzeigenschaften des SOR–Newton–Verfahrens sind nun in folgendem Satz zusammengefaßt.

Satz 3.1.4 (SOR–Newton Theorem) *Gegeben sei eine Abbildung $\phi : \mathrm{D} \subset \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n$. Es existiere ein x^* im Inneren von D mit $\phi(x^*) = 0$ und eine offene Umgebung $\mathrm{S}_0 \subset \mathrm{D}$ von x^* in der ϕ zweimal stetig differenzierbar ist. Der Operator G sei wie in 3.2 definiert. Ferner sei $\mathrm{D}(x^*)$ nicht singulär und $\lambda = \varrho(H_\omega(x^*)) < 1$ für $\omega > 0$. Dann gilt:*

[2] Im folgendem ist mit SOR–Matrix immer diese, von x abhängende Matrix gemeint.

i. *G ist auf einer offenen Kugel* $\mathrm{S} = \mathrm{S}(x^*, \delta) \subset \mathrm{S}_0$ *wohldefiniert.*

ii. x^* *ist Attraktor der Iteration*[3] $\mathcal{I} : x^{k+1} = \mathrm{G}x^k$.

iii. $\mathrm{R}_1(\mathcal{I}, x^*) = \lambda$

Beweis: S. [51] S. 323, Satz 10.3.3.

Bemerkung: Es läßt sich sogar zeigen, daß die asymptotische Konvergenzrate des SOR–Newton–Verfahrens *nicht* verbessert wird, wenn in der inneren Iteration mehr als ein Schritt des eindimensionalen Newton–Verfahrens ausgeführt wird. Siehe hierzu [51] S. 327.

3.2 Konstruktion von ESNM–Verfahren

Wie schon zu Anfang dieses Kapitels erwähnt, wird bei einem ESNM–Verfahren im Maximierungsschritt das SOR–Newton Verfahren verwendet. Zu lösen ist hier das nichtlineare Gleichungssystem

$$\nabla \tilde{b}(x) = 0 \tag{3.4}$$

mit

$$\tilde{b}(x) := \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} \Big(-a_{ij} x_j + N_{ij} \log(a_{ij} x_j) \Big) - U(x).$$

Die N_{ij} sind hierbei gemäß 2.1 definiert und hängen natürlich von der aktuellen Approximation ab. Außerdem ist das zu lösende Gleichungssystem diesmal in der Variablen x geschrieben worden, da die sukzessiven Approximationen der inneren Iteration entsprechend mit x^τ bezeichnet werden sollen. Zur Aufstellung des SOR–Newton–Verfahrens für die Lösung von 3.4 benötigt man nun die ersten und zweiten partiellen Ableitungen nach jeder Variablen x_j. Mit 2.5 und 2.6 ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{b}}{\partial x_\nu}(x) &= -1 + \frac{1}{x_\nu} \sum_{i=1}^{m} N_{i\nu} - \frac{\partial U}{\partial x_\nu}(x) \\ \frac{\partial^2 \tilde{b}}{\partial x_\nu^2}(x) &= -\frac{1}{x_\nu^2} \sum_{i=1}^{m} N_{i\nu} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu^2}(x) \end{aligned}$$

Sei nun $f^{\sigma-1}$ die aktuelle Approximation. Wir setzen:

$$y_j^\sigma := \mathrm{EM}_j(f^{\sigma-1}) = \sum_{i=1}^{m} N_{ij}\,, \quad j = 1, \ldots, n$$

Es ergibt sich dann folgende Iterationsvorschrift für das SOR–Newton–Verfahren, das die innere Iteration des ESNM–Verfahrens darstellt:

[3] Durch die Definition von „Attraktor“ ist ein Definitionsgebiet der Iteration implizit vorgegeben.

Für $j = 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned} x_j^{\tau+1} &= x_j^\tau - \omega \frac{-1 + \frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} - \frac{\partial U}{\partial x_j}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)}{-\frac{y_j^\sigma}{(x_j^\tau)^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)} \\ &= x_j^\tau + \omega \frac{-(x_j^\tau)^2 + x_j^\tau y_j^\sigma - (x_j^\tau)^2 \frac{\partial U}{\partial x_j}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)}{y_j^\sigma + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)} \\ &= x_j^\tau + \omega \frac{x_j^\tau y_j^\sigma - (x_j^\tau)^2 (1 + \frac{\partial U}{\partial x_j}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau))}{y_j^\sigma + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)} \end{aligned} \tag{3.5}$$

Bei den obigen Umformungen wurde natürlich stillschweigend vorausgesetzt, daß $x_j^\tau \neq 0$ für alle j und τ gilt. Da der entstehende Algorithmus aber sogar die Positivität der berechneten Vektoren f^σ sicherstellen soll, muß hier sogar $x_j^\tau > 0$ für jedes j und τ gefordert werden. Eine hinreichende Bedingung hierfür gibt der folgende Satz an.

Satz 3.2.1 *Sei $\omega = 1$. Für alle $j = 1, \ldots, n$ gelte $y_j^\sigma > 0$, $x_j^\tau > 0$, $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} \geq \frac{1}{2}$ und $\frac{\partial U}{\partial x_j} - x_j \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2} < 0$, $\frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2} \geq 0$ auf $\mathbf{R}_+^n$. Dann ist auch $x_j^{\tau+1} > 0$ für jedes $j = 1, \ldots, n$.*

Beweis: Es reicht offenbar zu zeigen, daß $x_j^{\tau+1} > 0$ bleibt, wenn $x_l^{\tau+1} > 0$ für $l < j$ ist. Sei $\tilde{x} := (x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)^t$. Nach den geltenden Voraussetzungen ist $\tilde{x} \in \mathbf{R}_+^n$. Durch Umformung von 3.5 ergibt sich für $x_j^{\tau+1}$:

$$\begin{aligned} x_j^{\tau+1} &= x_j^\tau \left(1 + \frac{y_j^\sigma - x_j^\tau - x_j^\tau \frac{\partial U}{\partial x_j}(\tilde{x})}{y_j^\sigma + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x})} \right) \\ &= x_j^\tau \frac{2y_j^\sigma - x_j^\tau + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x}) - x_j^\tau \frac{\partial U}{\partial x_j}(\tilde{x})}{y_j^\sigma + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x})} \\ &= x_j^\tau \frac{2\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} - 1 + x_j^\tau \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x}) - \frac{\partial U}{\partial x_j}(\tilde{x})}{\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} + x_j^\tau \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x})} \end{aligned} \tag{3.6}$$

Nach den Voraussetzungen des Satzes ist der Nenner des Bruchs positiv. Aus der Voraussetzung $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} \geq \frac{1}{2}$ folgt $2\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} - 1 \geq 0$. Verwenden wir nun noch $\frac{\partial U}{\partial x_j}(\tilde{x}) - x_j^\tau \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(\tilde{x}) < 0$, so ergibt sich auch die Positivität des Zählers und damit die Aussage des Satzes. $\diamond$

Leider wird in Satz 3.2.1 noch eine Bedingung über den Quotienten $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau}$ benötigt. Schöner wäre es natürlich, wenn man eine von allen y_j^σ, x_j^τ unabhängige, hinreichende Bedingung für U fände, die die Positivität der berechneten x_j^τ garantiert. Eine solche Bedingung, die sich aus dem Beweis des

vorherigen Satzes sofort herleiten läßt, ist:

$$\frac{\partial U}{\partial x_j}(x) - x_j \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x) \leq -1 \quad \text{für alle } x \in \mathbf{R}^n_+$$

Hier braucht man in 3.6 nur auszunutzen, daß $-1 < 2\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} - 1$ wegen $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} > 0$ gilt, wobei sich die letzte Bedingung von selbst aus der Forderung $x_j^\tau,\ y_j^\sigma > 0$ ergibt. Leider zeigt es sich aber, daß diese Abschätzung in der Praxis wertlos ist, da sie viel zu strenge Anforderungen an U macht. In 3.4 werden Positivitätsbedingungen für spezielle Penalty–Funktionen U hergeleitet. Auch hier wird es sich als nützlich erweisen, gewisse Forderungen an den Quotienten $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau}$ zu stellen, wobei sich in experimentellen Rechnungen aber herausgestellt hat, daß diese Forderungen tatsächlich erfüllt waren.
Bei der Konstruktion eines ESNM–Verfahrens wird als Startwert für die innere Iteration die aktuelle Approximation, nach Anwendung eines einfachen EM–Schritts benutzt, was sich in der Praxis als sehr geeignet herausgestellt hat. Man gelangt so zu dem in Abbildung 3.1 gezeigten Verfahren.

$f^0 := 1_n$;
for $\sigma = 1$ **to** σmax
  $y^\sigma := \mathrm{EM}(f^{\sigma-1})$;
  $x^0 := y^\sigma$; $\tau := 0$;
  repeat
    for $j = 1$ **to** n

$$x_j^{\tau+1} = x_j^\tau + \omega \frac{x_j^\tau y_j^\sigma - (x_j^\tau)^2\left(1 + \frac{\partial U}{\partial x_j}(x_1^{\tau+1},\ldots,x_{j-1}^{\tau+1},x_j^\tau,\ldots,x_n^\tau)\right)}{y_j^\sigma + (x_j^\tau)^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x_1^{\tau+1},\ldots,x_{j-1}^{\tau+1},x_j^\tau,\ldots,x_n^\tau)};$$

    $\tau := \tau + 1$;
  until $\|x^\tau - x^{\tau-1}\| \leq \epsilon$;
  $f^\sigma := x^\tau$;

Abbildung 3.1: ESNM–Algorithmus in Pseudo-Sprache

Bemerkung: Ist $f^{\sigma-1} > 0$ so ist nach 2.8 auch $y^\sigma > 0$. In der Situation von Satz 3.2.1 sind dann alle Approximationen x^τ positiv, womit auch $f^\sigma > 0$ gilt. In diesem Fall ist das ESNM–Verfahren somit positivitätserhaltend.
Falls die Auswertung der partiellen Ableitungen $\frac{\partial U}{\partial x_\nu}$, $\frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu^2}$, $\nu = 1,\ldots,n$ einen hohen Rechenaufwand erfordert, so wäre dieses Verfahren aus Zeitgründen gegenwärtig wohl nicht durchführbar. Setzt man aber voraus, daß sich diese Ableitungen mit einer von n unabhängigen Konstanten Zahl von Operationen berechnen lassen, und daß in der inneren Iteration maximal T (T unabhängig von n) SOR–Newton Schritte auszuführen sind, so beträgt der zusätzliche Rechenaufwand cTn Operationen, wobei c eine geeignete Konstante darstellt. Mit der Standard–Geometrie 1.6 bedeutet dies einen zusätzlich Aufwand von

$\frac{4cT}{9}p^2$ Operationen, was bei hinreichend großem p gegenüber dem Aufwand von $\frac{8}{9}p^3+\frac{20}{9}p^2$, der ohnehin für die Durchführung eines EM–Schrittes benötigt wird, kaum ins Gewicht fällt.

3.3 Konvergenz eines ESNM–Verfahrens

In diesem Paragraphen soll die Penalty–Funktion U folgende Voraussetzungen erfüllen:

i. U sei dreimal stetig differenzierbar und $(\mathrm{Hess}\, U)(x)$ sei in allen $x \in \mathbf{R}^n_+$ positiv definit.

ii. $U(x) \geq 0$ auf $\overline{\mathbf{R}}^n_+$.

iii. Die Iteration 3.5 bleibe in $\mathbf{R}^n_+$.

Nach Paragraph 2.2 ist $(\mathrm{Hess}\, b)$ somit negativ definit. Existiert nun ein $x^* \in \mathbf{R}^n_+$ mit $\nabla b(x) = 0$, so ist dies ein globales Maximum von b auf $\mathbf{R}^n_+$.
Zunächst wollen wir die Konvergenzeigenschaften der inneren Iteration eines ESNM–Verfahrens untersuchen. Hierzu werden aber noch einige Hilfsmittel aus der konvexen Analysis benötigt, die im folgenden zusammengestellt werden sollen und allesamt [55] entnommen sind.
Sei $\phi : \mathrm{S} \subset \mathbf{R}^n_+ \longrightarrow \mathbf{R}$ eine konvexe Funktion. In [55], Paragraph 4, werden solche Funktionen fortgesetzt gemäß

$$\tilde{\phi}(x) := \begin{cases} \phi(x) & , \quad x \in \mathrm{S} \\ +\infty & , \quad x \notin \mathrm{S} \end{cases} ,$$

und daher nur konvexe Funktionen $\tilde{\phi} : \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n \cup \{+\infty, -\infty\}$ betrachtet. Im folgenden soll mit der Bezeichnung „konvexe Funktion“ daher immer eine solche Funktion gemeint sein, es sei denn, Definitions- und Wertebereich sind explizit angegeben.
Die nachstehenden Definitionen entstammen den Paragraphen 4, 7 und 27 von [55].

Definition 3.3.1 *Sei ϕ eine konvexe Funktion. ϕ heißt „geeignet“, falls gilt:*

i. Es existiert ein $x \in \mathbf{R}^n$ mit $\quad \phi(x) < \infty$.

ii. $\phi(x) > -\infty$ für alle $x \in \mathbf{R}^n$.

Für eine geeignete konvexe Funktion heißt die durch

$$(\mathrm{cl}\, \phi)(x) := \liminf_{y \to x} \phi(y)$$

definierte Funktion der „Abschluß“ von ϕ. Gilt $(\mathrm{cl}\, \phi) = \phi$ so heißt ϕ „abgeschlossen“.

Definition 3.3.2 *Sei ϕ eine abgeschlossene geeignete konvexe Funktion. $\theta \in \mathbf{R}^n - \{0\}$ heißt „Rezessionsrichtung" von ϕ, falls $g(\lambda) := \phi(x + \lambda\theta)$ für jedes $x \in \mathbf{R}^n$ eine nicht wachsende Funktion von λ ist.*

Zum Beweis der lokalen Konvergenz im Maximierungsschritt des ESNM–Verfahrens wird als wesentliches Hilfsmittel der konvexen Analysis der folgende Satz benötigt.

Satz 3.3.3 *Sei ϕ eine abgeschlossene geeignete konvexe Funktion, die keine Rezessionsrichtungen besitzt. Dann ist $\inf_{x \in \mathbf{R}^n} \phi(x)$ endlich, und ϕ nimmt sein Infimum auf $\mathbf{R}^n$ an.*

Beweis: S. [55], S. 265, Satz 27.2.

Nachdem nun die benötigte Theorie dargelegt worden ist, kann das zentrale Ergebnis dieses Paragraphen, das die lokale Konvergenz der inneren Iteration eines ESNM–Verfahrens sicherstellt, bewiesen werden.

Satz 3.3.4 *Sei $x^0 > 0$ und es gelten die zuvor genannten Voraussetzungen für U. Dann konvergiert die Iteration 3.5 für $0 < \omega < 2$ gegen das eindeutig bestimmte Maximum x^* von $\tilde{b}$ falls x^0 hinreichend nahe bei x^* ist. Bezeichnet man diese Iteration mit $\mathcal{I}$, und ist $\lambda = \varrho(H_\omega(x^*))$, wobei $H_\omega(x)$ analog zu 3.3 aus $(\operatorname{Hess}\tilde{b})(x)$ gebildet wird, so gilt $\mathrm{R}_1(\mathcal{I}, x^*) = \lambda$.*

Beweis: Zur Vereinfachung der Sprechweise betrachten wir anstelle der Maximierung von $\tilde{b}$ die Minimierung von $\tilde{h} := -\tilde{b}$. Der nun folgende Beweis ist natürlich im wesentlichen nichts anderes als die Anwendung des SOR–Newton Theorems (Satz 3.1.4) auf die Funktion $\nabla\tilde{h} : \mathbf{R}^n_+ \longrightarrow \mathbf{R}^n$. Da $\operatorname{Hess}\tilde{b}$ negativ definit ist, muß $\operatorname{Hess}\tilde{h}$ positiv definit sein. Existiert also ein $x^* \in \mathbf{R}^n_+$ mit $\nabla\tilde{h}(x^*) = 0$, so ist x^* aufgrund der strengen Konvexität von $\tilde{h}$ globales Maximum von $\tilde{h}$ und überdies eindeutig bestimmt.
Für eine beliebige, positiv definite Matrix ist bekanntlich die zugehörige SOR–Matrix, für $\omega \in (0, 2)$, wohldefiniert und hat einen Spektralradius < 1 [20]. Es reicht also, die Existenz einer Nullstelle $x^* \in \mathbf{R}^n_+$ von $\nabla\tilde{h}$ nachzuweisen. Da $\mathbf{R}^n_+$ offen und $\nabla\tilde{h} \in \mathrm{C}^2(\mathbf{R}^n_+)$ ist, existiert dann offenbar auch eine Umgebung $S_0 \subset \mathbf{R}^n_+$ von x^* in der $\nabla\tilde{h}$ zweimal stetig differenzierbar ist, womit alle Voraussetzungen des SOR–Newton Theorems erfüllt sind, und somit die Behauptung des Satzes folgt.
Zum Beweis der Existenz einer solchen Nullstelle x^* betrachten wir zunächst die Funktion $\tilde{h}$ für den Fall $U \equiv 0$.

$$\begin{aligned}\tilde{h}(x) &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - N_{ij}\log(a_{ij}x_j) \\ &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \quad - \quad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} N_{ij}\log(x_j) \quad - \quad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} N_{ij}\log(a_{ij})\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^{n} x_j \underbrace{\sum_{i=1}^{m} a_{ij}}_{=1} \quad - \quad \sum_{j=1}^{n} \log(x_j) \underbrace{\sum_{i=1}^{m} N_{ij}}_{:=c_1>0} \quad + \quad \underbrace{\left(- \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} N_{ij} \log(a_{ij}) \right)}_{=:c_2} \\
&= \left(\sum_{j=1}^{n} x_j \quad - \quad \sum_{j=1}^{n} c_1 \log(x_j) \right) \quad + \quad c_2 \\
&= \left(\sum_{j=1}^{n} x_j - c_1 \log(x_j) \right) \quad + \quad c_2
\end{aligned}
$$

Die einzelnen Summanden haben nun folgendes Grenzverhalten:

$$
\begin{aligned}
x_j - c_1 \log(x_j) &\to +\infty \quad \text{für} \quad x_j \searrow 0 \\
x_j - c_1 \log(x_j) &\to +\infty \quad \text{für} \quad x_j \to +\infty
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

Insgesamt ergibt sich somit für $\tilde{h}$:

$$\tilde{h}(x) \to +\infty \text{ falls } x \to \tilde{x} \in \partial \mathbf{R}_+^n \text{ oder } \|x\| \to \infty$$

Da $U(x) \geq 0$ auf $\overline{\mathbf{R}}_+^n$ vorausgesetzt wurde, gilt dieses Ergebnis natürlich auch für entsprechende $U \not\equiv 0$. Wie zuvor erläutert setzen wir nun $\tilde{h}$ zu einer auf ganz $\mathbf{R}^n$ definierten Funktion h durch $h(x) := \infty$ für $x \notin \mathbf{R}_+^n$ fort. Wegen $h(x) \in \mathbf{R}$ für alle $x \in \mathbf{R}_+^n$ ist h offensichtlich geeignet. h ist aber auch abgeschlossen, wie die folgenden Identitäten zeigen.

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{cl}\, h)(x) &= \liminf_{y \to x} h(x) \\
&= \begin{cases} \tilde{h}(x) & , \quad x \in \mathbf{R}_+^n & \text{da } \tilde{h} \text{ stetig auf } \mathbf{R}_+^n \\ +\infty & , \quad x \in \partial \mathbf{R}_+^n & \text{nach 3.7} \\ +\infty & , \quad x \in \mathbf{R}^n - \overline{\mathbf{R}}_+^n & \text{nach Definition} \end{cases} \\
&= h(x)
\end{aligned}
$$

Sei nun $\theta \in \mathbf{R}^n - \{0\}$, $x \in \mathbf{R}_+^n$ und $g(\lambda) := h(x + \lambda\theta)$. Ist $x + \lambda\theta \in \mathbf{R}_+^n$ für jedes $\lambda \in \mathbf{R}$ so muß offenbar $\|x + \lambda\theta\|$ gegen unendlich streben, falls λ gegen unendlich geht. Andernfalls ist aber ab einem gewissen λ_0 $x + \lambda\theta \notin \mathbf{R}_+^n$ für alle $\lambda \geq \lambda_0$. In jedem Fall gilt also $g(\lambda) \to \infty$ für $\lambda \to \infty$. Dies bedeutet aber, daß g ab irgendeinem Punkt eine wachsende Funktion sein muß, womit h keine Rezessionsrichtungen haben kann. Nach Satz 3.3.3 existiert nun ein $x^* \in \mathbf{R}^n$ mit $h(x^*) = \inf_{x \in \mathbf{R}^n} h(x) < \infty$. Da $h(x) < \infty$ nur für $x \in \mathbf{R}_+^n$ gilt, muß natürlich $x \in \mathbf{R}_+^n$ sein, und aus der Offenheit von $\mathbf{R}_+^n$ folgt sofort $\nabla \tilde{h}(x^*) = \nabla h(x^*) = 0$. $\diamond$

Leider liefert dieser Satz nur die lokale Konvergenz der inneren Iteration. Betrachtet man den Beweis des Satzes genauer, so sieht man aber, daß die im SOR–Newton Theorem verlangte Bedingung $H_\omega(x^*) = \lambda < 1$ stark übererfüllt ist. Im Fall $\omega \in (0, 2)$ gilt sogar $H_\omega(x) = \lambda(x) < 1$ auf ganz $\mathbf{R}_+^n$. Es mag sein, daß diese Tatsache ausgenutzt werden kann, um globale Konvergenzaussagen für das im Maximierungsschritt verwendete Iterationsverfahren

zu erhalten. Die Klarstellung dieser Frage könnte Gegenstand weiterer Arbeiten zum Thema ESNM–Verfahren sein.
Da EM–Verfahren in der Praxis nicht sehr schnell konvergieren, kann man annehmen, daß die Näherung $f^{\sigma+1}$ nicht allzuweit von der Näherung f^{σ} entfernt ist. Aus diesem Grund wurde in Paragraph 3.2 auch die aktuelle Approximation, nach Anwendung eines einfachen EM–Schrittes, als Startwert für die innere Iteration benutzt.
Um Aussagen über die Konvergenz des gesamten ESNM–Verfahrens machen zu können, sollen nun Ergebnisse aus [72] benutzt werden. Hierzu ist es zunächst notwendig die Funktion $\tilde{b}$, die im M–Schritt des MAP–EM–Verfahrens zu maximieren ist, als Funktion $\tilde{b}(f, f^{\sigma})$ der beiden Parameter f und f^{σ} aufzufassen. In [72] werden zunächst folgende Voraussetzungen gemacht:

> Sei $\Omega := \{f \in \mathbf{R}^n : f \geq 0\}$. $\Omega_{f^0} := \{f \in \Omega : b(f) \geq b(f^0)\}$ sei kompakt für alle $f^0 \in \Omega$ mit $b(f^0) > -\infty$, und b sei im Inneren von Ω stetig differenzierbar.

Außerdem sei $\mathcal{M}$ die Menge der lokalen Maxima von b, $\mathcal{S}$ die Menge der stationären Punkte des MAP–EM–Verfahrens, jeweils im Inneren von Ω, und $\mathcal{M}(a) := \{f \in \mathcal{M} : b(f) = a\}$. Als erstes Ergebnis benötigen wir Theorem 3 aus [72].

Satz 3.3.5 *Sei $\tilde{b}$ stetig als Funktion von f und f^{σ} und es gelte*

$$\sup_{f' \in \Omega} \tilde{b}(f', f) > \tilde{b}(f, f) \text{ für alle } f \in \mathcal{S} - \mathcal{M}.$$

Dann sind alle Grenzwerte aller vom MAP–EM–Algorithmus generierten Folgen (f^{σ}) lokale Maxima von b und die Folge $(b(f^{\sigma}))$ konvergiert monoton[4] *gegen $b^* = b(f^*)$ für ein lokales Maximum f^*.*

Für streng konvexe Funktionen U sind die Funktionen b und $\tilde{b}$ (als Funktion in f) streng konkav und die Voraussetzungen des Satzes somit erfüllt. Die streng konkave Funktion b kann natürlich höchstens ein Maximum f^* im Inneren von Ω haben. Ist dies der Fall, so ist also die Konvergenz der Folge $(b(f^{\sigma}))$ gegen $b(f^*)$ sichergestellt. Die Frage, ob die Folge (f^{σ}) konvergiert ist hiermit aber noch nicht beantwortet. Hierzu benötigen wir noch Theorem 4 aus [72]. In diesem Satz taucht der Begriff des MAP–GEM–Algorithmus (GEM = generalized EM) auf. Im Gegensatz zum EM–Algorithmus wird hier im Maximierungsschritt nicht $\tilde{b}(f, f^{\sigma})$ als Funktion von f maximiert, sondern lediglich

$$\tilde{b}(f^{\sigma+1}, f^{\sigma}) \geq \tilde{b}(f^{\sigma}, f^{\sigma})$$

verlangt. Der MAP–EM–Algorithmus ist somit ein Spezialfall eines MAP–GEM–Algorithmus.
Setzen wir auch hier wieder voraus, daß $\tilde{b}$ in f und f^{σ} stetig ist, so gilt folgender Satz:

[4] Mit monoton ist hier $b(f^{\sigma+1}) > b(f^{\sigma})$ für $f^{\sigma+1} \neq f^{\sigma}$ gemeint.

Satz 3.3.6 *Ist (f^σ) eine von einem MAP–GEM–Algorithmus erzeugte Folge mit $b(f^{\sigma+1}) > b(f^\sigma)$ für alle $f^\sigma \notin \mathcal{M}$, $\mathcal{M}(b^*) = \{f^*\}$, b^* wie in Satz 3.3.5, so konvergiert die Folge (f^σ) gegen f^*.*

Bemerkungen:

i. Wählt man U streng konvex, so gilt, wie oben bereits erwähnt, Satz 3.3.5. Also ist aufgrund der monotonen Konvergenz auch $b(f^{\sigma+1}) > b(f^\sigma)$ für alle $f^\sigma \notin \mathcal{M}$ erfüllt. Da b streng konkav ist, ist auch die Voraussetzung über $\mathcal{M}(b^*)$ in Satz 3.3.6 erfüllt, falls $\mathcal{M} \neq \emptyset$ ist, und die Folge (f^σ) muß somit gegen ein eindeutig bestimmtes Maximum von b konvergieren.

ii. Wenn die innere Iteration eines ESNM–Verfahrens für jede der sukzessiven Approximationen f^σ konvergiert, und das so berechnete $f^{\sigma+1}$ $\tilde{b}(f^{\sigma+1}, f^\sigma) \geq \tilde{b}(f^\sigma, f^\sigma)$ erfüllt, so liegt auch hier ein MAP–GEM–Verfahren im allgemeinen Sinne vor. Die Konvergenzaussagen für das MAP–GEM–Verfahren gelten in diesem Falle also auch für das ESNM–Verfahren. Für einen vollständigen Beweis der Konvergenz des ESNM–Verfahrens wäre natürlich noch zu zeigen, daß die innere Iteration bei der speziellen Wahl von x^0 in jedem Fall konvergiert und die Monotoniebedingung erfüllt ist. Dies zu zeigen ist mir bis jetzt jedoch noch nicht gelungen.

3.4 Implementation

In diesem Paragraphen soll nun ein ESNM–Verfahren für einen speziellen Typ von Penalty–Funktionen hergeleitet werden. Auf diese Funktionen sollen dann auch die theoretischen Ergebnisse der vorherigen Paragraphen angewendet werden.
Die Penalty–Funktion soll so gewählt sein, daß sie sowohl Abweichungen von einer gegebenen a priori Information $f^{\text{ap}} \in \mathbf{R}^n$, als auch ein hohes Rauschen in der Rekonstruktion bestraft.
Für $i = 1, 2$ seien $v_i : \mathbf{R} \longrightarrow \overline{\mathbf{R}}_+$ dreimal stetig differenzierbare, gerade Funktionen und $W = (w_{kl}) \in \mathbf{R}^{n\times n}$ eine symmetrische Matrix mit nicht negativen Gewichten w_{kl}. Die betrachteten Penalty–Funktionen U sollen dann immer folgende Form haben.

$$U(x) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} w_{kl} v_{kl}(x) \tag{3.8}$$

$$\text{mit} \qquad v_{kl}(x) := \begin{cases} v_1(x_l - f_l^{\text{ap}}) & , \quad l = k \\ v_2(x_l - x_k) & , \quad l \neq k \end{cases}$$

Die Matrixeinträge w_{ll} und die Funktion v_1 stellen also eine Wichtung für die Abweichung von der a priori Information f^{ap} dar, während die w_{kl} für $l \neq k$ und v_2 eine Kontrolle über die Glattheit des berechneten Bildes ermöglichen.

Zum Aufstellen der inneren Iteration des ESNM–Verfahrens, und zum Nachweis der Definitheit von Hess U, werden nun zunächst die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von U benötigt. Hierzu seien μ, $\nu \in \{1, \ldots, n\}$, $\mu \neq \nu$ beliebig aber fest gewählt. Zunächst wird U wie folgt zerlegt:

$$\begin{aligned}
U(x) &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} w_{kl}v_{kl}(x) \\
&= \sum_{k=1}^{n}\Big(w_{k\nu}v_{k\nu}(x) + \sum_{l=1,\,l\neq\nu}^{n} w_{kl}v_{kl}(x)\Big) \\
&= w_{\nu\nu}v_{\nu\nu}(x) \quad + \sum_{l=1,\,l\neq\nu}^{n} w_{\nu l}v_{\nu l}(x) \\
&\qquad + \sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n}\Big(w_{k\nu}v_{k\nu}(x) + \sum_{l=1,\,l\neq\nu}^{n} w_{kl}v_{kl}(x)\Big) \\
&= w_{\nu\nu}v_{\nu\nu}(x) \quad + \sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_{k\nu}(x) \quad + \sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_{k\nu}(x) \\
&\qquad + \sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n}\sum_{l=1,\,l\neq\nu}^{n} w_{lk}v_{lk}(x) \\
&= w_{\nu\nu}v_1(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) \quad + \quad 2\sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_2(x_\nu - x_k) \quad + \quad C
\end{aligned}$$

C steht dabei für die im vorletzten Ausdruck auftretende, von x_ν unabhängige Doppelsumme. Für die partiellen Ableitungen ergibt sich dann:

$$\frac{\partial U}{\partial x_\nu}(x) = w_{\nu\nu}v_1'(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + 2\sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_2'(x_\nu - x_k) \tag{3.9}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu^2}(x) = w_{\nu\nu}v_1''(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + 2\sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_2''(x_\nu - x_k) \tag{3.10}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_\mu \partial x_\nu} = -2w_{\mu\nu}v_2''(x_\nu - x_\mu) \tag{3.11}$$

Offensichtlich ist U dreimal stetig differenzierbar und ≥ 0 für alle $x \in \overline{\mathbf{R}}_+^n$. Es ist also noch zu untersuchen ob U positiv definit ist, und unter welchen Bedingungen die innere Iteration des ESNM–Verfahrens in $\mathbf{R}_+^n$ bleibt. Das Definitheitsproblem wird durch folgenden Satz gelöst.

Satz 3.4.1 *Sei U wie in 3.8 definiert. Außerdem gelte für jedes $\nu = 1, \ldots, n$ $w_{\nu\nu} > 0$ und $v_1'' > 0$, $v_2'' \geq 0$. Dann ist $B(x) := (\mathrm{Hess}\, U)(x)$ in allen $x \in \mathbf{R}_+^n$ positiv definit.*

Beweis: Sei $x \in \mathbf{R}_+^n$ beliebig, aber fest gewählt. Nach 3.9 und 3.11 sind die Komponenten $b_{\mu\nu}$ von $B(x)$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}
b_{\nu\nu} &= w_{\nu\nu}v_1''(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + 2\sum_{k=1,\,k\neq\nu}^{n} w_{k\nu}v_2''(x_\nu - x_k) \\
b_{\nu\mu} &= -2w_{\mu\nu}v_2''(x_\nu - x_\mu)
\end{aligned}$$

Insbesondere gilt also für die Diagonalelemente von $B(x)$

$$b_{\nu\nu} = w_{\nu\nu} v_1''(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) - \sum_{\mu=1,\,\mu\neq\nu}^{n} b_{\mu\nu} \,.$$

Nach den Voraussetzungen des Satzes haben wir $b_{\mu\nu} \leq 0$, also auch $|b_{\mu\nu}| = -b_{\mu\nu}$. Hiermit ergibt sich

$$\sum_{\mu=1,\,\mu\neq\nu}^{n} |b_{\mu\nu}| = - \sum_{\mu=1,\,\mu\neq\nu}^{n} b_{\mu\nu} \,.$$

Benutzt man nun noch $b_{\nu\nu}$, $w_{\nu\nu} v_1''(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) > 0$ so erhält man die folgende Ungleichung:

$$\begin{aligned} |b_{\nu\nu}| = b_{\nu\nu} &= w_{\nu\nu} v_1''(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + \sum_{\mu=1,\,\mu\neq\nu}^{n} |b_{\nu\nu}| \\ &> \sum_{\mu=1,\,\mu\neq\nu}^{n} |b_{\nu\nu}| \end{aligned}$$

Diese Ungleichung besagt aber gerade, daß $B(x)$ stark diagonal dominant ist. Da außerdem alle $b_{\nu\nu}$ positiv sind, muß $B(x)$ nach [20], Lemma 6.4.12, positiv definit sein. x war völlig beliebig gewählt, also folgt die Behauptung des Satzes. $\diamond$

Um die Erhaltung der Positivität in der inneren Iteration zu untersuchen, soll U nun noch genauer spezifiziert werden. Die Matrix W werde durch den folgenden Neunpunktstern [20] definiert:

$$W = \begin{bmatrix} \rho/\sqrt{2} & \rho & \rho/\sqrt{2} \\ \rho & \gamma & \rho \\ \rho/\sqrt{2} & \rho & \rho/\sqrt{2} \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

Hierbei sind ρ und γ nicht negative reelle Zahlen, die man als Iterationsparameter des zugehörigen ESNM–Verfahrens auffassen kann. Nach dem zuvor gesagten stellt γ eine Wichtung für die erlaubte Abweichung von der a priori Information f^{ap} dar, während ρ eine Kontrolle über die Glattheit des Bildes ermöglicht.
Für die Funktionen v_1, v_2 wählen wir:

$$v_1(r) := r^2 \qquad v_2(r) := \ln(\cosh(r)) \tag{3.13}$$

Die Ableitungen dieser Funktionen sind gegeben durch:

$$\begin{array}{ll} v_1'(r) = 2r & v_2'(r) = \tanh(r) \\ v_1''(r) = 2 & v_2''(r) = 1 - \tanh^2(r) \end{array} \tag{3.14}$$

Zur Durchführung der experimentellen Rechnungen in 5.3 wurde das ESNM–Verfahren mit der hier konstruierten Penalty–Funktion implementiert. Die

Wahl dieser Funktion ist dabei im wesentlichen eine Kombination der Ideen aus [40] und [19]. Insbesondere wurde für v_2 nicht die einfachere Funktion r^2 gewählt, da dies in der Praxis zu übermäßig starker Dämpfung von Kontrasten innerhalb des Bildes führte.
Zur Erhaltung einer übersichtlichen Schreibweise sollen nun die folgenden Notationen eingeführt werden. N_ν sei dabei die Menge der Indices, die zu Pixeln gehören welche eine gemeinsame Kante mit Pixel ν haben; M_ν die Menge der Indices die *genau* eine gemeinsame Ecke mit Pixel ν haben. Definiert man die Größen $\Sigma_{1,\nu}$ und $\Sigma_{2,\nu}$ dann durch

$$\begin{aligned}\Sigma_{1,\nu}(x) &:= \sum_{l\in N_\nu} \tanh(x_\nu - x_l) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l\in M_\nu} \tanh(x_\nu - x_l) \\ \Sigma_{2,\nu}(x) &:= \sum_{l\in N_\nu} (1 - \tanh^2(x_\nu - x_l)) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l\in M_\nu} (1 - \tanh^2(x_\nu - x_l)),\end{aligned}$$

so lassen sich die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von U nach x_ν in folgender Form schreiben.

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial x_\nu}(x) &= 2\gamma(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + 2\rho\Sigma_{1,\nu}(x) \\ &= 2(\gamma(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + \rho\Sigma_{1,\nu}(x)) \qquad (3.15) \\ \frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu^2}(x) &= 2\gamma + 2\rho\Sigma_{2,\nu}(x) \\ &= 2(\gamma + \rho\Sigma_{2,\nu}(x)) \qquad (3.16)\end{aligned}$$

Bemerkung:

i. Da tanh nur Werte zwischen $+1$ und -1 annimmt ist $\Sigma_{2,\nu}(x) > 0$ für alle $x \in \mathbf{R}^n$.

ii. Nach Satz 3.4.1 ist Hess U schon dann positiv definit, wenn nur $\gamma > 0$ und $\rho \geq 0$ gilt.

Für die konkrete Implementation wurde zur Vereinfachung $\omega = 1$ gewählt. Natürlich könnte man auch diesen Parameter variabel halten, allerdings ergaben Rechnungen mit ω–Werten ungleich eins im allgemeinen sogar ein schlechteres Konvergenzverhalten des SOR–Newton–Verfahrens. Mit 3.5 ergibt sich somit folgende innere Iteration.
Für $j = 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned}x_j^{\tau+1} &= x_j^\tau \\ &+ \frac{x_j^\tau y_j^\sigma - (x_j^\tau)^2\Big(1 + 2(\gamma(x_j^\tau - f_j^{\mathrm{ap}}) + \rho\Sigma_{1,j}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau))\Big)}{y_j^\sigma + 2(x_j^\tau)^2\Big(\gamma + \rho\Sigma_{2,j}(x_1^{\tau+1}, \ldots, x_{j-1}^{\tau+1}, x_j^\tau, \ldots, x_n^\tau)\Big)}\end{aligned} \qquad (3.17)$$

Es soll nun versucht werden, γ und ρ so zu wählen, daß die Iteration 3.17 die Positivität der berechneten x^τ erhält. Damit der Nenner in dem dort

auftretenden Quotienten von Null verschieden ist, muß sogar $x_j^\tau > 0$ für alle j und τ gelten. Aufgrund der begrenzten Maschinengenauigkeit, kann es in praktischen Rechnungen natürlich vorkommen, daß der Nenner entgegen der weiter unten entwickelten Theorie verschwindet.[5] In diesem Fall folgt aber sofort, daß $y_j^\sigma = 0$ und $x_j^\tau = 0$ gilt, womit dann auch $x_j^{\tau+1} = 0$ sein muß. Sollte also für ein j der Nenner in 3.17 den Wert Null annehmen, so ist es sinnvoll einfach $x_j^{\tau+1} = 0$ zu setzen. Bei dieser Vorgehensweise werden dann Pixel, die den Wert Null haben, durch einen Schritt des ESNM–Verfahrens nicht mehr geändert.
Um Aussagen über die Wahl der Parameter γ und ρ zu gewinnen, nehmen wir im folgenden $f^{\mathrm{ap}} > 0$ an. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da man für Pixel P_j mit $f_j^{\mathrm{ap}} = 0$ einfach $f_j = 0$ setzen kann. Nach dem oben Gesagten sind solche Pixel aber schon endgültig bestimmt, und man kann das Rekonstruktionsproblem somit nur für Pixel P_j mit $f_j^{\mathrm{ap}} \neq 0$ betrachten. Da die zu berechnenden Bilder aus physikalischen Gründen nur positive Dichten haben können, sollten die Pixelwerte in der a priori Information auch alle nicht negativ sein. Eine hinreichende Bedingung zur Erhaltung der Positivität gibt der folgende Satz an.

Satz 3.4.2 *Sei für $j = 1, \ldots, n$ $y_j^\sigma > 0$, $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau} \geq \frac{1}{2}$. Dann ist $x^{\tau+1} > 0$ falls γ und ρ so gewählt werden, daß gilt:*

$$\gamma > \rho \frac{4(1 + \frac{1}{\sqrt{2}})}{\min\limits_{j=1}^{n}\{f_j^{\mathrm{ap}}\}} \tag{3.18}$$

Beweis: Da nach 3.16 offenbar $\frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2} \geq 0$ gilt, ist nach Satz 3.2.1 nur noch $\frac{\partial U}{\partial x_j}(x) - x_j \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x) < 0$, für alle $x \in \mathbf{R}_+^n$ und $j = 1, \ldots, n$, bei der entsprechenden Wahl von γ und ρ zu zeigen.
Zunächst rechnen wir nach, daß die letzte Ungleichung äquivalent zu der folgenden ist.

$$\gamma > \frac{\rho}{f_j^{\mathrm{ap}}}(\Sigma_{1,j}(x) - x_j \Sigma_{2,j}(x)) \tag{3.19}$$

Aufgrund der Annahme $f^{\mathrm{ap}} > 0$ kann 3.19 mit f_j^{ap} multipliziert werden. Hiermit ergibt sich

$$\gamma f_j^{\mathrm{ap}} > \rho(\Sigma_{1,j}(x) - x_j \Sigma_{2,j}(x)).$$

Stellt man diese Ungleichung nun um, und multipliziert sie mit dem Faktor 2 erhält man schließlich:

$$\begin{aligned} 0 &> -2\gamma f_j^{\mathrm{ap}} + 2\rho(\Sigma_{1,j}(x) - x_j \Sigma_{2,j}(x)) \\ &= 2\gamma((x_j - f_j^{\mathrm{ap}}) - x_j) + 2\rho(\Sigma_{1,j}(x) - x_j \Sigma_{2,j}(x)) \end{aligned}$$

[5] Sollten sogar negative Werte auftreten, die dann aber betragsmäßig klein sein müssen, so werden diese ebenfalls als Null interpretiert.

$$\begin{aligned} &= 2(\gamma(x_j - f_j^{\mathrm{ap}}) + \rho\Sigma_{1,j}(x)) - x_j 2(\gamma + \rho\Sigma_{2,j}(x)) \\ &= \frac{\partial U}{\partial x_j}(x) - x_j \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2}(x) \end{aligned}$$

Hiermit ist die Äquivalenz der beiden Ungleichungen gezeigt. Als nächstes ist nun der Ausdruck $\Sigma_{1,j}(x) - x_j\Sigma_{2,j}(x)$ nach oben abzuschätzen.

$$\begin{aligned} &\Sigma_{1,j}(x) - x_j\Sigma_{2,j}(x) \leq \Sigma_{1,j}(x), \quad \text{da } x_j, \Sigma_{2,j}(x) \geq 0 \\ &= \sum_{l\in N_j} \tanh(x_j - x_l) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l\in M_j} \tanh(x_j - x_l) \\ &\leq |N_j| + \frac{1}{\sqrt{2}}|M_j|, \quad |N_j|, |M_j| \text{ Anzahl der Elemente von } N_j \text{ bzw. } M_j \\ &\leq 4 + \frac{1}{\sqrt{2}}4 = 4(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}) \end{aligned}$$

Für jedes $\nu = 1, \ldots, n$ gilt also die Ungleichung:

$$\gamma > \rho \frac{4(1 + \frac{1}{\sqrt{2}})}{\min\limits_{j=1}^{n}\{f_j^{\mathrm{ap}}\}} \geq \frac{\rho}{f_\nu^{\mathrm{ap}}}((\Sigma_{1,\nu}(x) - x_\nu\Sigma_{2,\nu}(x))$$

Nach der zuvor bewiesenen Äquivalenz ist also auch die Ungleichung $\frac{\partial U}{\partial x_j} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_j^2} < 0$ für alle j erfüllt, womit die Behauptung des Satzes folgt. ◇

Leider wird auch in diesem Satz wieder eine Bedingung an den Quotienten $\frac{y_j^\sigma}{x_j^\tau}$ gestellt. Aus Abb. 3.1 ist zu ersehen, daß dieser Quotient im ersten Schritt der inneren Iteration = 1 ist. Auch hier kann man dann aufgrund der vergleichsweise langsamen Konvergenz, für die EM–Verfahren bekannt sind, auf die Richtigkeit der Voraussetzung des Satzes hoffen. In den entsprechenden Rechnungen in Paragraph 5.3 war der betrachtete Quotient jedenfalls immer *deutlich* größer als $\frac{1}{2}$.
Des weiteren gibt dieser Satz nur eine hinreichende Bedingung zur Erhaltung der Positivität an. In der Praxis kann man diese Bedingung durchaus nicht einhalten, und sogar bessere Approximationen als bei Erfüllung der Ungleichung bekommen. Im wesentlichen sollte auch nur aufgezeigt werden, daß man beim Auftreten negativer x_j^τ entweder γ größer, oder ρ kleiner zu wählen hat, um wieder zu einem, die Positivität erhaltenden Algorithmus zu gelangen.
Zum Abschluß dieses Paragraphen soll noch die Abhängigkeit der Konvergenzgeschwindigkeit, der inneren Iteration, von den Parametern γ und ρ betrachtet werden. Nach Satz 3.3.4 ist die Konvergenzgeschwindigkeit dieser Iteration abhängig vom Spektralradius der SOR–Matrix $H_\omega(x)$ im Punkt x^*. Sei also $H_1(x) = (D(x) - L(x))^{-1}L^{\mathrm{t}}(x)$ die SOR–Matrix für $\omega = 1$. Nach 2.5 und 2.6 sind die Komponenten $b_{\mu\nu}(x)$ von $B(x) := (\mathrm{Hess}\,\tilde{b})(x)$ gegeben

durch:

$$\begin{aligned}
b_{\nu\nu}(x) &= -\frac{y_\nu^\sigma}{x_\nu^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_\nu^2}(x) \\
&= -\frac{y_\nu^\sigma}{x_\nu^2} - 2(\gamma + \rho\Sigma_{2,\nu}(x)) \\
b_{\mu\nu}(x) &= \frac{\partial}{\partial x_\mu}(-1 + -\frac{y_\nu^\sigma}{x_n u^2} - \frac{\partial U}{\partial x_\nu}(x)) \\
&= -\frac{\partial^2 U}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \\
&= -\frac{\partial}{\partial x_\mu}(2\gamma(x_\nu - f_\nu^{\mathrm{ap}}) + \rho\Sigma_{1,\nu}(x)) \\
&= -\rho\frac{\partial}{\partial x_\mu}\sum_{k=1}^{n} w_{k\nu}\tanh(x_\nu - x_k) \\
&= \rho w_{\mu\nu}(1 - \tanh^2(x_\nu - x_\mu))
\end{aligned}$$

Sei $\lambda(x^*)$ betragsmaximaler Eigenwert von $H_1(x^*)$, $z(x^*)$ Eigenvektor zu $\lambda(x^*)$, wobei x^* die nach dem Beweis von Satz 3.3.4 existierende, eindeutig bestimmte Nullstelle von $\nabla\tilde{b}$ ist. Zunächst haben wir die Gleichung

$$Hz = (D - L)^{-1}L^{\mathrm{t}} = \lambda z,$$

wobei das Argument x^* zur besseren Übersicht unterschlagen worden ist. Hieraus ergibt sich durch Linksmultiplikation mit $(D - L)^{-1}$

$$L^{\mathrm{t}}z = \lambda(D - L)z.$$

In dieser Gleichung wird nun auf beiden Seiten das Skalarprodukt mit z gebildet, so daß man

$$\langle L^{\mathrm{t}}z, z\rangle = \lambda(\langle Dz, z\rangle - \langle Lz, z\rangle)$$

erhält. Durch den Übergang zum Betrag folgt dann mit einer einfachen Umstellung:

$$\begin{aligned}
|\lambda| &= \frac{|\langle Lz, z\rangle|}{|\langle Dz, z\rangle - \langle Lz, z\rangle|} \\
&\leq \frac{|\langle Lz, z\rangle|}{||\langle Dz, z\rangle| - |\langle Lz, z\rangle||}
\end{aligned}$$

Betrachten wir nun die beiden Skalarprodukte, die in diesem Ausdruck vorkommen, wobei $y_j^\sigma \geq 0$, $x_j^\tau > 0$ vorausgesetzt sei.

$$\begin{aligned}
|\langle Dz, z\rangle| &= |\sum_{j=1}^{n} D_{jj}z_j^2| \\
&= |\sum_{j=1}^{n}\left(-\frac{y_j^\sigma}{(x_j^*)^2} - 2(\gamma + \rho\Sigma_{2,j})\right)z_j^2 \\
&= \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{y_j^\sigma}{(x_j^*)^2} + 2(\gamma + \rho\Sigma_{2,j})\right)z_j^2
\end{aligned}$$

ρ	γ	Anz. Iterationen
10^{-4}	10^{-4}	7
	10^{-3}	5
	10^{-2}	4
	10^{-1}	3
10^{-3}	10^{-4}	keine Konvergenz
	10^{-3}	11
	10^{-2}	5
	10^{-1}	4
	1	3

Tabelle 3.1: Abhängigkeit der Konvergenzgeschwindigkeit der inneren Iteration von den Parametern γ und ρ.

Ist ρ fest, so strebt der obige Term gegen unendlich, falls γ gegen unendlich strebt. Wählt man hingegen γ fest, und läßt ρ gegen Null gehen, so strebt dieser Ausdruck gegen den positiven Wert $\sum_{j=1}^{n}(\frac{y_j^\sigma}{x_j^2}+2\gamma)z_j^2$. Für das andere Skalarprodukt ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\langle Lz,z\rangle| &= \left|\sum_{j=1}^{n}(Lz)_j z_j\right| \\ &= |\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{j-1} L_{jk}z_k z_j| \\ &= \rho\left|\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{j-1} w_{jk}(1-\tanh^2(x_k^*-x_j^*))z_k z_j\right| \end{aligned}$$

Ist γ fest, so geht dieses Skalarprodukt also gegen Null, falls ρ gegen Null strebt. Aus diesen Betrachtungen folgt nun:

$$|\lambda| \to 0 \text{ für } \rho \to 0 \text{ oder } \gamma \to \infty$$

Die Konvergenzgeschwindigkeit in der inneren Iteration läßt sich daher verbessern, indem man γ vergrößert oder ρ verkleinert. Dieses Verhalten ist sehr erfreulich, da man zur Erhaltung der Positivität ebenso verfahren muß. Beispiele für die Abhängigkeit der Konvergenz von γ und ρ sind in Tabelle 3.1 zu sehen.
Hier ist angegeben, wie lange die innere Iteration im 1. Schritt des ESNM–Verfahrens benötigt, bis der Konvergenztest $\|x^{\tau+1}-x^\tau\|_\infty < 10^{-3}$ erfüllt ist. Daß einmal keine Konvergenz auftrat kann man damit erklären, daß λ beliebig nahe an eins herankommen kann. Aufgrund nicht zu vermeidender Rundungsfehler tritt dann für $|\lambda|$–Werte, die zu dicht bei eins liegen keine Konvergenz mehr ein.

3.5 Das direkte SOR–Newton–Verfahren

Ist die Funktion U streng konvex, so ist die Funktion

$$b(f) := l(f) - U(f)$$

nach Satz 2.1.1 streng konkav. Dies bedeutet aber gerade, daß eine Nullstelle f^* von ∇b ein absolutes Maximum der Funktion b ist. Zur Berechnung einer solchen Nullstelle kann man natürlich das in Paragraph 3.1 vorgestellte SOR–Newton–Verfahren direkt auf die Gleichung $\nabla b(f) = 0$ anwenden. Dieses Verfahren, das im folgenden als direktes SOR–Newton–Verfahren bezeichnet wird, soll hier etwas genauer betrachtet werden.
Zur Aufstellung des SOR-Newton Verfahrens für $\nabla b(f) = 0$ werden die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von b benötigt. Nach 2.1, 2.2 gilt für die ersten beiden Ableitungen von $l(f)$ nach f_ν, $\nu \in 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial l}{\partial f_\nu} &= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{g_i a_{i\nu}}{\sum_{j=1}^{n} a_{ij} f_j} \right) - 1 \\ \frac{\partial^2 l}{\partial f_\nu^2} &= -\sum_{i=1}^{m} g_i a_{i\nu}^2 \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} f_j \right)^{-2} \end{aligned}$$

Ist f^σ eine gegebene Approximation für f^*, so sieht ein Schritt des direkten SOR–Newton–Verfahrens also folgendermaßen aus.

Für $j = 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned} \tilde{f} &:= (f_1^{\sigma+1}, \ldots, f_{j-1}^{\sigma+1}, f_j^\sigma, \ldots, f_n^\sigma) \\ \xi_i &:= \sum_{l=1}^{n} a_{il} \tilde{f}_l, \quad i = 1, \ldots, m \\ f_j^{\sigma+1} &:= \tilde{f}_j + \frac{\sum_{i=1}^{m} \frac{a_{ij} g_i}{\xi_i} - (1 + \frac{\partial U}{\partial f_j}(\tilde{f}))}{\sum_{i=1}^{m} \frac{a_{ij}^2 g_i}{\xi_i^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial f_j^2}(\tilde{f})} \end{aligned}$$

Da sich in der j–Schleife bei jedem Durchlauf nur eine Komponente des Vektors $\tilde{f}$ verändert, läßt sich die Berechnung der ξ_i noch effizienter gestalten. Hierzu berechnet man zunächst den Vektor $\xi := Af^\sigma$ vor. In der j–Schleife braucht dann, nach der Berechnung von $f_j^{\sigma+1}$, nur noch für jedes $i = 1, \ldots, n$ die Korrektur $a_{ij}(f_j^{\sigma+1} - f_j^\sigma)$ zu jedem ξ_i addiert zu werden.
Betrachten wir nun den Rechenaufwand, der für einen Schritt dieses Verfahrens benötigt wird, wobei vorausgesetzt sei, daß die Produkte $a_{ij} g_i$ und $a_{ij}^2 g_i$ schon vorberechnet sind. Zunächst werden für die Berechnung des Vektors ξ $m\sqrt{n}$ Operationen benötigt. In der j–Schleife erfordert die Berechnung der beiden Summen $2p$ Operationen, wenn man animmt, daß ein Pixel nur von einem Strahl jeder Richtung getroffen wird. Zur Berechnung der Ableitungen von U werden c Operationen benötigt, wobei wie in Paragraph 3.2 vorausgesetzt wird, daß c unabhängig von n ist. Die Korrektur des

Vektors ξ erfordert dann nochmals p Operationen. Insgesamt braucht man zur Durchführung eines Schritts des direkten SOR–Newton–Verfahrens also $m\sqrt{n} + 2pn + cn + pn = m\sqrt{n} + 3pn + cn$ Operationen. Verwendet man die Standard Geometrie 1.6, so bedeutet dies einen Aufwand von $\frac{16}{9}p^3 + \frac{6+4c}{9}p^2$. Nach Kapitel 3.2 braucht man zur Durchführung eines ESNM–Schritts $\frac{8}{9}p^3 + \frac{20+4cT}{9}p^2$ Operationen. Wird T nicht zu groß, so ist der Aufwand für einen Schritt des ESNM–Verfahrens also kleiner als der Aufwand für einen Schritt des direkten SOR–Newton–Verfahrens.
Sofern die Funktion b streng konkav ist, streben beide Verfahren im Fall der Konvergenz, gegen das eindeutig bestimmte Maximum von b. Bis zum Erreichen dieses Maximums werden aber sehr viel mehr Iterationen benötigt, als in praktischen Anwendungen durchführbar sind (eventuell mehrere tausend Iterationen). Aus diesem Grund sind die Eigenschaften der ersten Iterationen für die Anwendbarkeit der Verfahren sehr wichtig.
Da sich in Paragraph 5.3 herausstellen wird, daß die Rekonstruktionen der ersten Iterationen, die das direkte SOR-Newton–Verfahren im Fall gestörter Daten liefert, praktisch wertlos sind, ist es vorteilhaft die kompliziertere, verschachtelte Iteration des ESNM-Verfahrens zu benutzen.

Kapitel 4

Literaturüberblick

In diesem Kapitel soll ein Überblick über die in der Literatur vorgeschlagenen iterativen Verfahren zur Emissionstomographie gegeben werden, wobei aufgrund der Vielzahl der Publikationen kein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben werden kann.
In Paragraph 4.1 werden wir uns zunächst mit verschiedenen Modifikationen des EM–Verfahrens beschäftigen. Das EM–Verfahren zählt zu den sogenannten multiplikativen Verfahren. Einige weitere zu dieser Gruppe gehörige Verfahren werden in 4.2 vorgestellt. In Paragraph 4.3 folgt dann schließlich ein Überblick über weitere Iterationsverfahren, die für die Computertomographie genutzt werden können.
Bei der Darstellung der verschiedenen Verfahren soll auf technische Details, die in den entsprechenden Originalarbeiten behandelt werden, verzichtet werden. So benutzen einige Autoren nicht gemäß 1.4 normalisierte Systemmatrizen oder verwenden Polarkoordinatengitter zur Diskretisierung des Rekonstruktionsgebiets. Oftmals werden auch verschiedene Methoden zur Berechnung von A vorgeschlagen. Hier sollen die verschiedenen Verfahren jedoch immer als Algorithmen zur Lösung des linearen Gleichungssystems $Af = g$ mit normalisierter Matrix A betrachtet werden. Durch dieses Vorgehen sind die Verfahren und die Ergebnisse die sie liefern sehr gut miteinander vergleichbar. Spezielle technische Details, die auch oftmals bestimmte Eigenschaften der verwendeten Scanner berücksichtigen, können schließlich durch die Systemmatrix A berücksichtigt, und so für jedes der vorgestellten Verfahren benutzt werden.

4.1 Modifikationen des EM–Verfahrens

In der Literatur wurden mittlerweile diverse Modifikationen des einfachen EM–Verfahrens vorgeschlagen. In mehreren Ansätzen wird anstelle der Likelihood–Funktion die a posteriori Wahrscheinlichkeit maximiert. Die verschiedenen Ansätze unterscheiden sich dabei im wesentlichen in der Wahl der a priori Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_A(f)$. Wie wir in 2.2 gesehen haben, ist die Maximierung der a posteriori Wahrscheinlichkeit äquivalent zur Ma-

ximierung der Log–Likelihood–Funktion $l(f)$ minus einer Penalty–Funktion $U(f)$.
In [40] schlagen Levitan und Herman

$$U(f) = \frac{\gamma}{2}(f - f^{\mathrm{ap}})^{\mathrm{t}} W (f - f^{\mathrm{ap}})$$

als Penalty–Funktion vor. f^{ap} ist hierbei wieder ein a priori Bild für f, γ eine nicht negative reelle Zahl und $W = (w_{kl})$ eine positiv definite Matrix. Für die partiellen Ableitungen von U ergibt sich:

$$\frac{\partial U}{\partial f_j}(f) = -\gamma \sum_{l=1}^{n} w_{jl}(f_l - f_l^{\mathrm{ap}}) \qquad j = 1, \ldots, n$$

Im M-Schritt hätte man so ein System von quadratischen Gleichungen zu Lösen. In [40] wird der entsprechende MAP–EM–Algorithmus nur für den Fall hergeleitet, daß W eine Diagonalmatrix ist. Hierdurch erhält man nach 2.17 und 2.5 ein System von entkoppelten quadratischen Gleichungen:

$$-1 + \frac{1}{f_j}\mathrm{EM}_j(f^{\sigma}) - \gamma w_{jj}(f_j - f_j^{\mathrm{ap}}) = 0 \qquad j = 1, \ldots, n$$

f^{σ} ist hier, wie auch im folgenden, die aktuelle Approximation. Dieses Gleichungssystem wird gelöst durch:

$$f_j^{\sigma+1} = \gamma w_{jj} f_j^{\mathrm{ap}} - 1 + \frac{\sqrt{(\gamma w_{jj} f_j^{\mathrm{ap}} - 1)^2 + 4\gamma w_{jj}\mathrm{EM}_j(f^{\sigma})}}{2\gamma w_{jj}} \qquad j = 1, \ldots, n$$

Die letzte Gleichung beschreibt gerade einen Schritt des in [40] vorgeschlagenen MAP–EM–Algorithmus. In der dortigen Implementation wurde W als Einheitsmatrix gewählt. Für f^{ap} wurde das Bild einer stark geglätteten gefilterten Rückprojektion benutzt, in der alle negativen Pixelwerte durch Null ersetzt wurden. Diese Art der Implementation wird auch in Paragraph 5.2 benutzt und ist dort einfach als MAP–Verfahren bezeichnet worden. Es sei explizit darauf hingewiesen, daß hier mit MAP genau der gerade beschriebene Algorithmus, mit MAP–EM hingegen ein allgemeines Verfahren zur Maximierung von a posteriori Wahrscheinlichkeiten gemeint ist. In [40] wird außerdem noch erläutert, wie man durch Einführen eines Lagrangen Multiplikators einen die Countrate erhaltenden Algorithmus herleiten kann.
Eine neuere Variante des oben vorgestellten Verfahrens wird in [25] beschrieben. Zur Beschreibung dieser Variante definieren wir N als die Menge der Indices, die zu nicht auf dem Rand des Rekonstruktionsgebiets liegenden Pixeln gehören. Für $j = 1, \ldots, n$ sei N_j die Menge der Indices, die zu Nachbarpixeln von P_j gehören. W soll dann so gewählt werden, daß

$$f^{\mathrm{t}} W f = \sum_{j \in N} \left(f_j - \frac{1}{8} \sum_{k \in N_j} f_k \right)^2 \tag{4.1}$$

gilt. Natürlich erhält man auch in diesem Fall im M–Schritt ein System von quadratischen Gleichungen. Es läßt sich aber zeigen, daß für eine Matrix W mit der Eigenschaft 4.1 $w_{kl} = 0$ ist, falls das Pixel P_l nicht in der 5×5 Nachbarschaft von P_k liegt.
Bei dem in [25] vorgeschlagenen Algorithmus wird in einem Iterationsschritt nur jedes neunte Pixel geändert (eins in jeder dritten Zeile und eins in jeder dritten Spalte), während die anderen als konstant angesehen werden. Hierdurch kommt man wieder zu einem System von entkoppelten quadratischen Gleichungen, daß direkt gelöst werden kann. Durch Variation der Teilmenge der zu ändernden Pixel kann dann innerhalb von neun Iterationen jedes Pixel genau einmal bearbeitet werden. Da das up-dating der einzelnen Pixel unabhängig voneinander geschehen kann, eignet sich dieser Algorithmus sehr gut für parallele Verarbeitung.
Green [19] schlägt vor, die Penalty–Funktion

$$U(f) = \rho \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} w_{kl} v(f_l - f_k) \tag{4.2}$$

zu benutzen, wobei die Matrix (w_{kl}) durch den Neunpunktstern

$$\begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1 & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & 1 & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

und v durch

$$v(r) := \ln(\cosh(r))$$

definiert ist. Anstelle des Systems $\nabla \tilde{b} = 0$ wird hier im Maximierungsschritt das einfachere System

$$\nabla \tilde{l} - \nabla U(f^\sigma) = 0$$

gelöst. Der entstehende Algorithmus wird als OSL–Verfahren (OSL = one step late) bezeichnet. Nach 2.5 ergibt sich als Iterationsvorschrift für einen Schritt des OSL–Verfahrens:

$$f_j^{\sigma+1} = \frac{\mathrm{EM}_j(f^\sigma)}{1 + \frac{\partial U}{\partial f_j}(f^\sigma)} \qquad j = 1, \ldots, n$$

Die partiellen Ableitungen von U erhält man natürlich als Spezialfall von 3.9 wenn $\gamma = 0$ gesetzt wird.
Auch in [19] wird bereits vorgeschlagen, zur Lösung des im M-Schritt auftretenden nichtlinearen Gleichungssystems ein iteratives Verfahren einzusetzen, wobei die Wahl auf eine einfache Fixpunktiteration fällt. Dieser Ansatz wird jedoch nicht weiter verfolgt, da es nach Auffassung des Autors sinnvoller ist, anstelle der inneren Iteration lieber einen weiteren OSL-Schritt durchzuführen.

Eine Weiterführung der Arbeiten von Green ist in [33] zu finden. Hier wird ein Konvergenzbeweis für ein modifiziertes OSL–Verfahren unter einer bestimmten Menge hinreichender Bedingungen angegeben. Ein Großteil der angegebenen Bedingungen betrifft dabei die Wahl der Funktion v. Insbesondere erfüllt die Funktion $v(r) = \ln(\cosh(r))$ alle dort angegebenen Voraussetzungen.
Herbert und Leahy [22] verwenden ebenfalls eine Penalty–Funktion der Form 4.2, wobei in deren Notation ρ durch $1/\beta$ zu ersetzen ist. Die w_{kl} sind hier entweder null oder eins und definieren so ein vorgegebenes Nachbarschaftssystem. Für $v(r)$ werden die Funktionen

$$\begin{aligned} v_1(r) &:= r^2 \\ v_2(r) &:= \frac{r^2}{\delta^2 + r^2} \\ v_3(r) &:= \ln(1 + \left(\frac{r}{\mu}\right)^2 \end{aligned}$$

vorgeschlagen, wobei δ und μ wählbare Parameter sind. Herbert und Leahy benutzen anstelle eines MAP–EM–Algorithmus einen MAP–GEM–Algorithmus (s. S. 36). Zur Bestimmung eines entsprechendes $f^{\sigma+1}$ wird hier ein Koordinaten–Anstiegs–Algorithmus [46] im Maximierungsschritt benutzt.
Lange et. al. [34] schlagen als a priori Verteilung für f eine Gamma–Verteilung [15] vor. Als Penalty–Funktion ergibt sich so

$$U(f) := \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\alpha_j f_j}{\beta_j} - (\alpha_j - 1) \ln f_j \right) .$$

Hierbei ist β_j der Mittelwert der Gammaverteilung der zu Pixel P_j gehörigen Zufallsvariable, β_j^2/α_j deren Varianz und $\alpha_j^{-\frac{1}{2}}$ deren Variationskoeffizient. In [34] wird $\alpha_j > 1$ vorausgesetzt. Mit dieser Wahl von U hat man im Maximierungsschritt eines MAP–EM–Verfahrens das Gleichungssystem

$$-1 + \frac{\alpha_j - 1}{f_j} - \frac{\alpha_j}{\beta_j} + \frac{1}{f_j} \sum_{i=1}^{m} N_{ij}^{\sigma} \qquad j = 1, \ldots, n$$

zu lösen. Dies ist ein lineares System in $1_n/f$. Durch explizites Auflösen dieses Systems ergibt sich als Iterationsschritt für den zugehörigen MAP–EM–Algorithmus:

$$f_j^{\sigma+1} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha_j}{\beta_j}} \left(\alpha_j - 1 + \sum_{i=1}^{m} N_{ij}^{\sigma} \right) \qquad j = 1, \ldots, n$$

Wie sich leicht nachrechnen läßt, kann diese Iteration auch in die Form

$$f^{\sigma+1} = f^{\sigma} + \nu(f^{\sigma})$$

mit

$$\nu(f^{\sigma}) := D(f^{\sigma}) \nabla b(f^{\sigma})$$

gebracht werden, wobei $D(f)$ eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen

$$d_{jj}(f) := \frac{f}{1 + \frac{\alpha_j}{\beta_j}}$$

ist. Die Idee bei dem von den Autoren vorgeschlagenen EM–Search[1]–Algorithmus ist nun ein $\bar{t} \geq 0$ so zu bestimmen, daß

$$f^{\sigma+1} := f^{\sigma} + \bar{t}\nu(f^{\sigma})$$

$b(f)$ auf dem Liniensegment $\{f^{\sigma} + t\nu(f^{\sigma}) : t \geq 0\}$ maximiert. Durch dieses Vorgehen wird eine Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit gegenüber dem einfachen EM–Verfahren erreicht. Zur Bestimmung von $\bar{t}$ wird die Verwendung einer Newton–Raphson-Suche vorgeschlagen. Außerdem ist in [34] noch ein theoretischer Abschnitt zu finden, in dem die Konvergenz der dort vorgestellten Verfahren gegen das eindeutig bestimmte Maximum von b bewiesen wird.
Rajeevan et all. [53] benutzen den EM–Search Algorithmus mit Vektorextrapolation, um so eine zusätzliche Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit zu erreichen.
Nunez und Llacer [50] schlagen vor, die Entropie als Prior zu benutzen . Als Penalty–Funktion ergibt sich hierbei

$$U(f) = -\sum_{i=1}^{n} f_j \log f_j - \mu \left(\sum_{j=1}^{n} f_j - \sum_{i=1}^{m} g_i \right) ,$$

wobei μ ein Lagrangscher Multiplikator ist, der zur Erhaltung der Countrate eingeführt wird. Im Gegensatz zum hier benutzten Modell verwenden die Autoren das Prinzip kleinstmöglicher Energiesprünge im Objekt, die hier mit $\triangle f$ bezeichnet werden sollen. In diesem Modell sind dann alle f_j durch den Ausdruck $f_j/\triangle f_j$ zu ersetzen. Anstelle eines EM–Verfahrens benutzen die Autoren eine Fixpunktiteration zur Lösung von $\nabla b(f) = 0$, um ein Maximum von $b(f)$ zu bestimmen. Ein Iterationsschritt des so entstehenden FMAPE–Verfahrens (FMAPE = fast maximum a priori with entropy) ist dann gegeben durch:

$$f_j^{\sigma+1} = K_{\sigma} f_j^{\sigma} \left(\triangle f \sum_{i=1}^{m} a_{ij} \left(\frac{g_i}{(Af)_i} - 1 \right) - \log(f_j^{\sigma}) + C \right)^{\omega} \qquad j = 1, \ldots, n$$

In diesem Ausdruck ist K_{σ} ein Faktor, der in jedem Iterationsschritt so berechnet wird, daß die Countrate erhalten bleibt, C eine Konstante, die die Positivität der berechneten f_j^{σ} sicherstellen soll und $1 \leq \omega \leq 3$ ein Parameter, der Einfluß auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahrens hat. Der

[1] In [34] wird dieses Verfahren mit EMS abgekürzt. Zur Unterscheidung des später erläuterten EM–Smooth Verfahren, das hier mit EMS abgekürzt wird, wurde die Bezeichnung EM–Search gewählt

angegebene Wertebereich für ω ist dabei von den Autoren experimentell ermittelt worden. $\triangle f$ kann ebenfalls als Iterationsparameter aufgefaßt werden und hat Einfluß auf das Aussehen der berechneten Rekonstruktion.
Einen anderen Weg zur Unterdrückung des Schachbretteffekts (s. S. 24) gehen Silverman et. all [63]. Hier wird einfach nach jedem EM–Schritt noch ein Glättungsschritt durchgeführt. Neben einigen nichtlinearen Glättungen, mit denen nach Angabe der Autoren keine befriedigenden Ergebnisse zustande kamen, wird hauptsächlich die Glättung mit einer Matrix S, welche durch einen Neunpunktstern der Form

$$\begin{bmatrix} W^{-1} & W^{-1} & W^{-1} \\ W^{-1} & 1 & W^{-1} \\ W^{-1} & W^{-1} & W^{-1} \end{bmatrix}$$

gegeben ist betrachtet. W ist hierbei ein wählbarer Parameter, der die Glattheit der Rekonstruktion beeinflußt. Ein Iterationsschritt des EMS–Verfahrensist somit durch

$$f^{\sigma+1} = S\mathrm{EM}(\mathrm{f}^{\sigma})$$

gegeben. Des weiteren wird in [63] noch ein modifiziertes EMS–Verfahren eingeführt und gezeigt, daß sich dieses als Verfahren zur Maximierung einer Likelihood–Funktion mit Strafterm auffassen läßt. Zwischen dem EMS–Verfahren und seiner modifizierten Form werden dann Beziehungen hergeleitet, mit denen eine ähnliche Wirkungsweise beider Verfahren begründet wird.
Snyder und Miller [64] schlagen die Benutzung von Sieben zur Verbesserung der rekonstruierten Bilder vor. Ein Sieb ist hierbei ein Unterraum S des $\mathbf{R}_+^n$, dessen Größe mit der Abtastdistanz wächst. Zu Lösen ist schließlich das Problem:

$$\text{Maximiere } l(f) \text{ unter } f \in S$$

Tanaka [67] benutzt in seinem FIR–Verfahren (FIR = filtered iterative reconstruction) zusätzliche Faltungen von g und Af mit einem Tiefpaßfilter h um die Korrektur hochfrequenter Komponenten zu verbessern und so zu einer Konvergenzbeschleunigung des EM–Verfahrens zu gelangen. In [68] wird gezeigt, wie man durch Benutzung einer Dämpfungsmatrix die Bildqualität von FIR– und EM–Rekonstruktionen verbessern kann.
Eine Mehrgitter–Variante des EM–Verfahrens wurde in [54] angegeben. Außerdem sei noch darauf hingewiesen, daß verschiedene Stop-Regeln [10], [44] für den einfachen EM–Algorithmus vorgeschlagen wurden. ([10] bezieht sich nicht auf den EM–Algorithmus, ist aber so allgemein gehalten, daß auch die Anwendung hierauf möglich ist.) Weitere kommentierte Literaturangaben im Zusammenhang mit dem EM–Verfahren sind in [57] zu finden.

4.2 Multiplikative Verfahren

Ein guter Überblick über multiplikative Verfahren, die für den Einsatz in der Computertomographie geeignet sind, ist von De Pierro [8] gegeben worden. Wir werden uns in diesem Paragraphen daher auf die wesentlichen Algorithmen beschränken.
Bei einer multiplikativen iterativen Methode erfolgt die Korrektur der sukzessiven Approximationen gemäß einer Formel der Art

$$f_j^{\sigma+1} = c_j^\sigma f_j^\sigma \quad j = 1, \ldots, n,$$

wobei die c_j^σ positive reelle Zahlen sind, oder $f_j^{\sigma+1}$ ist das Resultat der Lösung einer Gleichung mit positiven Lösungen. Nichtnegatvitätsbedingungen sind bei der Benutzung von multiplikativen Iterationsverfahren somit automatisch erfüllt.
Das einfache EM–Verfahren ist natürlich auch ein multiplikatives Iterationsverfahren, wobei die Korrekturfaktoren c_j^σ durch

$$c_j^\sigma = \sum_{i=1}^{m} \frac{a_{ij} g_i}{(Af)_i}$$

gegeben sind.
Das von Schmidlin [59], [58] vorgeschlagene OGMA–Verfahren (OGMA = Optimized Geometric Mean Algorithmus) läßt sich auch als eine Variante des EM–Verfahrens auffassen. Hierzu betrachten wir zunächst nochmal die Matrixdarstellung des EM–Verfahrens:

$$f^{\sigma+1} = \mathrm{diag}(f^\sigma) A^{\mathrm{t}} \left(\frac{g}{Af^\sigma} \right)$$

Af^σ kann man als Datenvektor für die durch f^σ gegebene Radioaktivitätsverteilung auffassen. Der Quotient $g/(Af^\sigma)$ stellt somit einen multiplikativen Fehler zwischen den gemessenen Daten g und den „approximierten Daten“ Af^σ dar. Dieser Fehler wird nun durch Anwendung von A^{t} auf die Bildebene zurückprojeziert und der Vektor f^σ entsprechend korregiert.
Die Anwendung von A^{t} ist nichts anderes als die Bildung gewichteter arithmetischer Mittel. Die wesentliche Idee beim OGMA–Verfahren ist nun, anstelle des arithmetischen Mittels ein geometrisches Mittel zu bilden. Somit ergibt sich die Iterationsvorschrift:

$$f_j^{\sigma+1} = f_j^\sigma \prod_{i=1}^{m} \left(\frac{g_i}{Af^\sigma} \right)_i^{\omega_\sigma a_{ij}}$$

ω_σ ist hierbei ein Parameter, der zur Beschleunigung der Konvergenzgeschwindigkeit eingeführt wird.
Eine weitere Variante des EM–Verfahrens ergibt sich, wenn man zur multiplikativen Korrektur von f^σ anstelle des rückprojezierten Fehlers g/Af^σ den

Quotienten der rückprojezierten gemessenen Daten und der rückprojezierten genäherten Daten benutzt. Bei dieser Vorgehensweise gelangt man zu dem von Daube–Whiterspoon und Muehllehner [6] vorgeschlagenen ISRA–Verfahren (ISRA = iterative space reconstruction algorithm):

$$f^{\sigma+1} = \mathrm{diag}(f^\sigma)\frac{A^t g}{A^t A f^\sigma}$$

Dieses Verfahren konvergiert gegen eine Lösung von:

$$\text{Minimiere } \|Af - g\|^2 \text{ unter } f \geq 0$$

Konvergenzbeweise hierzu sind in [7] und [9] zu finden.
Das von Gordon et all. [18] vorgeschlagenen MART–Verfahren, war das erste multiplikative Verfahren, das in der Bildrekonstruktion eingesetzt wurde. Ist ein Startwert $f^0 > 0$ gegeben, so iteriert man hier gemäß

$$f_j^{\sigma+1} = f_j^\sigma \left(\frac{g_{i_\sigma}}{a_{i_\sigma}^t f^\sigma}\right)^{a_{i_\sigma j}} \qquad j = 1, \ldots, n.$$

a_i, $i = 1, \ldots, m$ sind hierbei die Zeilen von A und die Folge (i_σ) soll fast zyklisch für die Menge $\{1, \ldots, n\}$ sein. Eine Folge (i_σ) heißt dabei fast zyklisch für $\{1, \ldots, n\}$, wenn es eine Konstante C gibt, so daß gilt:

$$\{1, \ldots, n\} \subset \{i_\sigma + 1, \ldots, i_\sigma + C\} \text{ für alle } \sigma = 1, 2, \ldots$$

Dieses Verfahren konvergiert unter den Voraussetzungen $0 \leq a_{ij} \leq 1$ und $g > 0$ gegen eine Lösung des Problems:

$$\text{Maximiere } \mathrm{ent}(f) := -\sum_{j=1}^{n} f_j \log f_j \text{ unter } g - \epsilon \leq Af \leq g + \epsilon,\ f \geq 0$$

$\mathrm{ent}(f)$ ist hierbei die Entropie nach Shannon [39] und $\epsilon > 0$ ein Fehlervektor. Ein Konvergenzbeweis für dieses Verfahren ist in [38] zu finden. Insbesondere kann man MART als multiplikative Variante des ART–Verfahrens (s. S. 55) auffassen (MART = multiplicative ART).
Da beim MART–Algorithmus immer nur eine Gleichung nach der anderen bearbeitet werden kann, ist er nicht parallelisierbar. Eine Block–Version dieses Verfahrens, die sich für parallele Verarbeitung eignet, wurde in [3] vorgeschlagen. Hierzu zerlegt man die Indexmenge $\{1, \ldots, n\}$ zunächst in Blöcke $I_t = \{n_{t-1} + 1, \ldots, n_t\}$, $t = 1, \ldots, r$, $0 = n_0 < n_1 < \ldots < n_{r-1} < n_r = n$. Die Iterationsvorschrift für das Parallele MART–Verfahren lautet dann,

$$f_j^{\sigma+1} = f_j^\sigma \prod_{i \in I_\sigma} \left(\frac{a_i}{a_i^t f^\sigma}\right)^{\omega_i a_{ij}} \quad \text{für } j = 1, \ldots, n,$$

wobei die ω_i positive reelle Zahlen mit $\sum_{i \in I_t} \omega_i = 1$ sind und die Folge t_σ fast zyklisch für $\{1, \ldots, r\}$ sein soll. Wählt man nur einen Block $I_1 = \{1, \ldots, n\}$, so stimmt dieses Verfahren bis auf die Wahl der ω_i mit dem OGMA–Verfahren überein.

4.3 Sonstige Verfahren

In diesem Paragraphen sollen noch einige Verfahren betrachtet werden, die weder Modifikationen des EM–Verfahrens, noch multiplikative Verfahren sind. Die Überschrift „Sonstige Verfahren" hat hier aber *nicht* zu bedeuten, daß es sich dabei um sehr ausgefallene Verfahren handelt.
Das ART–Verfahren (ART = algebraic reconstruction technique) dürfte wohl das bekannteste Iterationsverfahren der Computertomographie sein. Sind a_i die Spalten von A, so ist ein Schritt der ART–Iteration gegeben durch:

$$\begin{aligned} x^0 &= f^\sigma \\ x^i &= x^{i-1} + \frac{\omega}{|a_i|^2}(g_i - a_i^{\mathrm{t}} x^{i-1}) a_i \text{ für } i = 1, \ldots, n \\ f^{\sigma+1} &= x^m \end{aligned} \tag{4.3}$$

Zur Formulierung von Konvergenzaussagen für das ART–Verfahren zerlegen wir die Matrix AA^{t} gemäß

$$AA^{\mathrm{t}} = D + L + L^{\mathrm{t}}$$

in eine Diagonalmatrix D und eine strikt untere linke Dreiecksmatrix L. Außerdem sei f_ω die eindeutige Lösung von:

$$A^{\mathrm{t}}(D + \omega L)^{-1}(g - Af_\omega) = 0, \qquad f_\omega \in \mathrm{range}(A^{\mathrm{t}})$$

In [48] wird die folgende Aussage bewiesen.

Satz 4.3.1 *Ist $f^0 \in \mathrm{range}(A^{\mathrm{t}})$ (z. B. $f^0 = 0$) und $0 < \omega < 2$, so konvergiert die Folge (f^σ) gegen die verallgemeinerte Lösung f_ω. Ist das System $Af = g$ konsistent so ist dies die Lösung kleinster Norm. Ansonsten konvergiert f_ω für $\omega \to 0$ gegen den Minimierer von*

$$\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{\|a_i\|}(g_i - a_i^{\mathrm{t}} f)^2$$

Auch die Abhängigkeit der Konvergenzgeschwindigkeit vom Parameter ω wird in [48] untersucht. So läßt sich zeigen, daß für kleine ω die glatten Details des Bildes sehr schnell konvergieren, während kleine Details nur sehr langsam sichtbar werden. Für große ω hat man gerade das umgekehrte Verhalten. Außerdem zeigt es sich in der Praxis, daß das ART–Verfahren besser konvergiert wenn in 4.3 die Zeilen a_i nicht in natürlicher, sondern in zufälliger Reihenfolge durchlaufen werden.
Nach dem oben Gesagten wirkt das ART–Verfahren für kleine ω in den ersten Iterationen wie eine digitale Filterung. Eine ähnliche Wirkung hat das Landweber–Verfahren. Dieses ist gegeben durch die Iteration

$$f^{\sigma+1} = f^\sigma + \gamma^2 A^{\mathrm{t}}(g - Af^\sigma)$$

und stellt für $\gamma = 1$ formal somit die additive Form des EM–Verfahrens dar. Das Verfahren konvergiert gegen die Moore–Penrose verallgemeinerte Lösung f^{M} von $Af = g$. Diese ist bekanntlich gegeben durch

$$f^{\mathrm{M}} \in \mathrm{range} A^{\mathrm{t}} \text{ mit } A^{\mathrm{t}} A f^{\mathrm{M}} = A^{\mathrm{t}} g$$

Ist $A = U \Lambda V^{\mathrm{t}}$ die Singulärwertzerlegung [36] von A mit $U = (u_1, \ldots, u_p)$, $V = (v_1, \ldots, v_p)$ und $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_p)$, $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_p > 0$, so hat f^{M} die Darstellung

$$f^{\mathrm{M}} = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k^{-1} (g^{\mathrm{t}} u_k) v_k \ .$$

In [49] wird gezeigt, daß für die Iterierten f^σ des Landweber–Verfahrens

$$f^\sigma = \sum_{k=1}^{p} F_\sigma(\lambda) \lambda_k^{-1} (g^{\mathrm{t}} u_k) v_k$$

mit

$$F_\sigma(\lambda) := 1 - (1 - \gamma^2 \lambda^2)^\sigma$$

gilt. Für $\gamma\lambda \leq 1$ konvergiert dieses Verfahren somit gegen f^{M}. Außerdem hängt die Konvergenzgeschwindigkeit der Beiträge v_k von der Größe der entsprechenden Werte λ_k ab. Für große λ_k ergibt sich schnelle, für kleine λ_k jedoch nur sehr langsame Konvergenz. Die geringere Wichtung der v_k, die zu kleinen λ_k gehören, entspricht aber gerade einer digitalen Filterung.
Auch das Verfahren der konjugierten Gradienten (kurz cg–Verfahren) wurde zur Benutzung in der Computertomographie vorgeschlagen und läßt sich ähnlich wie das Landweber Verfahren als digitales Filter auffassen. Genaueres hierzu ist in [49] zu finden.
Während die bisher betrachteten Verfahren stabil gegenüber statistischen Fehlern in den Daten sind, soll das von Tsupko–Sitnikov [69] vorgeschlagene RIT–Verfahren (RIT = robust iterative technique) stabil gegenüber Ausreißern sein. Solche Ausreißer können zum Beispiel durch defekte oder verschmutzte Detektoren auftreten. Der Autor zeigt, daß die Approximationen, die das von ihm entwickelte Verfahren berechnet, folgendes Funktional maximiert:

$$\mathrm{R}(f) := \sum_{i=1}^{m} \rho(g_i - (Af)_i)$$

mit

$$\rho(\tau) := \begin{cases} \frac{\tau^2}{2} & ; \quad |\tau| \leq k \\ k|\tau| - \frac{k^2}{2} & ; \quad |\tau| > k \end{cases}$$

Hierbei ist k ein vom Benutzer zu wählender Parameter. Ein Iterationsschritt des RIT–Verfahrens ist wie folgt festgelegt:

$$f^{\sigma+1} = f^\sigma + \lambda^\sigma p^\sigma$$

mit

$$\begin{aligned} p_j^\sigma &= \sum_{i=1}^{m} a_{ij}\rho'(g_i - (Af^\sigma)_i) \qquad j = 1,\ldots,n \\ \lambda^\sigma &= \begin{cases} \|p^\sigma\|\|Ap^\sigma\|^{-2} & ; \quad \|p^\sigma\| > 0 \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

In [69] wird außerdem noch beschrieben, wie dieses Verfahren effizient durchgeführt werden kann.
Als ein iteratives stochastisches Verfahren soll nun noch der Simulated Anealing Algorithmus beschrieben werden. Eine Anwendung dieses Verfahrens für die Computertomographie ist in [52] zu finden. Im allgemeinen dient das Verfahren zur Lösung von Problemen der Art:

Minimiere $C(f)$ unter $f \in \mathcal{R}$

Hierbei ist $\mathcal{R}$ eine Menge von Zuständen f und $C : \mathcal{R} \longrightarrow \mathbf{R}$ eine Kostenfunktion. Bei einer Anwendung in der Emissionstomographie könnte man hier speziell $\mathcal{R} = \mathbf{R}_+^n$ und für C eine der folgenden Funktionen wählen.

i. $C(f) = \|Af - g\|$

ii. $C(f) = -l(f)$

iii. $C(f) = -b(f)$

Beim Simulated Anealing Verfahren wird nun ausgehend von einem Anfangszustand f^0 eine Folge von Zuständen f^σ erzeugt, die gegen einen Zustand f^* mit minimalen Kosten strebt. Hierzu ist für jedes $\sigma = 0, 1, 2, \ldots$ und jedes Paar $(f, h) \in \mathcal{R} \times \mathcal{R}$ eine Wahrscheinlichkeit dafür angegeben, daß man zum Zeitpunkt $\sigma + 1$ die Konfiguration h annimmt, falls zum Zeitpunkt σ die Konfiguration f gegeben war. Würde man nur Übergänge $(f, h) \in \mathcal{R} \times \mathcal{R}$ erlauben für die $C(f) > C(h)$ gilt, so bliebe der Algorithmus in einem lokalen Minimum hängen, welches für beliebige Funktionen C im allgemeinen nicht das globale ist. Um dies zu vermeiden, macht man die Übergangswahrscheinlichkeit wie folgt von einem positiven Parameter T abhängig. Zunächst wird für jede Konfiguration $f \in \mathcal{R}$ eine Menge $\mathcal{R}_f$ von Nachbarkonfigurationen definiert. Man startet dann mit einem großen Wert für T und einer beliebigen Konfiguration $f \in \mathcal{R}$, wählt daraufhin ein zufälliges $h \in \mathcal{R}_f$ und berechnet

$$\triangle C(f, h) := C(h) - C(f).$$

Ist $\triangle C(f, h) \leq 0$ so ist h die nächste Konfiguration der Folge, andernfalls wird h nur mit der Wahrscheinlichkeit $\exp\left(-\frac{\triangle C(f,h)}{T}\right)$ die nächste Konfiguration. Dieses Vorgehen wiederholt man solange, bis sich ein „Gleichgewichtszustand“ eingestellt hat. Der Parameter T wird nun schrittweise verkleinert und für jeden Wert von T nach der oben beschriebenen Methode wieder ein „Gleichgewichtszustand“ herbeigeführt. Der Algorithmus wird schließlich bei

einem kleinen Wert des Parameters T abgebrochen. Die letzte Konfiguration ist dann theoretisch mit Wahrscheinlichkeit 1 die optimale.
Leider wird dieses Verfahren in [52] nur zur Minimierung der konvexen Funktion $\|Af - g\|$ unter $f \geq 0$ eingesetzt. Da die Stärke des Simulated Anealing aber gerade darin liegt, auch bei Kostenfunktionen mit mehreren lokalen Minima recht nahe an das globale Minimum heranzukommen, ist dieser Fall nicht sehr interessant. Attraktiv ist die Benutzung von Simulated Anealing eigentlich erst dann, wenn eine nicht konvexe Funktion zu minimieren ist. Je nach Wahl von U in 2.16 kann $-b$ aber zu solch einer nicht konvexen Funktion werden. Da in solch einem Fall die Konvergenz der inneren Iteration eines ESNM–Verfahrens mit der in dieser Arbeit entwickelten Theorie nicht gesichert werden kann, ist Simulated Anealing eine interessante Alternative zur Maximierung solcher Funktionen b.

Kapitel 5

Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die numerischen Eigenschaften der verschiedenen Rekonstruktionsverfahren verglichen werden. In Paragraph 5.1 werden allgemeine Voraussetzungen über die Simulation der Daten und die Auswertung der berechneten Bilder festgelegt. In Paragraph 5.2 wird dann, neben einigen anderen iterativen Verfahren, hauptsächlich das EM–Verfahren betrachtet, während in Paragraph 5.3 Ergebnisse des ESNM–Verfahrens gezeigt werden.

5.1 Datensimulation und Bildbeurteilung

Im folgenden wird das Original–Bild mit f^{org} und die Rekonstruktion mit f bezeichnet. Für die Berechnung der Systemmatrix A wurden die Parameter $p = 96$, $q = 32$ und $B = 64$ gewählt. Zur Simulation der Daten berechnet man zunächst den Vektor $g = Af^{\text{org}}$. Die Komponenten g_i von g werden dann durch zufällig erzeugte Werte $\tilde{g}_i$ ersetzt, wobei man zur Erzeugung der $\tilde{g}_i$ einen Zufallszahlengenerator mit Poisson–Verteilung benutzt und g_i als Mittelwert der Verteilung vorgibt.
In den nachfolgenden Paragraphen werden Phantome untersucht, die mit CONTRAST (Abb. 5.1a), PET (Abb. 5.11a), CIRCLE (Abb. 5.12a) und PEAK (Abb. 5.16a) bezeichnet werden sollen. Definiert man als relativen Datenfehler die Größe $100\frac{\|\tilde{g}-g\|}{\|g\|}$, so ergeben sich mit der oben beschriebenen Simulationsmethode die in Tabelle 5.1 aufgeführten Fehler für die Datensätze der genannten Phantome. Um zu beurteilen, wie weit f von f^{org} abweicht,

Phantom	Datenfehler
CONTRAST	10.18%
PET	15.29%
CIRCLE	14.06%
PEAK	9.67%

Tabelle 5.1: Datenfehler der benutzten Phantome

werden die relativen Fehler $100\frac{\|f^{\text{org}}-f\|}{\|f^{\text{org}}\|}$ der Rekonstruktionen in der Euklidischen und der Supremumsnorm betrachtet. Bei den iterativen Verfahren wurden jeweils 60 Iterationen berechnet, und die Rekonstruktion mit dem kleinsten relativen l_2–Fehler als endgültiges Ergebnis betrachtet. Die gezeigten Bilder zeigen also im allgemeinen das bestmögliche Ergebnis, das mit einem Algorithmus überhaupt erreichbar ist.
Um auch ein Maß dafür zu haben, wie stark ein Bild von Rauschen überlagert wird, soll der Begriff einer lokalen Standardabweichung eingeführt werden. Die Idee hierbei ist das Originalbild so in Mengen zu zerlegen, daß in jeder Menge nur Pixel gleicher Dichte vorkommen. Diese Unterteilung wird dann auf das rekonstruierte Bild übertragen, und die Varianz für jede dieser Mengen berechnet. Die lokale Standardabweichung ist schließlich eine Linearkombination aus den Wurzeln der so ermittelten Varianz–Werte.
Formal läßt sich dies folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned} M &:= \{\xi \in \mathbf{R} : \exists i \in \{1,\ldots,n\}\, f_i^{\text{org}} = \xi\} \\ L_\xi &:= \{i \in \{1,\ldots,n\} : f_i^{\text{org}} = \xi\} \end{aligned}$$

M ist also die Menge der Werte, die in f^{org} vorkommen, L_ξ die Menge der Pixelnummern die zu Pixeln mit dem Wert ξ gehören. Die Varianz von f über eine der Mengen L_ξ ist dann gegeben durch:

$$\text{Var}_\xi(f) := \frac{1}{|L_\xi|} \sum_{i \in L_\xi} \left(f_i - \frac{1}{|L_\xi|} \sum_{i \in L_\xi} f_i \right)^2$$

Die lokale Standardabweichung $\mathcal{L} - \text{Std}(f)$ von f definieren wir gemäß

$$\mathcal{L} - \text{Std}(f) := \frac{1}{n} \sum_{\xi \in M} |L_\xi| \sqrt{\text{Var}_\xi(f)}.$$

Für ein unverrauschtes Bild ist offensichtlich $\mathcal{L} - \text{Std}(f) = 0$, wärend mit stärker werdendem Rauschen $\mathcal{L} - \text{Std}(f)$ größer wird. Würde man die Varianz des gesamten Bildes als Maß für Rauschen benutzen, so wäre dies vom Originalbild selbst abhängig. Außerdem würden auch unterschiedlich genaue Rekonstruktionen der einzelnen Dichte-Levels diesen Wert selbst dann beeinflussen, wenn die Rekonstruktionen innerhalb der einzelnen Levels sehr gleichmäßig sind. Die oben definierte lokale Standardabweichung hat diese Nachteile jedoch nicht.

5.2 EM und andere iterative Verfahren

In diesem Paragraphen soll das Verhalten verschiedener Algorithmen an dem in Abb. 5.1a gezeigten Phantom CONTRAST untersucht werden. In Bild 5.1b ist die beste Rekonstruktion, die mit dem EM–Verfahren möglich war, gezeigt. Dieses Bild ergab sich nach 12 Iterationen. In Paragraph 2.2

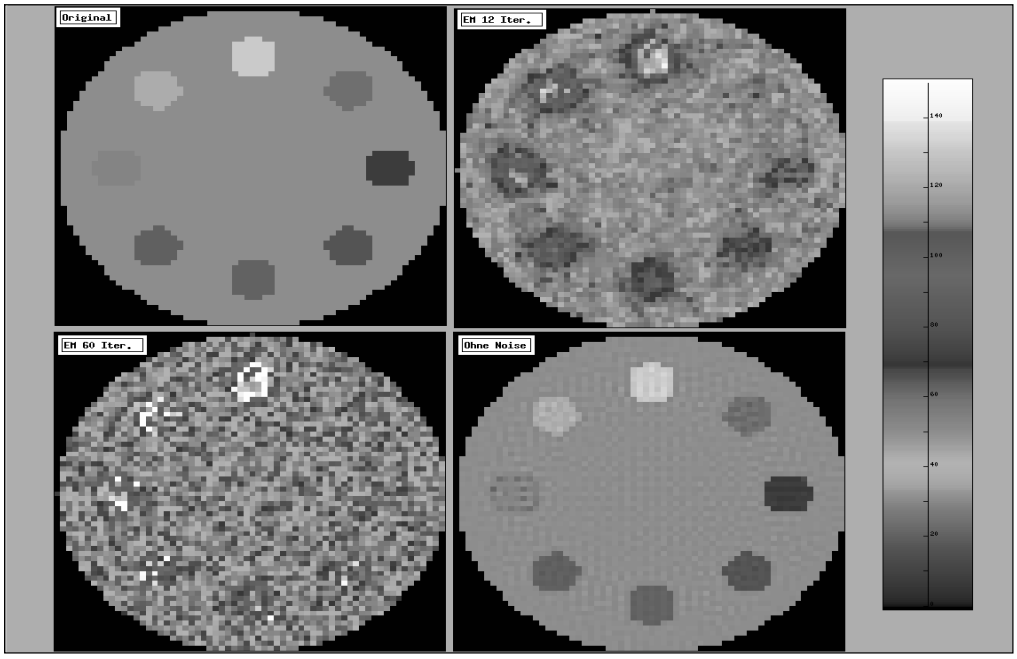

Abbildung 5.1: EM–Rekonstruktionen des CONTRAST–Phantoms mit Startwert $f^0 = 1_n$. a.) Oben links: Original; b.) Oben rechts: Bild nach 12 Iterationen; c.) Unten links: Bild nach 60 Iterationen; d.) Unten rechts: Rekonstruktion ohne Noise, (1000 Iterationen).

wurde bereits darauf hingewiesen, daß die Bilder mit Fortschreiten der Iteration immer verrauschter werden. Dieser Effekt ist in der 60-ten Iteration, die in Abb. 5.1c gezeigt ist, deutlich zu erkennen.
Bei den in Bild 5.1 gezeigten Rekonstruktionen wurde als Startwert immer der Vektor $f^0 = 1_n$ verwendet. In Bild 5.2 ist zum Unterschied hierzu, als Startwert der Vektor $f^0 = (\epsilon + \xi_i)_i$ benutzt worden. Hierbei ist $\xi_i \in [0, 1[$ eine zufällig gewählte Zahl, und $\epsilon > 0$ eine kleine Zahl, die lediglich die Positivität des Startvektors garantieren soll. In Abb. 5.2a, b bzw. c ist die 10., 20. bzw. 60. Iterierte des EM–Verfahrens mit diesem Startwert gezeigt. In diesem Fall sind schon die frühen Rekonstruktionen des EM-Verfahrens stark verrauscht, und das Verfahren schafft es kaum, dieses Rauschen zu reduzieren. So ist zwischen der 30. und 60. Iteration praktisch keine Verbesserung mehr erkennbar. Daß das EM–Verfahren mit dem Startwert $f^0 = 1_n$, bei vorzeitigem Stoppen der Iteration einigermaßen unverrauschte Bilder liefert, liegt also nur daran, daß es die Glattheit des Startvektors bis zu einem gewissen Gerade erhält.
Um eine Vorstellung vom Frequenzverhalten eines EM-Verfahrens mit Startwert 1_n zu bekommen, habe ich Rekonstruktionen eines kleinen Kreises mit Durchmesser 0.1 und Dichte 50 gemacht und Fourier–Transformationen dieser Rekonstruktionen berechnet. In Abb. 5.3 sind horizontale Querschnitte durch diese Fourier-transformierten Bilder zu sehen. Das Pixel Nummer 32

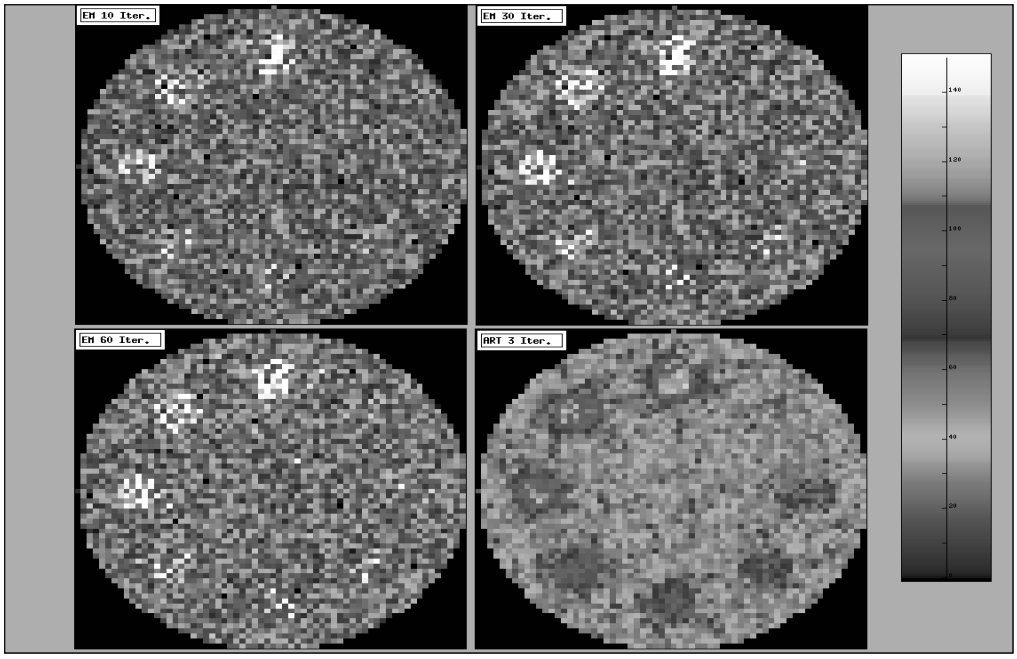

Abbildung 5.2: EM–Rekonstruktionen des CONTRAST–Phantoms mit Startwert $f^0 = (\epsilon + \xi_i)_i$. a.) Oben links: 10 Iterationen; b.) Oben rechts: 30 Iterationen; c.) Unten links: 60 Iterationen; d.) Unten rechts: ART-Rekonstruktion nach 3 Iterationen.

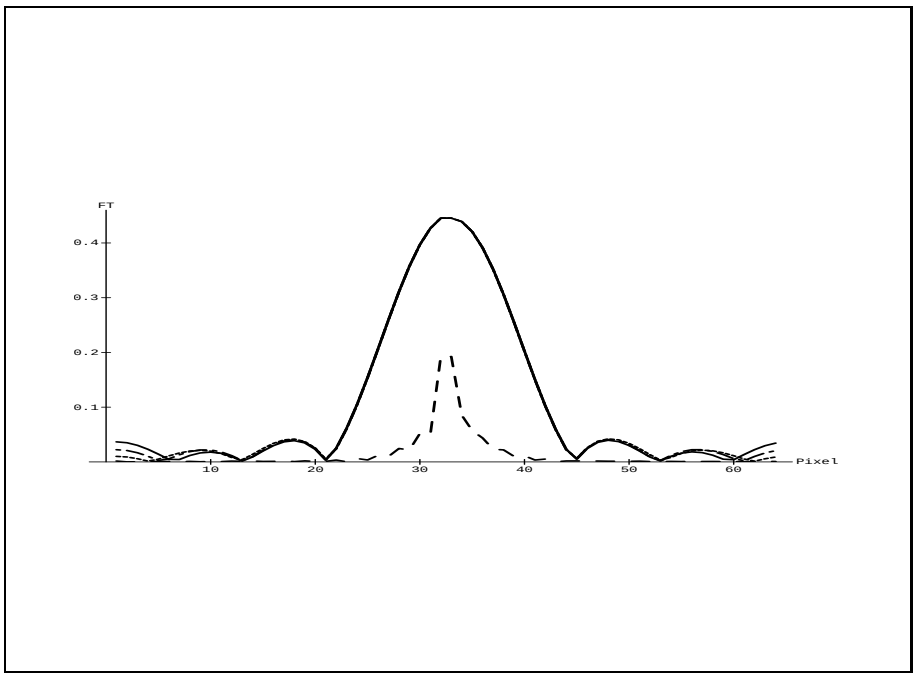

Abbildung 5.3: Fourier–Transformierte von EM–Rekonstruktionen

entspricht in diesem Plot der Position $(x_1, x_2) = (0, 0)$. Die durchgezo-

gene Linie zeigt die Fourier–Transformation des Originalbildes, die gestrichelte Linie die Transformation der ersten Iterierten des EM–Verfahrens. Man sieht deutlich, daß die Fourier–Transformation dieser Rekonstruktion große Beiträge nur für Argumente nahe bei Null liefert. Dies bedeutet, daß das EM–Verfahren mit Startwert $f^0 = 1_n$ zuerst niedrige Frequenzen rekonstruiert, welche aber gerade für die groben Details eines Bildes verantwortlich sind. Dieser Zusammenhang zwischen einem Bild und seiner Fourier–Transformierten ist in [48], Kapitel III beschrieben.
Die gepunktete, bzw. die Strich–Punkt–förmige Linie zeigen schließlich noch Schnitte durch die Fourier Transformationen der 15. bzw. 30. Iterierten. Man sieht deutlich, daß die am Rande liegenden Beiträge der Fourier-Transformierten des Originals erst mit wachsender Anzahl der Iterationen richtig wiedergegeben werden.
Interessant wäre es also, eine Frequenzanalyse des EM–Verfahrens mit Startwert $f^0 = 1_n$ zu haben, ähnlich der, wie sie für ART [48] oder das Landweber–Verfahren [66] existieren.
In Paragraph 2.1 wurde gezeigt, daß das EM-Verfahren gegen eine positive Lösung des Systems $Af = g$ konvergiert, falls eine solche existiert. Um dies zu veranschaulichen, ist in Abb. 5.1d eine Rekonstruktion aus ungestörten Daten berechnet worden. Das gezeigte Bild entstand nach 1000 Iterationen des EM-Verfahrens. Der l_2–Fehler dieses Bildes beträgt nur noch 1.72%. In Abb. 5.4 ist der Konvergenzverlauf der Iteration dargestellt. Hiernach wird man erwarten, daß der Fehler weiter abnimmt und gegen Null strebt. Im

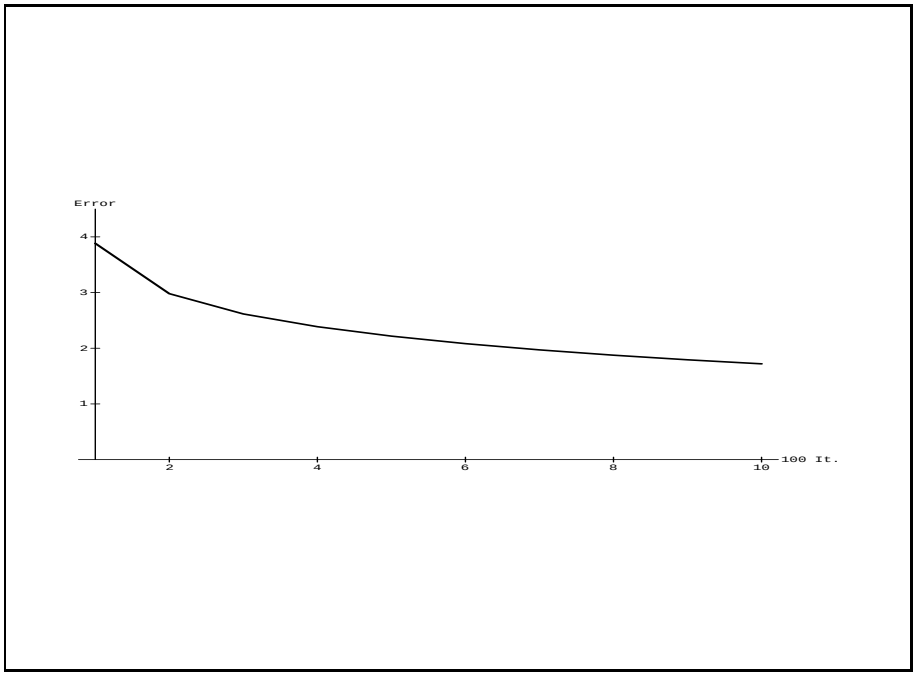

Abbildung 5.4: Konvergenz bei fehlerfreien Daten

überbestimmten Fall liegt das Eintreten des Schachbretteffekts (s. S. 24) also nur an der Inkonsistenz des zugrunde liegenden Systems.

Abb. 5.2d bzw. Abb. 5.5a zeigen Rekonstruktionen des ART (s. S. 55), bzw. des Landweber Verfahrens (s. S 55). Für ART wurde hierbei $\omega = 0.05$, für

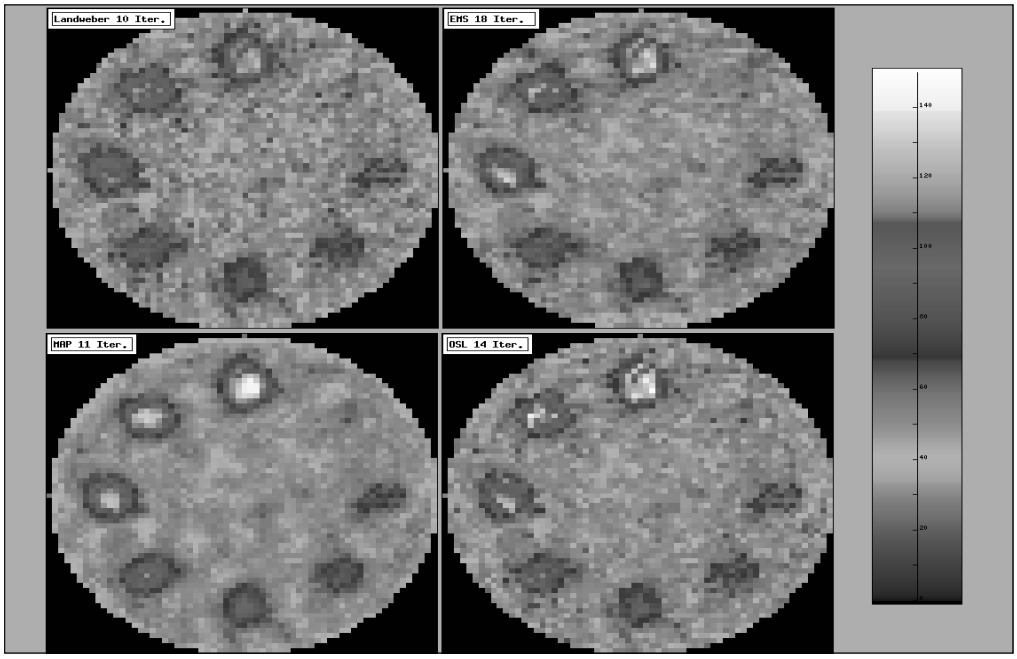

Abbildung 5.5: Rekonstruktionen des CONTRAST–Phantoms mit verschiedenen Verfahren. a.) Oben links: Landweber–Verfahren (10 Iterationen); b.) Oben rechts: EMS–Verfahren (18 Iterationen); c.) Unten links: MAP–Verfahren (11 Iterationen); d.) Unten rechts: OSL–Verfahren (14 Iterationen).

das Landweber–Verfahren $\gamma = 0.25$ gewählt. Diese Werte sind durch ausgiebiges Experimentieren mit dem CONTRAST–Phantom ermittelt worden. Entsprechendes gilt auch für die Bestimmung der Parameter bei den weiter unten aufgeführten Verfahren.
An den Bildern, so wie auch anhand des in Abb. 5.6 dargestellten Konvergenzverlaufs ist zu erkennen, daß das EM–Verfahren wirklich schon eine Verbesserung gegenüber diesen beiden klassischen Verfahren darstellt.
Ein Nachteil aller drei Verfahren ist aber, daß der l_2–Fehler nach dem Durchlaufen eines Minimums mit zunehmender Anzahl der Iterationen wieder recht stark ansteigt. Um diese Schwächen zu überwinden, wurden diverse Modifikationen des EM–Verfahrens vorgeschlagen. In Bild 5.5 sind Rekonstruktionen mit einigen dieser Verfahren zu sehen. Abb. 5.5b zeigt ein Ergebnis des EMS–Verfahrens ($W = 50$, s. S. 52), Abb. 5.5c das MAP–Verfahren ($\gamma = 0.0005$, s. S. 48) und Abb. 5.5d das OSL–Verfahren ($\gamma = 0.0005$, s. S. 49). Beim MAP–Verfahren wurde dabei die in Abb. 5.8a gezeigte Rekonstruktion als a priori Information verwendet. Dieses Bild ist mit der gefilterten Rückprojektion, bei starker Glättung, berechnet worden.

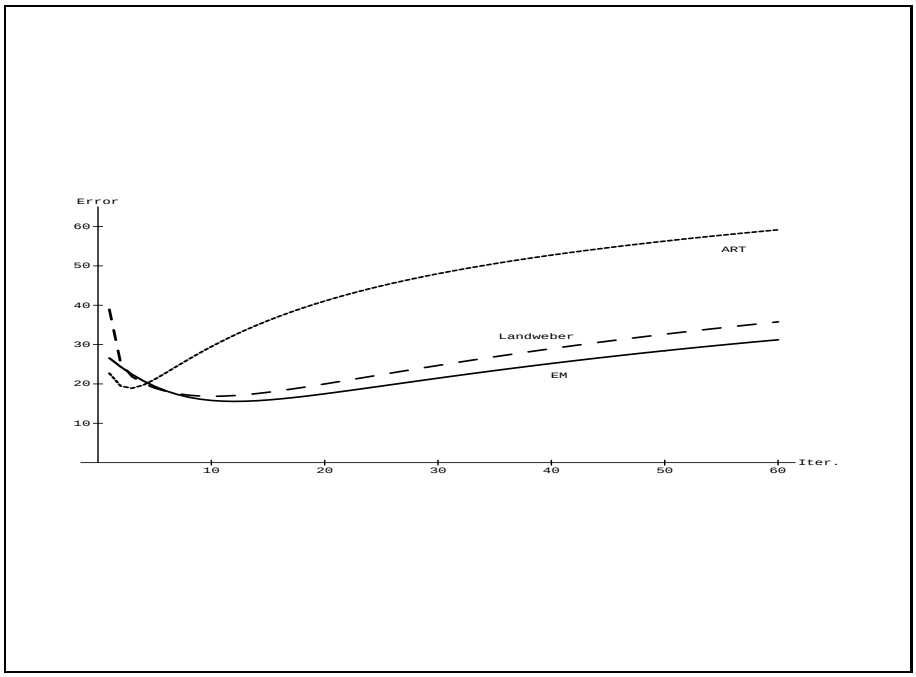

Abbildung 5.6: Konvergenz von ART, Landweber und EM

Es ist unverkennbar, daß das Rauschen in diesen Bildern, gegenüber den zuvor betrachteten Rekonstruktionen, stark reduziert wurde. In den in Abb. 5.7 gezeigten Konvergenzverläufen ist außerdem zu sehen, daß das Anwachsen des Fehlers nach dem Durchschreiten eines Minimums, beim EMS– und MAP–Verfahren nur noch sehr langsam von statten geht. Für den Vergleich von Abb. 5.6 und Abb. 5.7 sei darauf hingewiesen, daß die Ordinate in 5.6 von 0–60, die in 5.7 aber nur von 0–30 reicht. Das die in Abb. 5.7 aufgetragenen Verfahren, bis auf das EMS–Verfahren, Rekonstruktionen mit kleineren l_2–Fehlern und kleinere lokaler Standardabweichung liefern, kann auch Tabelle 5.2 entnommen werden.

Verfahren	l_2–Fehler	l_∞–Fehler	$\mathcal{L}$ – Std
EM	15.56%	35.99%	5.68
ART	18.90%	39.20%	7.46
Landweber	16.58%	36.06%	6.10
EMS	15.66%	38.80%	5.45
OSL	15.07%	35.99%	5.47
MAP	14.45%	41.20%	5.53

Tabelle 5.2: Vergleich verschiedener Rekonstruktions–Verfahren.

Aus der Tabelle ist auch ersichtlich, daß das EMS–Verfahren und das EM–Verfahren Rekonstruktionen liefern, die fast den selben l_2–Fehler haben. Das glattere Erscheinungsbild der EMS–Rekonstruktion ist also nur durch die ge-

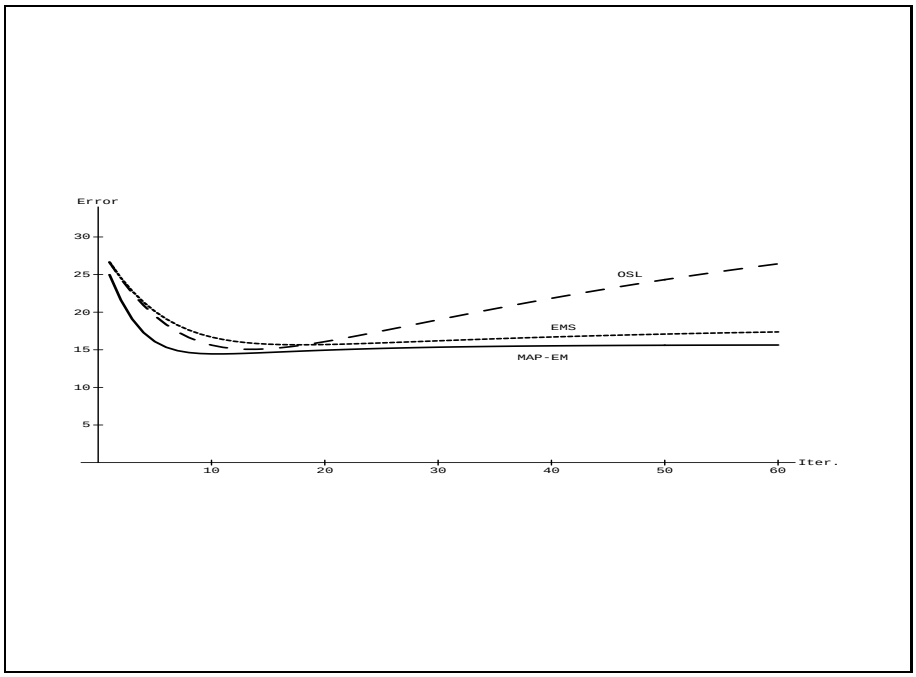

Abbildung 5.7: Konvergenz von EMS, OSL und MAP

ringere lokale Standardabweichung zu erklären. Nach der Konstruktion dieses Verfahrens, das ja nichts weiter macht als nach jedem EM–Schritt zu glätten, ist dieses Verhalten durchaus verständlich.
Von allen in diesem Paragraphen betrachteten Algorithmen liefert das MAP–Verfahren die besten Ergebnisse in Hinblick auf l_2–Fehler, Glattheit und Konvergenzverhalten. Daher werden weiter ESNM–Ergebnisse anderer Phantome des folgenden Paragraphen, nur noch mit Rekonstruktionen des MAP–Verfahrens verglichen.

5.3 Ergebnisse mit ESNM–Verfahren

In diesem Paragraphen soll nun das ESNM–Verfahren betrachtet werden, welches ja vom Prinzip her auch eine Modifikation des EM–Verfahrens darstellt. Als Penalty–Term wird dabei die in 3.8 angegebene Funktion verwendet, wobei W wie in 3.12 und v_1, v_2 gemäß 3.13 gewählt werden. Als a priori Information wird auch hier wieder die in Abb. 5.8a gezeigte Rekonstruktion benutzt.
In Abb. 5.8b ist eine ESNM–Rekonstruktion des CONTRAST–Phantoms mit $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.0018$ gezeigt. Mit diesen Werten ergaben sich bei diesem Phantom die Rekonstruktionen mit den kleinsten l_2–Fehlern. Die Rekonstruktion ist deutlich glatter als die in Paragraph 5.2 gezeigten, wobei die runden Peaks am Rande des Phantoms aber noch deutlich herauskommen. Frühere Rechnungen, in denen $v_2(r) = r^2$ verwendet wurde, führten stets zu einer unakzeptabel starken Dämpfung dieser Peaks. Dies ist der Grund,

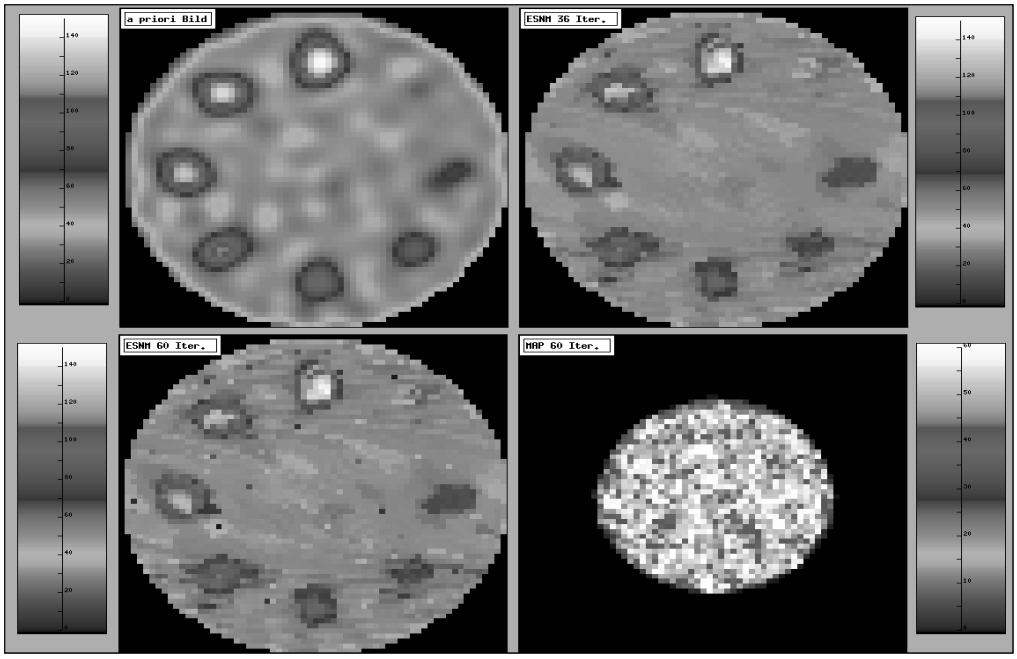

Abbildung 5.8: ESNM–Rekonstruktionen des CONTRAST–Phantoms. a.) Oben links: a priori Bild; b.) Oben Rechts: 36 Iterationen des ESNM–Verfahrens mit Startwert $f^0 = 1_n$; c.) Unten links: 60 Iterationen des ESNM–Verfahrens mit Startwert $f^0 = (\epsilon + \xi_i)_i$; d.) MAP-Rekonstruktion des CIRCLE–Phantoms nach 60 Iterationen.

warum für v_2 die wesentlich langsamer wachsende, aber auch kompliziertere Funktion $\ln(\cosh(r))$ gewählt wurde.
In Abb. 5.9 ist die Entwicklung des l_2–Fehlers während der ESNM–Iteration aufgetragen. Zum Vergleich ist auch noch die entsprechende Kurve des MAP–Verfahrens mit abgebildet. Es zeigt sich, daß das ESNM–Verfahren ein sehr stabiles Konvergenz–Verhalten hat, daß sogar noch etwas besser als das Konvergenz–Verhalten des MAP–Verfahrens ist.
Die besseren Eigenschaften des ESNM–Verfahrens im Vergleich zu herkömmlichen Verfahren, in Hinsicht auf Glattheit und l_2–Fehler, sind auch Tabelle 5.3 zu entnehmen. Nur der l_∞–Fehler ist hier höher als bei den in Paragraph 5.2 berechneten Bildern. Da dieser Fehler aber schon dann groß ist, wenn nur ein Pixel der Rekonstruktion stark vom entsprechenden Pixel–Wert des Originalbildes abweicht, macht dieser Fehler kaum eine Aussage über die optischen Qualitäten eines Bildes. Andererseits fällt es bei Betrachtung von Tabelle 5.2 und 5.1 auf, daß gerade die Verfahren, die kleinen l_2–Fehler und kleine lokale Standardabweichungen liefern, einen hohen l_∞–Fehler erzeugen. Es scheint also, daß zur Verbesserung von Glattheit und l_2–Fehler eine Verschlechterung des, optisch weniger bedeutsamen, l_∞–Fehlers hingenommen werden muß. Untersuchungen in dieser Richtung wären sicherlich sehr auf-

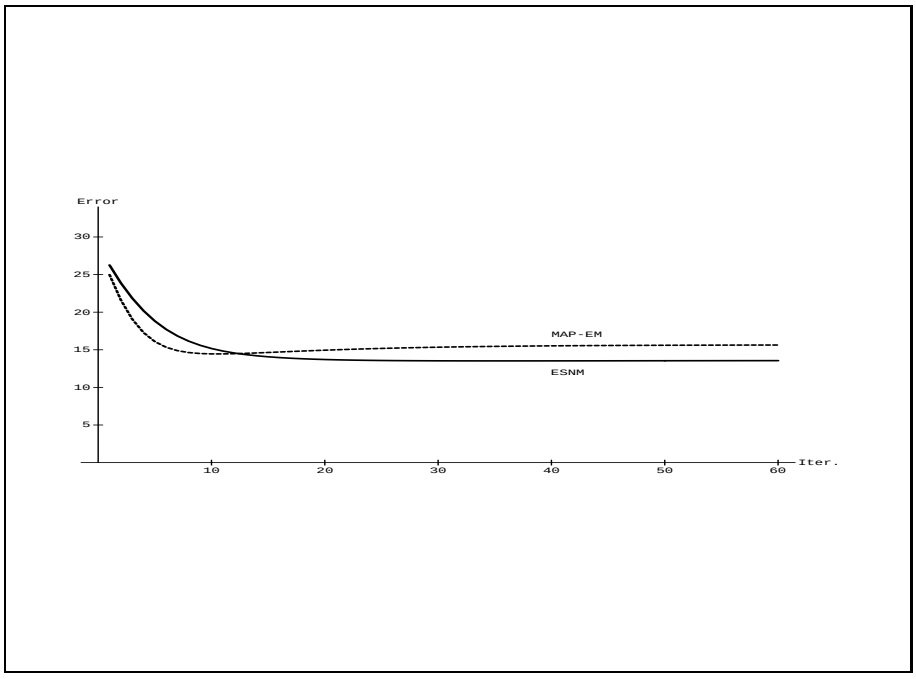

Abbildung 5.9: Konvergenzkurven von ESNM und MAP

Phantom	Bemerkung	l_2–Fehler	l_∞–Fehler	$\mathcal{L}$ – STD
CONTRAST	$\gamma = 0.0001$; $\rho = 0.0018$	13.52%	41.97%	4.14
CONTRAST	$\gamma = 0.0001$; $\rho = 0.0009$	13.59%	39.95%	4.65
CONTRAST	$\gamma = 0.0007$; $\rho = 0.0018$	14.74%	45.53%	5.10
PEAK	a priori = Grundkreis	14.83%	54.37%	3.62
PEAK	a priori = Peak	8.45%	9.79%	3.90

Tabelle 5.3: Auswirkung von Parametern und a priori Information beim ESNM–Verfahren

schlußreich.
In Abb. 5.8c ist die 60-te Iterierte des ESNM–Verfahrens mit γ, ρ wie in Abb. 5.8b zu sehen, die sich beim Startwert $f^0 = (\epsilon + \xi_i)_i$, ($\xi_i \in [0,1[$ Zufallszahl), ergibt. Im Unterschied zum EM–Verfahren weicht diese Rekonstruktion nur wenig von der ab, die man beim Startwert $f^0 = 1_n$ erhält. Ein Blick auf Abb. 5.10 läßt vermuten, daß das ESNM–Verfahren, unabhängig vom Startwert, gegen einen eindeutig bestimmten Grenzwert konvergiert. Die in Paragraph 2.2 gemachte Eindeutigkeitsaussage über die Maximierung von b ist somit auch numerisch unterlegt worden.
Mit dem CONTRAST–Phantom sollte untersucht werden, wie sich die verschiedenen Algorithmen sowohl bei der Rekonstruktion glatter Flächen, als auch bei der Entdeckung verschieden starker Peaks verhalten. Abb. 5.11a zeigt das PET–Phantom, das den wahren Verhältnissen bei PET–Untersuchungen am menschlichen Gehirn etwas näher kommt. In Abb 5.11c

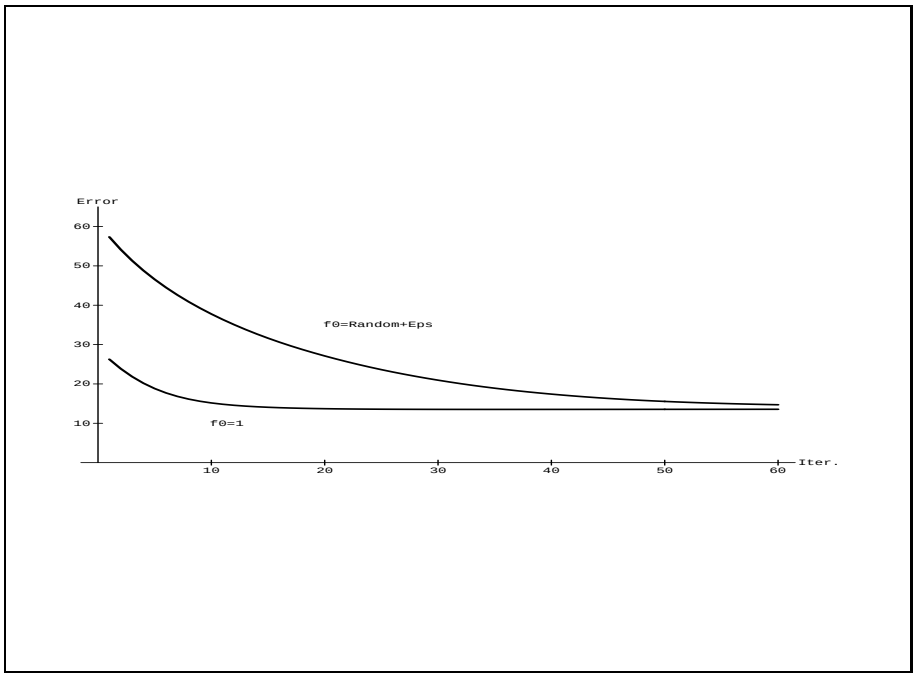

Abbildung 5.10: Konvergenz bei verschiedenen Startvektoren

ist die Rekonstruktion mit dem ESNM–Verfahren, in Abb. 5.11d die mit dem MAP–Verfahren gezeigt. Für beide Verfahren wurde das in Abb. 5.11b gezeigte Bild, das mit gefilterter Rückprojektion berechnet wurde, als a priori Information benutzt. Für das ESNM–Verfahren sind die Parameter $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.001$, für das MAP–Verfahren $\gamma = 0.0005$ gewählt worden. Für $\rho = 0.0018$ ergab sich beim ESNM–Verfahren in diesem Fall keine Konvergenz in der inneren Iteration, weswegen ρ entsprechend kleiner gewählt wurde.
Aus Tabelle 5.4 geht hervor, daß die Verbesserung bezüglich l_2–Fehler und Glattheit, hier noch drastischer ausfällt als beim CONTRAST–Phantom. Dies wird aber wohl im wesentlichen daran liegen, daß der Datenfehler, in

Phantom	Algorithmus	l_2–Fehler	l_∞–Fehler	$\mathcal{L}$ – Std
PET	MAP	20.90%	51.98%	4.72
PET	ESNM	16.72%	51.43%	3.11
CIRCLE	MAP	13.45%	54.26%	2.42
CIRCLE	ESNM	9.72%	66.74%	2.14

Tabelle 5.4: Vergleich von MAP und ESNM–Rekonstruktionen

den für das PET–Phantom erzeugten Daten, deutlich höher ist als der Fehler in den Daten des CONTRAST–Phantoms (Vgl. Tabelle 5.1). Im allgemeinen wird man erwarten, daß das ESNM–Verfahren um so vorteilhafter im Vergleich zu herkömmlichen Verfahren ist, je größer der Fehler in den Daten

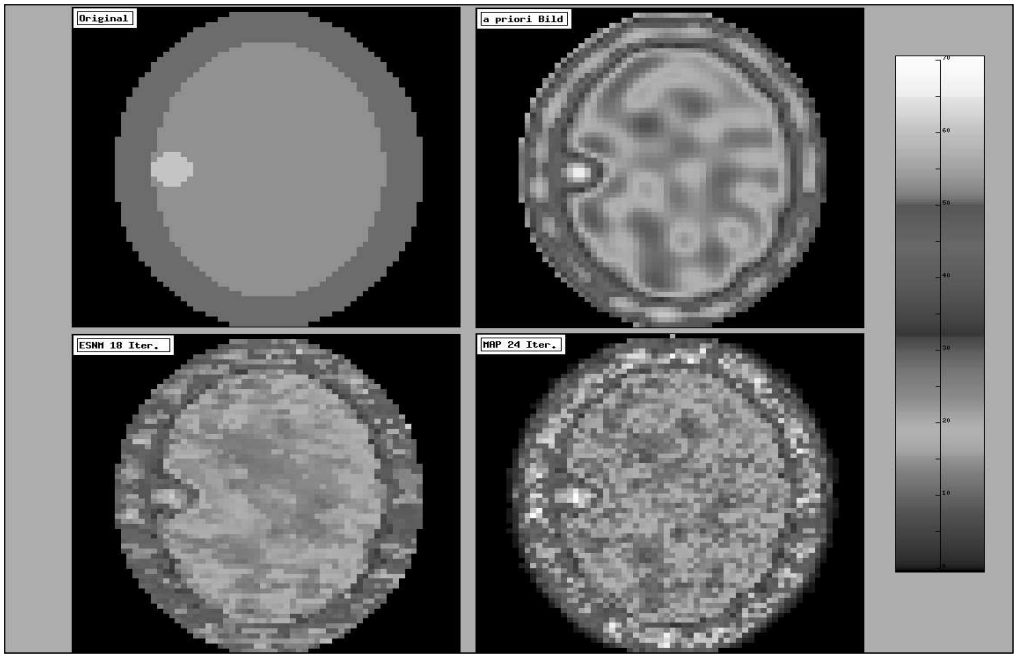

Abbildung 5.11: Rekonstruktionen des PET–Phantoms. a.) Oben links: Original; b.) Oben rechts: a priori Bild; c.) Unten links: 18 Iterationen des ESNM–Verfahrens; d.) Unten rechts: 24 Iterationen des MAP–Verfahrens.

ist.
Entsprechend ist die Verbesserung, die das ESNM–Verfahren gegenüber dem MAP–Verfahren erreicht, auch bei dem in Abb. 5.12a gezeigten CIRCLE–Phantom, deutlich ausgeprägter als beim CONTRAST–Phantom. Das Original ist hier eine Kreisscheibe vom Radius 0.6 und der Dichte 60. Wie schon zuvor wurde auch hier das a priori Bild wieder mit der gefilterten Rückprojektion berechnet. In Paragraph 3.4 wurde darauf hingewiesen, daß die a priori Information nur nicht negative Pixel–Werte enthalten sollte. Bei den Rekonstruktionen des CIRCLE–Phantoms sind hierzu zwei verschiedene Möglichkeiten erprobt worden. In der in Abb. 5.13a gezeigten a priori Information sind alle Pixel $f_i < 0$, des Bildes aus der gefilterten Rückprojektion, durch $f_i^{\mathrm{ap}} = 0$ ersetzt worden. In Abb. 5.13b wurden alle Pixel in f^{ap}, die außerhalb des Originalkreises liegen, auf Null gesetzt. Auch diese Vorgehensweise ist in manchen Fällen gerechtfertigt, da man ja manchmal die äußeren Abmessungen des Rekonstruktionsgebiets feststellen kann, wie z.B. die Größe eines Kopfes, oder den Durchmesser eines Faßes mit radioaktiven Altlasten.
Die ESNM–Rekonstruktionenen, die sich mit der ersten Methode ergaben, sind in Abb. 5.12b bis d gezeigt, die Rekonstruktion mit dem MAP–Verfahren in Abb. 5.8d. Die Parameter wurden dabei genauso wie beim PET–Phantom gewählt. Man erkennt hier deutlich, wie sich das Bild im Laufe der Itera-

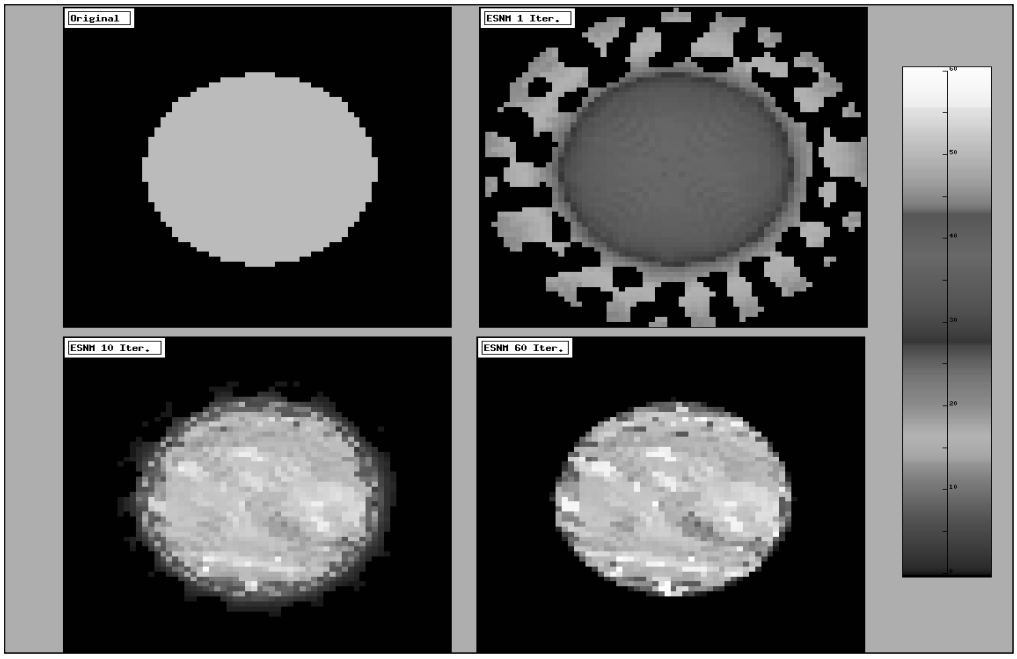

Abbildung 5.12: Rekonstruktionen des CIRCLE Pahntoms mit $f^{\mathrm{ap}} > 0$. a.) Oben links: Original; b.) Oben rechts: eine Iteration des ESNM–Verfahrens; c.) Unten links: 10 Iterationen des ESNM–Verfahrens; d.) Unten rechts: 60 Iterationen des ESNM–Verfahrens;

tion verbessert. ESNM–Rekonstruktion die sich mit der a priori Information aus Abb. 5.13b ergeben sind in Abb. 5.13c und d zu sehen. Hier ist die Rekonstruktion die sich nach der ersten Iteration ergibt exzellent, mit fortschreitender Anzahl der Iterationen wird das Bild jedoch dann schlechter. Dieses Verhalten tritt nur dann ein, wenn das zu rekonstruierende Objekt ein einheitliches Gebiet gleicher Dichte ist. Die a priori Information für das PET–Phantom wurde analog zu Abb. 5.13b erzeugt. Hier tritt der oben beobachtete Effekt jedoch nicht ein.
Erklären läßt sich dieses Verhalten beim CIRCLE–Phantom wie folgt: Zunächst versucht der Algorithmus einfach die gemessenen Ereignisse möglichst gleichförmig auf den durch die a priori Information gegebenen Träger der Dichtefunktion, also den Kreis, zu verteilen. Das Ergebnis ist also die nahezu exakte Rekonstruktion, die in Abb. 5.13c zu sehen ist. Mit Fortschreiten der Iteration kommen die Rekonstruktionen dann näher an die a priori Information heran. Da die verwendete a priori Information aber ein schlechteres Bild ist als das, welches in der ersten Iteration des ESNM–Verfahrens erhalten wurde, werden die Rekonstruktionen mit Fortschreiten der Iteration schlechter.
Abb. 5.14b zeigt eine ESNM–Rekonstruktion aus Daten eines PET–Scanners, die mir dankenswerter Weise von R. Muszic (Case Western Reserve Uni-

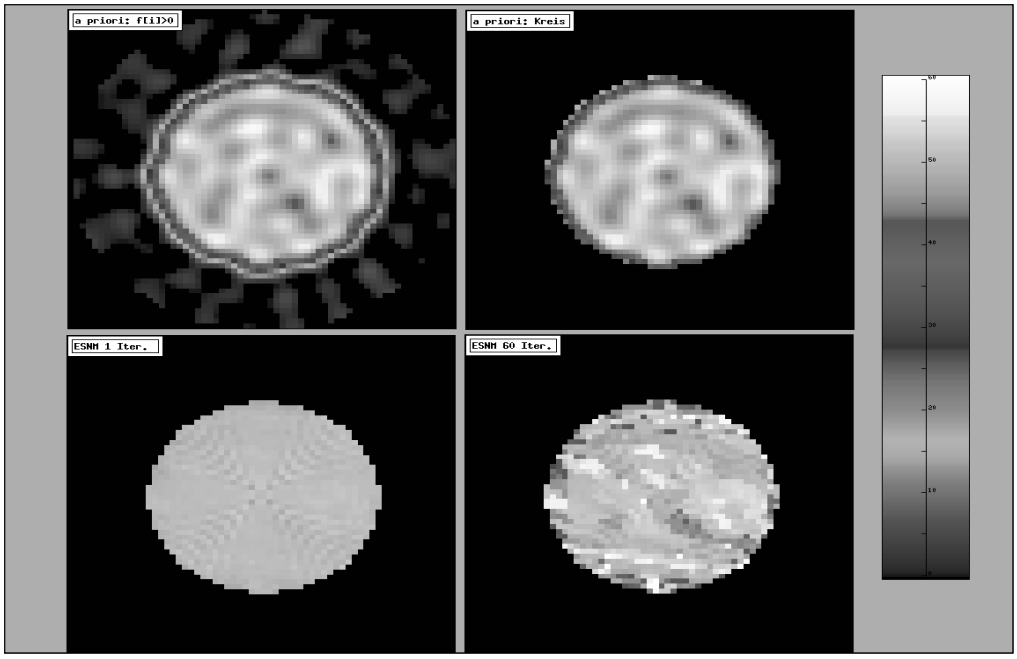

Abbildung 5.13: a.) Oben links: a priori Information bei der negative Werte der gefilterten Rückprojektion auf Null gesetzt wurden. b.) Oben rechts: a priori Information bei der Pixel ausserhalb des Kreises mit Radius 0.6 auf Null gesetzt wurden. c.) Unten links: ESNM–Rekonstruktion mit a priori Information aus b (erste Iteration); d.) Unten rechts: 60 Iterationen des ESNM–Verfahresn mit dem a priori Bild b.

versity, Cleveland) zur Verfügung gestellt wurden. Informationen über den verwendeten Scanner sind in [42], [41] und [43] zu finden. Gemessen wurde hier ein Kopf–Phantom gleichförmiger Aktivität. Ein solches Phantom erhält man, indem man ein künstliches Gehirn in eine härtende Flüssigkeit taucht. Nach Härten der Flüssigkeit entfernt man das künstliche Hirn wieder, und füllt den entstandenen Hohlraum mit einer radioaktiven Flüssigkeit.
Die in Abb. 5.14a gezeigte Rekonstruktion ist von R. Muszic am Department of Radiology der Case Western Reverse University in Cleveland, mit der gefilterten Rückprojektion berechnet worden. Für die ESNM–Rekonstruktionen wurde dabei allerdings aus Effizienzgründen nur ein Viertel des Datensatzes verwendet, aus dem das in Abb. 5.14a gezeigte Bild berechnet wurde. Dies erklärt die geringere Auflösung des ESNM–Bildes. Andererseits fällt sofort das wesentlich glattere Erscheinungsbild der ESNM-Rekonstruktion ins Auge. Insbesondere ist die Ausbildung in Wirklichkeit nicht vorhandener Strukturen wesentlich reduziert. Als Parameter für das ESNM–Verfahren wurden bei diesen Rechnungen die Werte $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.0018$ gewählt. Bild 5.15 zeigt Rekonstruktionen aus Daten von Patientenuntersuchungen, die ebenfalls in Cleveland durchgeführt wurden. In der oberen Reihe ist eine

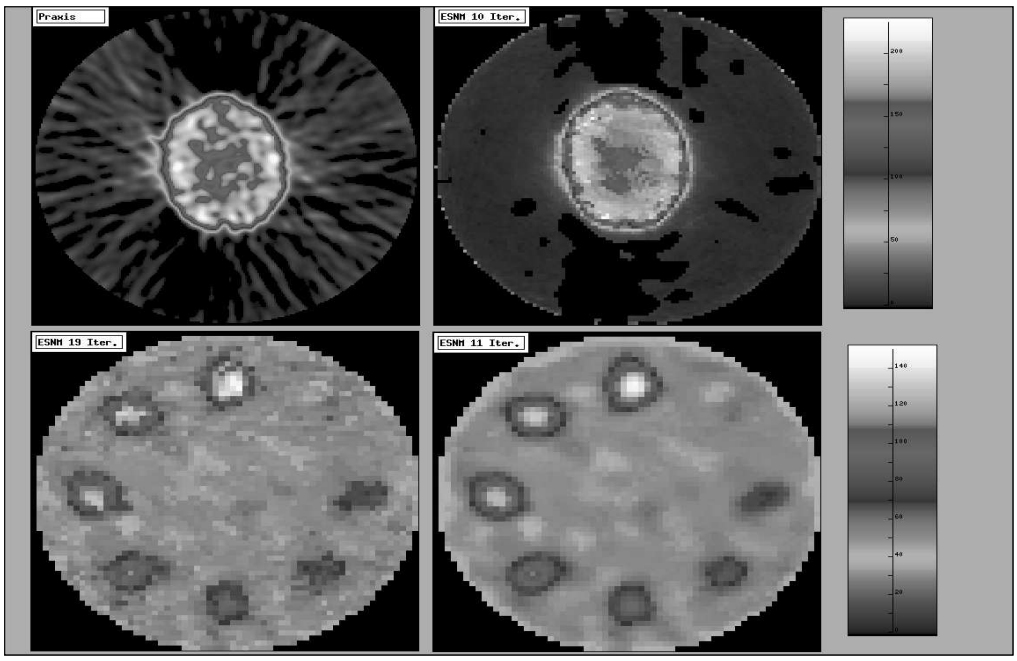

Abbildung 5.14: Oben: Rekonstruktionen aus realen PET–Daten. Das linke Bild zeigt eine Rekonstruktion, wie sie der derzeitigen Praxis entspricht, das rechte Bild die 10. Iterierte des ESNM–Verfahrens. Unten: Auswirkung der Veränderung der Parameter. Links ist zu sehen welchen Effekt die Verkleinerung von ρ hat, rechts was bei Vergrößerung von γ passiert.

Gehirnuntersuchung, in der unteren eine Untersuchung des Thorax zu sehen. Die linke Seite zeigt Rekonstruktionen die von R. Muszic mit der gefilterten Rückprojektion berechnet wurden, die rechte Seite die jeweils 15-te Iteration des ESNM–Verfahrens mit $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.001$. Für die ESNM–Rekonstruktionen wurde auch hier wieder nur ein Viertel des gesamten Datensatzes benutzt, was die geringere Auflösung der ESNM–Rekonstruktionen zur Folge hat.
Bei der Gehirnuntersuchung ist die Ausbildung von Artefakten in der ESNM–Rekonstruktion deutlich geringer, als in dem Bild aus der gefilterten Rückprojektion. Besonders deutlich wird dies in der unteren Hälfte des Hirns.
Die ESNM–Rekonstruktion der Brust zeigt ein wesentlich geringeres Hintergrundrauschen als die entsprechende Rekonstruktion aus Cleveland. Durch dieses geringere Rauschen hebt sich der kleine Tumor (der kleine blaue Fleck neben der größeren, gelben Struktur) wesentlich deutlicher vom Hintergrund ab. Auf einer Grauwertskala war dieser Tumor in dem Bild aus der gefilterten Rückprojektion kaum noch wahrnehmbar.
In Abb. 5.14c und d soll die Auswirkung der Veränderung von γ und ρ anhand des CONTRAST–Phantoms gezeigt werden. In Abb. 5.14c wurde $\gamma = 0.0001$, $\rho = 0.0009$ und in Abb. 5.14d $\gamma = 0.0007$, $\rho = 0.0018$ gewählt.

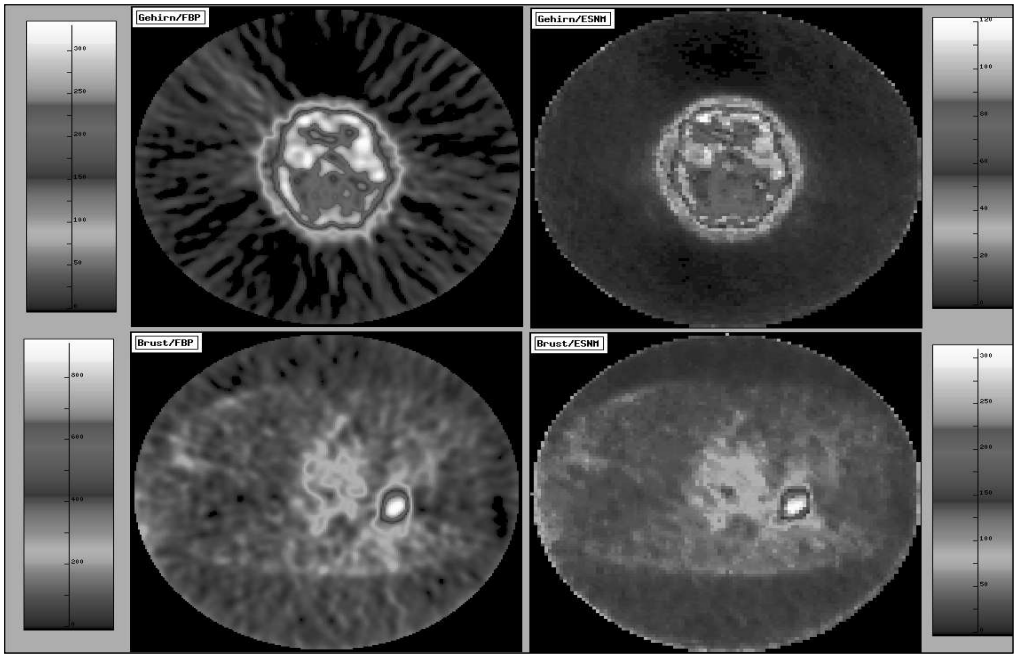

Abbildung 5.15: Die obere Reihe zeigt Rekonstruktionen aus den Daten einer Gehirnuntersuchung, die untere die Untersuchung einer Lunge. Links sind jeweils Rekonstruktionen aus der derzeitigen klinischen Praxis, rechts Rekonstruktionen mit dem ESNM–Verfahren zu sehen.

Wie zu Erwarten führt eine Verkleinerung von ρ zu einem höherem Rauschen in der Rekonstruktion. Dies ist nicht nur durch den Vergleich von Abb. 5.14c und Abb. 5.8b zu erkennen, sondern geht auch aus Tabelle 5.3 hervor.
Eine Vergrößerung von γ führt hingegen dazu, daß die Rekonstruktion näher an die a priori Information herankommt. In Abb. 5.14d äußert sich dies vor allem dadurch, daß die Konturen der Peaks deutlicher hervortreten. In gewisser Weise mag Abb. 5.14d dem Auge angenehmer erscheinen als die Rekonstruktion in Abb. 5.8b. Wie Tabelle 5.1 jedoch offenbart, sind die Fehler dieses Bildes größer als bei der früheren ESNM–Rekonstruktion des CONTRAST–Phantoms.
Um zu untersuchen, welche Auswirkung die Verwendung verschiedener a priori Information hat, wurde das in Abb. 5.16a gezeigte PEAK–Phantom verwendet. Abb. 5.16c zeigt eine ESNM–Rekonstruktion mit $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.001$, wobei als a priori Bild die grüne Kreisscheibe des Originalbildes, ohne den Peak, verwendet wurde. Wie zu Erwarten erscheint die große Kreisscheibe in der Rekonstruktion relativ glatt, und mit den richtigen Dichtewerten, während der Peak sehr stark gedämpft wird.
In Abb. 5.14d ist eine ESNM–Rekonstruktion mit $\gamma = 0.0001$ und $\rho = 0.0005$ gezeigt, wobei als a priori Information das in Abb. 5.14c gezeigte Bild eingesetzt wurde. Die a priori Information enthält also im wesentlichen nur den

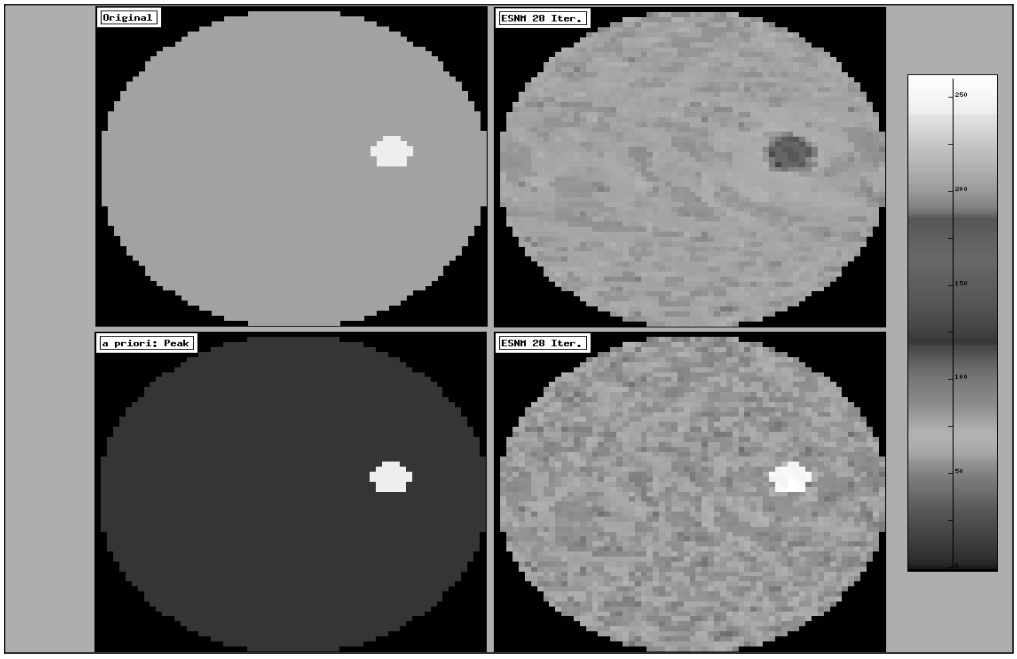

Abbildung 5.16: Auswirkung von verschiedenen a priori Informationen. a.) Oben links: Original; b.) Oben rechts: 28 Iterationen des ESNM–Verfahren wobei als a priori Information der Grundkreis verwendet wurde. c.) Unten links: a priori Information über den Peak; d.) Unten rechts: 28 Iterationen des ESNM–Verfahrens mit c als a priori Bild.

Peak, der im Original vorkommt. Dieser Peak ist in der Rekonstruktion dann auch gut getroffen worden. Interessanter Weise wird aber auch der Dichtewert des großen Kreises gut rekonstruiert. Das dieser Kreis stärker von Rauschen überlagert ist, als der in der Rekonstruktion von Abb. 5.14b, wird zum Teil am kleineren Wert für ρ, zum anderen Teil an der falschen a priori Information über diesen Grundkreis liegen.
In Paragraph 3.5 wurde bereits von der Verwendung des direkten SOR–Newton-Verfahrens abgeraten. Ein Vergleich von Bild 5.17 und 5.18 zeigt die Begründung hierfür. Während die Rekonstruktionen der ersten Iterierten des ESNM–Verfahrens mit Startwert $f^0 = 1_n$ sehr glatt sind, und sich kleinere Details erst nach und nach herausbilden, sind die ersten Rekonstruktionen des direkten SOR–Newton–Verfahrens von starkem Rauschen überlagert, das dann nur noch sehr langsam reduziert wird. Die Glattheitserhaltende Wirkung des in Paragraph 5.2 betrachten EM–Verfahrens mit Startwert 1_n scheint also auch auf das ESNM–Verfahren überzugehen, ist jedoch nicht alleine für die Glattheit der berechneten Bilder verantwortlich.
Abschließend sei gesagt, daß man das ESNM–Verfahren, mit Bildern aus der gefilterten Rückprojektion als a priori Information, als eine geschickte Kombination der gefilterten Rückprojektion und eines modifizierten EM–Verfahrens

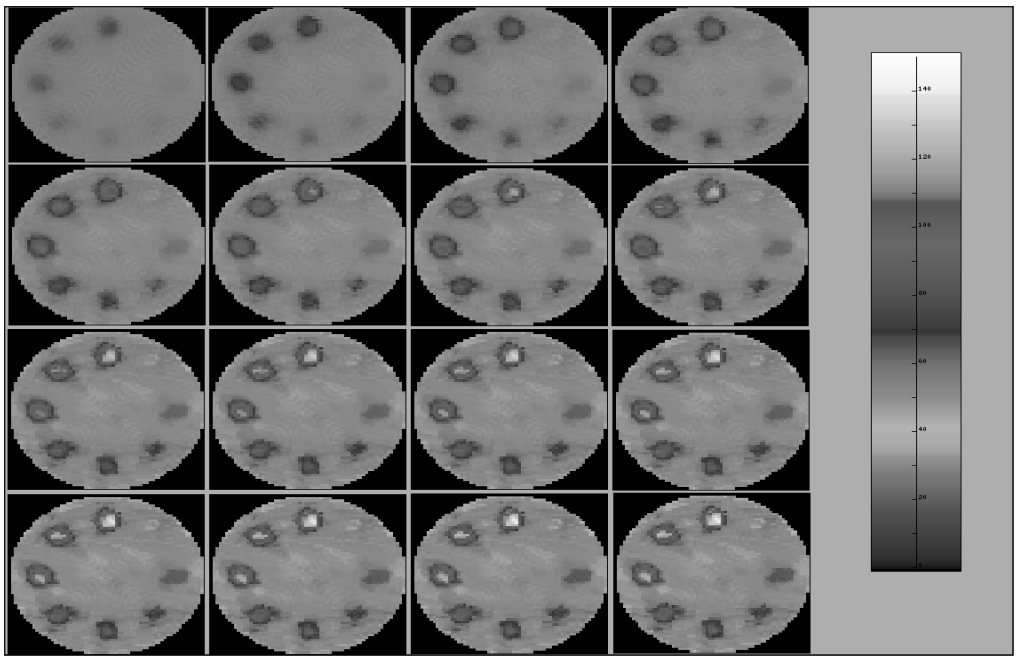

Abbildung 5.17: Konvergenzverhalten des ESNM–Verfahrens. In der gewohnten Leserichtung sind die ersten 16 Iterationen des Verfahrens abgebildet.

auffassen kann. Diese Kombination scheint Vorteile beider Verfahren auszunutzen, um so die recht guten Bilder dieses Paragraphen zu erzeugen.

An dieser Stelle möchte ich mich sehr herzlich bei meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Natterer, für die gute Betreuung während der Arbeit bedanken. Herrn Prof. Dr. Rüschendorf danke ich für die Übername des Koreferats. Viele Anregungen verdanke ich auch zahlreichen Diskussionen mit Kollegen am Fachbereich.
Insbesondere danke ich an dieser Stelle auch Herrn Dipl.–Math. F. Wübbeling für die Bereitstellung seiner Display–Software, welche die Analyse und Darstellung der numerischen Ergebnisse sehr vereinfacht hat, sowie Dr. R. Muzic für die Bereitstellung von Realdaten und die Kommentierung der hieraus berechneten Bilder.

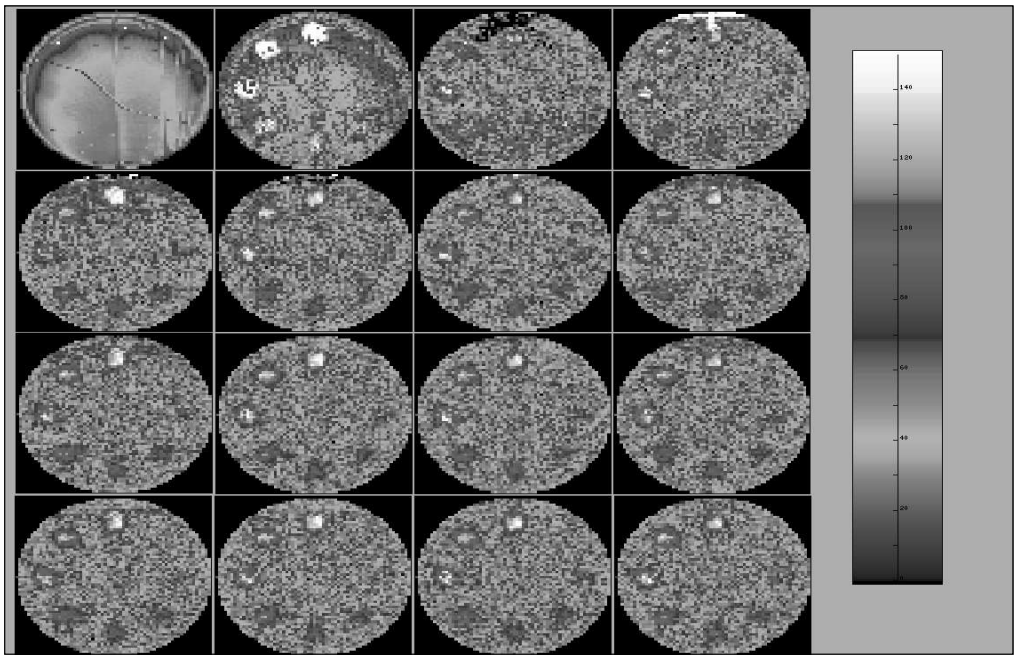

Abbildung 5.18: Konvergenzverhalten des direkten SOR–Newton–Verfahrens. In der gewohnten Leserichtung sind die ersten 16 Iterierten des direkten SOR–Newton–Verfahrens abgebildet.

Literaturverzeichnis

[1] R. A. Boyles.
On the Convergence of the EM Algorithm.
Journal of Royal Statistical Society Series B, 45:47–50, 1983.

[2] T. F. Budinger, G. T. Gullberg, and R. H. Huesman.
Emission Computed Tomography.
In G.T. Herman, editor, *Image Reconstructions From Projections, Implementation and Applications*, chapter 5, pages 147–246. Springer, 1982.

[3] Y Censor and J Segman.
On the block–Iterative Entropy Maximization.
Journal of Information & Optimization Sciences, 25(3):275–291, 1987.

[4] R. Clack, D. Townsend, and M. Defrise.
An Algorithm for Three–Dimensional Reconstruction Incorporating Cross–Plane Rays.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 8(1):32–42, März 1989.

[5] J. G. Colsher.
Fully Three–Dimensional Positron Emission Tomography.
Phys. Med. Biol., 25(1):103–115, 1980.

[6] M. M. Daube–Witherspoon and G. Muehllehner.
An Iterative Image Space Reconstruction Algorithm Suitable for Volume ECT.
IEEE Transactions Medical Imaging, 5(2):61–65, Juni 1986.

[7] A. R. De Pierro.
On the Convergence of the Iterative Image Space Reconstruction Algorithm for Volume ECT.
IEEE Transactions Medical Imaging, 6(2):174–175, Juni 1987.

[8] A. R. De Pierro.
Multiplicative Iterative Methods in Computed Tomography.
In G. T. Herman, A. K. Louis, and F. Natterer, editors, *Mathematical Methods in Tomography*, pages 167–186. Springer, 1990.
Proceedings, Oberwohlfach.

[9] A. R. De Pierro.

Nonlinear Relaxation Methods for Solving Symmetric Linear Complementarity Problems.
J. Optim. Theory Appl., 64:87–99, 1990.

[10] M. Defrise.
Possible criteria for choosing the number of iterations in some iterative reconstruction methods.
In M. A. Viergever and A. Todd-Pokropek, editors, *Mathematics and Computer Science in Medical Imaging*, pages 293–303. NATO ASI Series, Vol. F39, Springer, 1988.

[11] M. Defrise, D. W. Townsend, and R. Clack.
Three–Dimensional Image Reconstruction from Complete Projections.
Phys. Med. Biol., 34(5):573–587, 1989.

[12] M. Defrise, D. W. Townsend, and Deconinck F.
Statistical Noise in Three–Dimensional Positron Tomography.
Phys. Med. Biol., 35(1):131–138, 1990.

[13] A. P. Dempster, N. M. Larid, and D. B. Rubin.
Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm.
Journal of Royal Statistical Society, 39:1–38, 1977.

[14] P.J. ELL and B. L. Holman, editors.
Computed Emission Tomography.
Oxford Univerity Press, 1982.

[15] M. Fisz.
Wahrscheinlichkeitsrechnung und mathematische Statistik.
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1973.

[16] S. Geman and McClure D.
Statistical Methods for Tomographic Image Reconstruction. ISI Tokio session.
Bull. Int. Statist. Inst., LII(4):5–21, 1987.

[17] S. Geman and D. McClure.
Bayesian image analysis:An application to single photon emission tomography.
In *Proc. Statist. Comput. Sect.*, pages 12–18. Amer. Statist. Assoc., 1985.

[18] R. Gordon, R. Bender, and G. T. Herman.
Algebraic Reconstruction Techniques (ART) for Three–Dimensional Electron Microscopy and X–Ray Photography.
J. Theoret. Biol., 29:471–481, 1970.

[19] P. J. Green.
Bayesian Reconstructions from Emission Tomography Data Using a Modified EM Algorithm.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 9(1):84–93, März 1990.

[20] W. Hackbusch.

Iterative Lösung großer schwach besetzter Gleichungssysteme.
B. G. Teubner, 1991.

[21] S. Helgason.
The Radon Transform.
Birkhauser, 1980.

[22] T. Herbert and R. Leahy.
A Generalized EM Algorithm for 3–D Bayesian Reconstruction from Poisson Data Using Gibbs priors.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 8(2):194–202, Juni 1989.

[23] G. T. Herman, editor.
Image Reconstruction from Projections, Implementation and Applications.
Springer, 1979.

[24] G. T. Herman.
Image Reconstruction from Projections, The Fundamentals of Computerized Tomography.
Academic Press, 1980.

[25] G. T. Herman and D. Odhner.
Performance Evaluation of an Iterative Image Reconstruction Algorithm for Positron Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 10(3):336–346, September 1991.

[26] H. Heuser.
Lehrbuch der Analysis, Teil 2.
B. G. Teubner, 1983.

[27] H. Heuser.
Lehrbuch der Analysis, Teil 1.
B. G. Teubner, 1984.

[28] H. Hurwitz Jr.
Entropy reduction in Bayesian analysis of measurements.
Phys. Rev., A(12):698–706, 1975.

[29] A. C. Kak and M. Slaney.
Principles of Computerized Tomographic Imaging.
IEEE Press, 1988.

[30] P. E. Kinahan, J. G. Rogers, R. Harrop, and R. R. Johnson.
Three–Dimensional Image Reconstruction in Object Space.
IEEE Transactions on Nuclear Science, 35(1):635–638, Februar 1988.

[31] M. Koecher.
Lineare Algebra und analytische Geometrie.
Springer, 1985.

[32] K. Krickeberg and H. Ziezold.
Stochastische Methoden.
Springer, 1979.

[33] K. Lange.
Convergence of EM Image Reconstruction Algorithm with Gibbs Smoothing.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 9(4):439–446, December 1990.

[34] K. Lange, M. Bahn, and R. Little.
A Theoretical Study of Some Maximum Likelihood Algorithms for Emission and Transmission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 6(3):106–114, Juni 1987.

[35] K. Lange and R. Carson.
EM Reconstruction Algorithms for Emission and Transmission Tomography.
Journal of Computer Assisted Tomography, 8(2):306–316, April 1984.

[36] C. L. Lawson and R. J. Hanson.
Solving Least Squares Problems.
Prentice–Hall, 1974.

[37] S. Z. Lee, J. B. Ra, S. K. Hilal, and Z. H. Cho.
True Three–Dimensional Cone–Beam reconstruction (TTCR) algorithm.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 8(4):304–312, Dezember 1989.

[38] A. Lent.
A Convergent Algorithm for Maximum Entropy Image Restoration with a Medical X–Ray Application.
In R. Shaw, editor, *Image Analysis and Evaluation*, pages 247–249. Society of Photographic Scientists and Engineers, 1977.

[39] R. D. Levine and M. Tribus, editors.
The Maximum Entropy Formalism.
MIT Press, 1987.

[40] E. Levitan and G. T. Herman.
A Maximum *a posteriori* Probability Expectation Maximization Algorithm for Image Reconstruction in Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 6(3):185–192, September 1987.

[41] TK Lewellen, AN Bice, and RL Harrison.
Alternative Discriminator Design for the Scanditronix SP3000 Time–of–Flight Positron Emmission Tomograph.
IEEE Transactions on Nuclear Science, 35(1):726–729, 1988.

[42] TK Lewellen, AN Bice, RL Harrison, MD Pencke, and JM Link.
Performance Measurements of the SP3000/UW Time–of–Flight Positron Emission Tomograph.
IEEE Transactions on Nuclear Science, 35(1):665–669, 1988.

[43] TK Lewellen, RL Harrison, and AN Bice.
An Experimental Evaluation of the Effect of Time–of–Flight Information in Image Reconstructions for the Scanditronix/PETT Electronics

SP3000 Positron Emission Tomograph – Preliminary Results.
IEEE Transactions on Nuclear Science, 36(1):1095–1099, Februar 1989.

[44] J. Llacer and E. Veklerov.
Feasible Images and Practical Stopping Rules for Iterative Algorithms in Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 8(2):186–193, Juni 1989.

[45] A. K. Louis.
Inverse und schlecht gestellte Probleme.
Teubner, 1989.

[46] D. G. Luenberger.
Introduction to Linear and Nonlinear Programming.
Addison–Wesley, 1973.

[47] H. N. Mülthei and B. Schorr.
On Properties of the Iterative Maximum Likelihood Reconstruction Method.
Math. Methods Apll. Sci., 11(3):331–342, 1989.

[48] F. Natterer.
The Mathematics of Computerized Tomography.
B. G. Teubner, 1986.

[49] F. Natterer.
Numerical Treatment of Ill–Posed Problems.
In G. Talenti, editor, *Inverse Problems*, pages 142–167. Springer, 1986.
Montecatini Terme 1986.

[50] J. Nunez and J. Llacer.
A Fast Bayesian Reconstruction Algorithm for Emission Tomography with Entropy Prior Converging to feasible images.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 9(2):159–171, Juni 1990.

[51] J. Ortega and W. Rheinboldt.
Iterative Solution of Nonlinear Equations in several Variables.
Academic Press, 1970.

[52] J. Raczek.
Optimierung durch Simulated Annealing.
Master's thesis, Universität Münster, 1991.

[53] N. Rajeevan, K Rajgopal, and G. Krishna.
Vector–Extrapolated Fast Maximum Likelihood Estimation Algorithms for Emission Tomography.
IEEE Transaction on Medical Imaging, 11(1):9–19, März 1992.

[54] M. V. Ranganath, A. P. Dhawan, and Mullani N.
A Multigrid Expectation Maximization Reconstruction Algorithm for Positron Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 7(4):273–278, Dezember 1988.

[55] R. T. Rockafellar.
Convex Analysis.
Princeton University Press, 1970.

[56] J. G. Rogers, R. Harrop, and P. E. Kinahan.
The Theory of Three–Dimensional Image Reconstructiom for PET.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 6(3):239–243, 1987.

[57] E.-P. Rührnschopf.
Maximum Likelihood Reconstruction for SPECT. A Critical Review of Publications.
Technical report, Siemens, Medizinische Technik, GG 41, Februar 1991.

[58] P. Schmidlin.
Iterative Seperation of Sections in Tomographic Scinitigrams.
Nuclear–Medizin, 11:1–16, 1972.

[59] P. Schmidlin.
Iterative Verfahren für dei Emissionstomographie.
Der Nuklearmediziner, 3(13):155–158, 1990.

[60] H. R. Schwarz.
Numerische Mathematik.
B. G. Teubner, 1986.

[61] B. Setzepfandt.
Ein auf der Orlovschen Inversionsformel basierender Algorithmus zur 3D–PET.
Master's thesis, Universität Münster, 1989.

[62] L. A. Shepp and Y. Vardi.
Maximum Likelihood Reconstruction for Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 1(2):113–122, Oktober 1982.

[63] B. W. Silverman, M . C. Jones, and D. W. Wilson, J. D. Nychka.
A Smoothed EM Approach to Indirect Estimation Problems, with Particular Reference to Stereology and Emission Tomography.
Journal of Royal Statistical Society, 52(2):271–324, 1990.

[64] D. L. Snyder and M. I. Miller.
The Use of Sieves to Stabilize Images Produced with the EM Algorithm for Emission Tomography.
IEEE Transactions on Nuclear Science, 32(5):3864–3872, Oktober 1985.

[65] D. L. Snyder, M. I. Miller, Lewis J. Thomas Jr., and David G. Politte.
Noise and Edge Artifacts in Maximum–Likelihood Reconstructions for Emission Tomography.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 6(3):228–238, September 1987.

[66] O. N. Strand.
Theory and Methods related to the Singular–Function Expansion and Landweber's Iteration for Integral Equations of the first Kind.
SIAM Journal of Numerical Analysis, 11(4):798–825, September 1974.

[67] E. Tanaka.
A Fast Reconstruction Algorithm for Stationary Positron Emission Tomography Based on a Modified EM Algorithm.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 6(2):98–105, Juni 1987.

[68] E. Tanaka.
Improved Iterative Image Reconstruction with Automatic Noise Artifact Supression.
IEEE Transactions on Medical Imaging, 11(1):21–27, März 1992.

[69] M. V. Tsupko-Sitnikov.
A New Robust Iterative Technique for Inverse Problems of Emission Tomography.
Preprint 1990.

[70] Y. Vardi, L. A. Shepp, and L. Kaufman.
A Statistical Model for Positron Emission Tomography.
Journal of the American Statistical Association, 80(389):8–37, März 1985.

[71] W. Wolfgang.
Einführung in die Theorie der Distributionen.
Bibliographisches Institut AG, 1974.

[72] C. F. J. Wu.
On the Convergence Properties of the EM Algorithm.
The Annals of Statistics, 11(1):95–103, 1983.

Index

a posteriori Wahrscheinlichkeit, 24
a priori Information, 24, 37, 41
Abtastgeometrie, 6
Abtastgeometrie
    standard parallele, 6, 11
analytische Methoden, 9
ART–Verfahren, 55
ART–Verfahren
    als digitale Filterung, 55
    Konvergenz des, 55
    numerische Ergebnisse, 64
Attraktor, 29

Bayessche Methoden, 24
Bayesschen Formel, 24
Bayesscher Prior, 25
Bildbeurteilung, 59

Countrate, 20
Countrate
    Erhaltung der, 48, 51
    Erhaltung der , 20

Datenfehler, 59
Datensimulation, 59
Dichtefunktion, 4
direktes SOR–Newton–Verfahren
    Iteration, 45
    Rechenaufwand für, 45
diskreter Ansatz, 8
Diskretisierung, 10
Dämpfung, 4

E–Schritt, 18
Einzelschrittverfahren, 28
EM–Search–Algorithmus, 51
EM–Verfahren, 15
EM–Verfahren
    allgemeines , 12
    Fixpunkt des, 22
    Frequenzverhalten des, 61
    Iteration, 19
    Matrixdarstellung des, 22
    Mehrgitter–Variante, 52
    Modifikationen des, 47
    Monotonie des, 20
    numerische Ergebnisse, 60
    Optimierungsproblem des, 21
    und exakte Lösung, 21
Emissionstomographie, 4
Emissionstomographie
    Modell für, 12
EMS–Verfahren, 52
EMS–Verfahren
    numerische Ergebnisse, 64
Energiefunktion, 25
Entropie–Prior, 51
ESNM–Verfahren, 27
ESNM–Verfahren
    Eindeutigkeit, 68
    Implementation, 37
    innere Iteration, 30, 40
    Konstruktion, 30
    Konvergenz des, 33, 34, 37
    Konvergenzverhalten des, 67
    M–Schritt, 30
    mit realen Daten, 71
    numerische Ergebnisse, 66
    Positivitätsbedingung, 31, 41
    Positivitätserhaltung, 32
    Rechenaufwand, 32
    Wirkung der Parameter, 73
    Wirkung des a priori Bildes, 74

FMAPE–Verfahren, 51

Gamma–Prior, 50

gefilterte Rückprojektion, 9

ISRA–Verfahren, 54
Iterationsparameter
    des ESNM–Verfahrens, 39
    Wahl der, 41, 42
Iterativer Prozeß, 28

Koinzidenz, 5
konvexe Funktion
    Abschluß einer, 33
    Fortsetzung, 33
    geeignete, 33
    Minimum einer, 34
Kopf–Phantom, 71
Korrelation zwischen Pixeln, 24

Landweber–Verfahren, 55
Landweber–Verfahren
    als digitales Filter, 56
    Konvergenz des, 56
    numerische Ergebnisse, 64
Likelihood–Funktion, 14
Log–a posteriori–Funktion, 25, 26
Log–Likelihood–Funktion, 15, 18
Log–Likelihood–Funktion
    Ableitungen der, 15
    Maximum der, 20
    Ableitungen der, 19
    Konkavität der, 15, 19
lokale Standardabweichung, 60

M–Schritt, 18
MAP–EM–Verfahren, 25
MAP–EM–Verfahren
    E–Schritt des, 25
    Konvergenz des, 37
    M–Schritt des, 26
MAP–GEM–Algorithmus, 36
MAP–Verfahren
    numerische Ergebnisse, 64
MAP-Verfahren, 48
MART–Verfahren, 54
Maximum–Likelihood EM, 12
Meßwerte, 14
Moore–Penrose, 56

Multiplikative Verfahren, 53

Newton–Verfahren, 27
Normierungsbedingung, 10
Nuklearmedizin, 4
Numerische Ergebnisse, 59

OGMA–Verfahren, 53
OSL–Verfahren, 49
OSL–Verfahren
    numerische Ergebnisse, 64

Penalty–Funktion
    Ableitungen der, 40
    Definitheit der, 38
    Form einer, 37
    Implementation der, 39
    partielle Ableitungen, 38
    Voraussetzungen für, 33
PET, 6
Poisson–Zufallsvariable, 12
Potentialfunktion, 25

R–Faktor, 28
Rückprojektion, 9
Radontransformation, 7
Radontransformation
    gedämpfte, 7
Rezessionsrichtung, 33
RIT–Verfahren, 56

scattering, 7
Schachbretteffekt, 24
Sieb, 52
Simulated Anealing, 57
SOR–Matrix, 29
SOR–Newton–Verfahren
    als Operator, 28
    im M-Schritt, 30
    Iteration, 28
    Konvergenz, 29
SPECT, 5
Standardgeometrie, 11
Systemmatrix
    Berechnung der, 8
    Dimension der, 11
    normierung der, 10

Lebenslauf und Bildungsgang

Name	Bernd Setzepfandt
geboren	am 05.12.1960 in Schwelm
Eltern	Rudi Setzepfandt Helga Setzepfandt
1967 – 1971	Besuch der Gemeinschaftsschule Wassermaus in Ennepetal
1971 – 1976	Besuch der Hauptschule Friedenshöhe in Ennepetal
28.06.1976	Hauptschulabschluß mit Qualifikationszusatz
1976 – 1980	Ausbildung zum Chemielaboranten bei der Fa. S. Jacob in Ennepetal. Dabei Besuch der Cuno–Berufsschule in Hagen
28.01.1980	Abschlußzeugnis
31.01.1980	Prüfungszeugnis
1980 – 1985	Anstellung als Chemielaborant bei der Fa. S. Jacob in Ennepetal
1980 – 1982	Besuch der städtischen Abendrealschule in Remscheid
13.07.1982	Fachoberschulreife
1982 – 1984	Besuch des städtischen Abendgymnasiums in Wuppertal
13.12.1984	Abitur
SS 1985	Aufnahme des Studiums der Mathematik an der Westf. Wilh. Univ. Münster
20.10.1987	Vordiplom in Mathematik
01.03.1988 – 30.04.1989	Studentische Hilfskraft am Institut für Forschung und Lehre in der Primarstufe der WWU Münster
01.01.1989	Beginn der Diplomarbeit
24.04.1990	Diplom in Mathematik
01.06.1990	Beginn der Dissertation
seit 02.05.1990	Wissenschaftl. Mitarbeiter am Institut für Numerische und Instrumentelle Mathematik der WWU Münster