
Inverse Probleme mit unbeschränktem Operator: Theorie und Anwendung in der Elektronen - Tomographie

Dissertation

zur Erlangung des Grades des
Doktors der Naturwissenschaften
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultäten
der Universität des Saarlandes

vorgelegt von
Holger Kohr

Saarbrücken, 2012

Tag des Kolloquiums:	24. Juli 2012
Dekan:	Univ.-Prof. Dr. M. Groves
Vorsitzender:	Univ.-Prof. Dr. J. Eschmeier
Berichterstatter:	Univ.-Prof. Dr. Dr. h. c. A. K. Louis
	Univ.-Prof. Dr. B. Hofmann
	Univ.-Prof. Dr. Th. Schuster
Akademischer Mitarbeiter:	Dr. A. Groh

Abstract

Let $\mathcal{X}$ and $\mathcal{Y}$ be Banach spaces and $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{Y}$ a linear operator with domain $\mathcal{D}(\mathcal{A})$. The main task in the current work is the inverse problem to determine a solution f of the equation

$$\mathcal{A}f = g$$

for given $g \in \mathcal{Y}$. In contrast to common prerequisites in inverse problems, it is assumed that $\mathcal{A}$ is unbounded, i.e., that the quantity

$$\|\mathcal{A}\|_{\mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} = \sup_{0 \neq f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})} \frac{\|\mathcal{A}f\|_{\mathcal{Y}}}{\|f\|_{\mathcal{X}}}$$

is not necessarily finite. The method of approximate inverse (AI) is proven to be applicable to such unbounded operators on Banach spaces if a mollifier meets certain conditions not required in the bounded case. It is additionally shown that the AI method is a regularization under certain constraints on the reconstruction kernel. Furthermore, this work presents an extension to the principle of feature reconstruction, where the application of a linear operator to the unknown solution is directly determined from the measured data.

Electron tomography (ET) is introduced in the current thesis as the main field of application for the AI technique. This imaging method strives to determine the three-dimensional structure of organic or anorganic material with the help of an electron microscope. The derivation of a linear mathematical model shows that the inverse problem can be reduced to two spatial dimensions. Reconstruction formulas are deduced by means of the AI method, and for particular mollifiers and choices of the regularization parameter, the regularization property is proven.

To verify the theoretical results, numerical reconstructions based on simulated data are presented. Several method parameters are investigated with respect to their influence on the quality of the resulting images. In addition, numerical examples for feature reconstruction show that derivatives can be computed in a stable manner directly from the data. The concluding results with real measured data demonstrate that the introduced AI method is superior compared to established methods since typical errors in the ET data are attenuated more effectively.

Kurze Zusammenfassung

Seien $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ Banachräume und $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y}$ ein linearer Operator mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A})$. Zentraler Gegenstand der Untersuchungen in dieser Arbeit ist das inverse Problem der Bestimmung einer Lösung f der Gleichung

$$\mathcal{A}f = g$$

für gegebenes $g \in \mathcal{Y}$. Entgegen der üblichen Voraussetzungen bei inversen Problemen wird davon ausgegangen, dass $\mathcal{A}$ unbeschränkt ist, d. h. dass die Größe

$$\|\mathcal{A}\|_{\mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} = \sup_{0 \neq f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})} \frac{\|\mathcal{A}f\|_{\mathcal{Y}}}{\|f\|_{\mathcal{X}}}$$

nicht notwendigerweise endlich ist. Es wird demonstriert, dass sich die Methode der approximativen Inversen (AI) auf unbeschränkte Banachraumoperatoren übertragen lässt, indem zusätzliche Bedingungen an den Mollifier gestellt werden, welche im Falle beschränkter Operatoren nicht erforderlich sind. Darüber hinaus wird nachgewiesen, dass die approximative Inverse ein Regularisierungsverfahren ist, sofern der Rekonstruktionskern gewisse Voraussetzungen erfüllt. Desweiteren stellt die vorliegende Arbeit eine Erweiterung der Methode zur Feature-Rekonstruktion vor, bei der die Anwendung eines linearen Operators auf die Lösung direkt aus den Messdaten berechnet wird.

Als Hauptanwendungsgebiet der AI-Methode wird die Elektronen-Tomographie (ET) eingeführt. Dabei handelt es sich um ein bildgebendes Verfahren, das mit Hilfe eines Elektronenmikroskops die dreidimensionale Struktur von organischen oder anorganischen Substanzen untersucht. Mit der Herleitung eines linearen mathematischen Modells wird deutlich, dass sich das inverse Problem auf zwei Raumdimensionen reduzieren lässt. Aus der AI-Methode für unbeschränkte Operatoren werden Rekonstruktionsformeln hergeleitet, und für konkrete Mollifier sowie gewisse Parameterwahlen wird die Regularisierungseigenschaft nachgewiesen.

Zur Verifikation der theoretischen Resultate werden numerische Ergebnisse präsentiert, die auf der Basis simulierter Messdaten entstanden sind. Verschiedene Verfahrensparameter werden im Hinblick auf ihren Einfluss auf die Qualität der Rekonstruktionsergebnisse untersucht. Zudem zeigen numerische Beispiele zur Feature-Rekonstruktion, dass Ableitungen der Lösung direkt aus den Messdaten stabil berechnet werden können. Die abschließenden Ergebnisse mit realen Messdaten demonstrieren, dass die eingeführte AI-Methode bessere Resultate liefert als etablierte Verfahren, da sie eine bessere Dämpfung der typischen Fehler in ET-Daten bewirkt.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	iii
1 Inverse Probleme mit unbeschränktem Operator	1
1.1 Unbeschränkte Operatoren	1
1.2 Das Verfahren der approximativen Inversen (AI)	10
1.2.1 AI in Banachräumen	11
1.2.2 AI in Hilberträumen	17
1.3 2d-Röntgen-Transformation (RT)	22
1.3.1 Analytische Eigenschaften	22
1.3.2 AI zur 2d-Röntgen-Transformation	27
2 Mathematische Modellierung der Elektronen-Tomographie (ET)	34
2.1 Wechselwirkung von Elektronen mit Materie	35
2.2 Wellenoptik	37
2.3 Detektion eines Elektrons	40
2.4 Approximationen	41
2.4.1 Linearisierung der Streuung	41
2.4.2 Linearisierung der Intensität	43
2.4.3 Behebung der Unterbestimmtheit	43
2.5 Gesamtmodell der Erzeugung eines Einzelbildes	43
2.6 Variation der Objektausrichtung	47
2.7 Mathematische Untersuchung des Vorwärtsmodells	48
3 Rekonstruktionsverfahren zur ET	54
3.1 Vereinfachtes Modell ohne Faltung	54
3.1.1 Rekonstruktionsformel und -algorithmus	54
3.1.2 Bestimmung eines Rekonstruktionskerns	59
3.2 Vollständiges Modell der ET	61
3.2.1 Rekonstruktionsformel und -algorithmus	61
3.2.2 Bestimmung eines Rekonstruktionskerns	61
3.3 Rekonstruktion von Features	64
4 Numerische Ergebnisse	66
4.1 Fraktionelle Ableitung	66
4.2 ET: Simulierte Daten	71

4.2.1	Vereinfachtes Modell ohne Faltung	74
4.2.2	Vollständiges ET-Modell	79
4.3	ET: Reale Messdaten	83
A	Notationen und Grundlagen	87
A.1	Notationen	87
A.2	Grundlagen	88
A.2.1	Fourier-Transformationen	88
A.2.2	Faltungen	91
A.2.3	Zwei Lemmata zur Röntgen-Transformation	92
A.2.4	Minkowski-Ungleichung für Integrale	93
B	Ergänzungen zu Kapitel 2	94
B.1	Wellenoptik: Berechnung der PSF	94
B.2	Streufeld am Detektor: dilatationsfreie Darstellung	96
C	Beweis von Satz 4.1	98
	Literaturverzeichnis	105

Einleitung

Viele wissenschaftliche Disziplinen befassen sich mit dem Problem, die Auswirkungen einer bestimmten Aktion oder die Entwicklung eines beobachteten Systems unter bekannten Voraussetzungen oder Anfangsbedingungen vorherzusagen. Dabei wird üblicherweise davon ausgegangen, dass die Mechanismen, welche das Resultat eines *realen* Experiments bestimmen, hinreichend genau theoretisch verstanden und durch mathematische Formeln beschreibbar sind. Das Ziel solcher Untersuchungen ist es folglich, *Beobachtungen* eines Phänomens anhand einer bekannten *Ursache* zu *simulieren*, ohne reale Experimente durchführen zu müssen.

Ist jedoch umgekehrt die Auswirkung eines solchen Phänomens durch Messungen beobachtbar, während deren Ursache unbekannt ist, spricht man von einem *inversen Problem*. Fragestellungen, die auf inverse Probleme führen, kommen in praktisch allen (natur)wissenschaftlichen Disziplinen vor. Die Grundbegriffe inverser Probleme, welche im Folgenden kurz erläutert werden, finden sich zusammen mit weiterführenden funktionalanalytischen Untersuchungen und Anwendungsbeispielen in den Büchern [Lou89, Hof99, EHN96].

Ein häufig synonym verwendeter Begriff ist derjenige des *schlecht gestellten Problems*, der sich vom gegenteiligen Begriff des *gut gestellten Problems* im Sinne von Hadamard [Had23] ableitet. Ein solches gut gestelltes Problem ist dadurch gekennzeichnet, dass es für alle (zulässigen) vorgegebenen „Daten“ *eindeutig lösbar* ist, und dass diese Lösung *stetig* von den Daten abhängt. Der Nachweis dieser Voraussetzungen und damit der Gutgestelltheit ist generell ein essentieller Bestandteil der mathematischen Untersuchung eines Problems. So widmet sich beispielsweise die Theorie partieller Differentialgleichungen intensiv der Frage, welche Voraussetzungen an die rechte Seite und die Nebenbedingungen garantieren, dass eine eindeutige Lösung in einem bestimmten Funktionenraum existiert, und ob sich die Norm der Lösung gegen die Norm der Eingabedaten abschätzen lässt. Ob ein Problem gut gestellt ist, hängt damit offenbar nicht nur vom mathematischen Modell des untersuchten Phänomens ab, sondern ebenso von den Annahmen an die Eingabedaten und die Lösung, die durch die Wahl der Räume getroffen werden. Darüber hinaus ist der Lösungsbegriff von Bedeutung, d. h. die Kriterien, welche ein Lösungskandidat erfüllen muss, um als Lösung angesehen zu werden.

Im Gegensatz zu Anfangs- oder Randwertproblemen bei Differentialgleichungen sind inverse Probleme typischerweise schlecht gestellt, wodurch sie theoretisch und numerisch schwieriger zu lösen sind. Das folgende Modellproblem zeigt die generellen Ursachen dieser Schlechtgestelltheit auf.

Es seien $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} : \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$ ein stetiger linearer Operator. Zu lösen ist die Gleichung

$$\mathcal{A}f = g \quad (1)$$

für ein gegebenes Element $g \in \mathcal{Y}$. Da im Allgemeinen $\mathcal{A}$ kein surjektiver Operator ist, existiert nicht für alle $g \in \mathcal{Y}$ eine Lösung f von (1). Um dieses Problem zu umgehen, wird das Ausgangsproblem umformuliert als Minimierungsaufgabe: zu bestimmen ist ein $f^\dagger \in \mathcal{X}$, so dass

$$J(f^\dagger; g) = \|\mathcal{A}f^\dagger - g\|_{\mathcal{Y}} \leq \|\mathcal{A}f - g\|_{\mathcal{Y}} \quad \text{für alle } f \in \mathcal{X}. \quad (2)$$

Es lässt sich zeigen, dass es einen solchen Minimierer des Residuums genau dann gibt, wenn $g \notin \overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})} \setminus \mathcal{R}(\mathcal{A})$ erfüllt ist. Dies ist gleichbedeutend damit, dass für Operatoren mit abgeschlossenem Bild stets eine Lösung zu (2) existiert.

Auch die Injektivität des Operators kann im Allgemeinen nicht vorausgesetzt werden, so dass die eindeutige Lösbarkeit beider Problemformulierungen nicht gegeben ist. Durch Einschränkung des Lösungsraums auf $\mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$, das orthogonale Komplement des Nullraumes, wird diese Eindeutigkeit erreicht. Dabei ist die Forderung $f^\dagger \in \mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$ äquivalent zur Eigenschaft von $f^\dagger$, unter allen Minimierern des Residuums minimale Norm zu besitzen [Lou89, Satz 3.1.1.].

Formal lässt sich nun ein Operator definieren, der eine rechte Seite g auf die entsprechende Lösung von (2) mit minimaler Norm abbildet. Diese *Moore-Penrose-Inverse* oder *verallgemeinerte Inverse* wird mit $\mathcal{A}^\dagger$ bezeichnet [Nas87, Abschnitt 3] und ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^\dagger : \mathcal{R}(\mathcal{A}) \oplus \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp &\longrightarrow \mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp, \\ g &\longmapsto f^\dagger, \end{aligned} \quad (3)$$

wobei $f^\dagger$ die Minimum-Norm-Lösung von (2) darstellt.

Die dritte Eigenschaft eines gut gestellten Problems, stetige Abhängigkeit der Lösung von der rechten Seite zu gewährleisten, hängt eng mit der Lösbarkeit zusammen. Nach Konstruktion ist die Moore-Penrose-Inverse $\mathcal{A}^\dagger$ genau dann ein beschränkter Operator, wenn das Bild von $\mathcal{A}$ abgeschlossen ist [Nas87, Bemerkung nach Theorem 5.1]. Folglich ist die Bedingung $\mathcal{R}(\mathcal{A}) = \overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})}$ die entscheidende Voraussetzung für die Gutgestellttheit des betrachteten Problems. Da jedoch in der überwiegenden Zahl der praktisch relevanten inversen Probleme genau diese Bedingung nicht erfüllt ist, werden inverse und schlecht gestellte Probleme häufig als identisch angesehen.

Die fehlende Stabilität der Lösung in Bezug auf die Daten ist nicht nur eine theoretische Eigenschaft, sondern äußert sich auch praktisch im Phänomen der *Fehlerverstärkung*: kennt man die rechte Seite g nur innerhalb einer (in realen Experimenten unvermeidlichen) Fehlertoleranz δ , so gibt es keine Möglichkeit, den Fehler in der Lösung $f^\dagger$ zu kontrollieren. Dieser Effekt lässt sich auch häufig in numerischen Approximationen an die Lösung beobachten. Um dennoch stabile Lösungsverfahren zu

finden, wird die Moore-Penrose-Inverse $\mathcal{A}^\dagger$ *regularisiert*, d. h. durch einen Operator ersetzt, der das Problem der Fehlerverstärkung abmildert. Formal ist eine *Regularisierung* eine Familie $(\mathcal{A}^\gamma)_{\gamma>0}$ von Operatoren, die zusammen mit einer geeigneten *Parameterwahl*

$$\gamma = \gamma(\delta, g^\delta), \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \gamma(\delta, g^\delta) = 0 \quad (4)$$

die Konvergenz

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\mathcal{A}^\dagger g - \mathcal{A}^\gamma g^\delta\|_X = 0. \quad (5)$$

sicher stellt. Dabei entspricht die Funktion $g^\delta \in \mathcal{Y}$ den gestörten Daten mit Fehlerschranke $\|g - g^\delta\|_Y < \delta$. Ein Regularisierungsverfahren hat somit die beiden diametralen Aufgaben, einerseits Datenfehler zu kompensieren und andererseits die Moore-Penrose-Inverse möglichst gut zu approximieren. Dies wird deutlich, wenn bei festem δ die Norm in (5) mit der Dreiecksungleichung abgeschätzt wird:

$$\|\mathcal{A}^\dagger g - \mathcal{A}^\gamma g^\delta\|_X \leq \|(\mathcal{A}^\dagger - \mathcal{A}^\gamma)g\|_X + \|\mathcal{A}^\gamma(g - g^\delta)\|_X.$$

Der erste Summand beschreibt den *Approximationsfehler* und konvergiert typischerweise gegen Null für $\gamma \rightarrow 0$. Der zweite Term hingegen stellt den *Datenfehler* dar und strebt für $\gamma \rightarrow 0$ gegen $+\infty$. Für die richtige Parameterwahl $\gamma = \gamma(\delta, g^\delta)$ ist es also entscheidend, beide Fehlerarten möglichst genau zu quantifizieren und daraus abzuleiten, für welche Wahl von γ der Gesamtfehler minimal ist. Dieser Problematik widmet sich ein eigener Forschungszweig, der eine Reihe von a-priori- und a-posteriori-Strategien hervorgebracht hat, siehe beispielsweise [Lou89, Abschnitt 3.5]. In dieser Arbeit wird jedoch auf dieses Thema nicht näher eingegangen. Ein weit verbreitetes Regularisierungsverfahren ist die *Methode von Tikhonov-Phillips* [Lou89, Abschnitt 4.2], welche sich im einfachsten Fall schreiben lässt als

$$f^\gamma = (\mathcal{A}^* \mathcal{A} + \gamma \text{id}_X)^{-1} \mathcal{A}^* g$$

mit Regularisierungsparameter $\gamma > 0$. Die so gewonnene Lösung ist ein Minimierer des regularisierten Funktional [RT09, Beispiel 5.1]

$$J^\gamma(f; g) = \|\mathcal{A}f - g\|_Y^2 + \gamma \|f\|_X^2.$$

Die oben getroffene Annahme, dass $\mathcal{A}$ ein *beschränkter* linearer Operator sei, ist in diesem Zusammenhang keine wesentliche Voraussetzung. Vielmehr lassen sich die Konzepte der orthogonalen Zerlegung, der Moore-Penrose-Inversen und der Regularisierung ebenso für den Fall eines *unbeschränkten linearen Operators*

$$\mathcal{A} : X \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow Y$$

übertragen, der im Gegensatz zu einem beschränkten Operator nicht auf ganz $\mathcal{X}$ definiert ist. Allerdings ist die Literatur hierzu noch recht überschaubar. Erste funktionalanalytische Grundlagen zu Moore-Penrose-Inversen unbeschränkter Operatoren auf Banach- und Hilberträumen finden sich in [Nas87]. Publikationen zu inversen Problemen mit unbeschränktem Operator behandeln zumeist eine konkrete Fragestellung, beispielsweise die fraktionelle Ableitung von univariaten Funktionen zur Modellierung viskoelastischer Systeme [Fen96] oder das Cauchy-Problem zur Helmholtz-Gleichung, das bei der Konstruktion von Lasern eine Rolle spielt [RR06]. Eine systematische Regularisierungstheorie und Parameterwahlstrategien auf Hilberträumen werden in den beiden Artikeln [RT09] und [HMW09] hergeleitet. Eine entscheidende Rolle in jenen beiden Arbeiten spielt das Funktionalalkül von $\mathcal{AA}^*$ bzw. $\mathcal{A}^*\mathcal{A}$ [EHN96], mit dessen Hilfe eine Klasse von Regularisierungsverfahren

$$f^\gamma = \phi^\gamma(\mathcal{A}^*\mathcal{A})\mathcal{A}^*g \quad (6)$$

definiert wird, vgl. [RT09, Gleichung (5.1)]. Offenbar zählt die klassische Methode von Tikhonov-Phillips zu dieser Familie. Für Verfahren dieses Typs lassen sich Fehlerabschätzungen und Konvergenzraten in Abhängigkeit von einer *Quellenbedingung*, d. h. einer angenommenen (Glattheits-)Eigenschaft der exakten Lösung, nachweisen [HMW09]. Auch eine Erweiterung dieser Ergebnisse auf Banachräume und nichtlineare Operatoren [BO04, HKPS07] ist mittlerweile gelungen.

In dieser Arbeit kommt die *approximative Inverse* [LM90] als Regularisierungsmethode zum Einsatz. Sie ist flexibler bezüglich der erwünschten Glättung der Lösung, lässt sich jedoch nicht ohne Weiteres in der Form (6) schreiben, so dass sich gewisse Ergebnisse nicht direkt übertragen lassen. Dennoch ist es möglich, die approximative Inverse auch für unbeschränkte Operatoren zu formulieren und grundlegende Resultate wie Regularisierungseigenschaft, Invarianzen oder die Berechnung von Rekonstruktionskernen herzuleiten. Die grundlegende Idee dieser Methode ist es, eine Approximation

$$f^\gamma(x) = \langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}}$$

an die gesuchte Lösung f zu berechnen, wobei der *Mollifier* δ_x^γ als Näherung an die δ -Distribution angesehen werden kann. Durch Bestimmung eines *Rekonstruktionskerns* ψ_x^γ als Lösung von

$$\mathcal{A}^*\psi_x^\gamma = \delta_x^\gamma$$

kann die approximative Lösung gemäß

$$f^\gamma(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y}}$$

aus den Daten $g = \mathcal{A}f$ berechnet werden, was durch die elementare Rechnung

$$f^\gamma(x) = \langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}} = \langle f, \mathcal{A}^*\psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}} = \langle \mathcal{A}f, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y}} = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y}}$$

bewiesen wird. Dieses allgemeine Konzept kann in Hilberträumen eingesetzt und ebenso auf Banachräume erweitert werden, indem Skalarprodukte $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X}}$ durch Bilinearformen $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}}$ ersetzt werden. Die Berechnung von Rekonstruktionskernen und eine Regularisierungstheorie [SS10] sowie das Prinzip der Ordnungsoptimalität und die Erweiterung zur Feature-Rekonstruktion [Lou11] sind in der jüngeren Literatur gut untersucht. Die approximative Inverse findet erfolgreich Anwendung in vielen praktisch relevanten inversen Problemen, die von der klassischen Computer-Tomographie über elektromagnetische Streuprobleme bis hin zur Populationsbiologie reichen [Lak10, HL12, LRSS11, Lou11, GKW11, SQ05, KL11]. In dieser Arbeit wird erstmals eine Erweiterung des Verfahrens auf unbeschränkte Operatoren vorgestellt und Regularisierungseigenschaften nachgewiesen. Dabei zeigt sich, dass lediglich etwas stärkere Bedingungen an den frei wählbaren Mollifier gestellt werden müssen als im Fall beschränkter Operatoren.

Als zentrales Anwendungsgebiet der Methode für unbeschränkte Operatoren wird die *Elektronen-Tomographie* (ET) vorgestellt, bei der es sich um ein bildgebendes Verfahren handelt, dessen mathematisches Modell demjenigen der klassischen Computer-Tomographie ähnelt. Sie wird vor allem in den Biowissenschaften und den Materialwissenschaften eingesetzt, wobei zwischen diesen beiden Gebieten gravierende Unterschiede in den physikalischen Rahmenbedingungen bestehen. In ersterem sind Objekte nahezu transparent, so dass einerseits ein lineares Modell eine sehr gute Approximation an die realen Bedingungen darstellt. Andererseits ist aber der Kontrast gering, wodurch sich stark verrauschte Bilder ergeben. In den Materialwissenschaften hingegen sind typische Kontrastwerte wesentlich höher, was jedoch auch zu Mehrfachstreuung und damit zu Nichtlinearitäten führt, die nicht mehr vernachlässigt werden können. Aufgrund dieser Unterschiede konzentriert sich diese Arbeit auf das erstgenannte Anwendungsgebiet.

Zur Bildgebung wird in der ET ein *Transmissions-Elektronenmikroskop* (TEM) verwendet, in dem die drehbar gelagerte Probe einem Elektronenstrahl ausgesetzt wird und die transmittierten Elektronen auf einem Schirm registriert werden. Die entstehenden Messungen sind eine Kombination aus Absorptions- und Beugungsmustern desselben Objekts bei variierender Durchstrahlungsrichtung. Mathematisch lässt sich dieser Vorgang als Kombination aus Integralen entlang Geraden mit anschließender Faltung in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung modellieren [FÖ08]. Die Fourier-Transformierte des Faltungskerns kann im Frequenzraum explizit angegeben werden und hängt von einer Reihe experimenteller Parameter ab. Die am häufigsten eingesetzten Verfahren, die *gewichtete Rückprojektion* (WBP, engl. weighted back-projection) [Rad06], SIRT (engl. simultaneous iterative reconstruction technique) [KS01] und TxBR (engl. transform-based backprojection) [L⁺06], sind Methoden zur Rekonstruktion einer unbekannten Dichte aus der (verallgemeinerten) *Röntgen-Transformation*, d. h. aus Kurvenintegralen der Dichtefunktion. Die zusätzlich auftretende Faltung wird dabei nicht im Modell berücksichtigt, sondern dem Datenfeh-

ler zugerechnet und durch Vorbearbeitung der Daten versucht zu korrigieren. In dieser Arbeit hingegen wird die Faltung explizit als Teil des Vorwärtsmodells angesehen, was sich letztendlich in der Gestalt des Rekonstruktionskerns niederschlägt. Dies hat den Vorteil, dass die Inversion der Faltung, die für sich betrachtet ebenfalls schlecht gestellt ist, im Zuge der Rekonstruktion regularisiert und somit nicht als separater Schritt, sondern als Teil des gesamten Verfahrens der approximativen Inversen realisiert wird. Diese Kombination ehemals separater Rekonstruktionsschritte hat sich bereits in verschiedenen Szenarien als vorteilhaft bzgl. der Robustheit gegenüber Datenfehlern herausgestellt [HL12, Lou08, Lou10]. In diesem Fall ergibt sich dadurch allerdings die Notwendigkeit, die Funktionenräume anzupassen, auf denen die Herleitung der Methode basiert. Der Faltungskern besitzt keinen kompakten Träger, weshalb sich L^2 -Räume von Funktionen mit kompaktem Träger nicht zur Modellierung eignen. Als Operator zwischen L^2 -Räumen von Funktionen mit unbeschränktem Träger ist die Röntgen-Transformation jedoch kein beschränkter Operator [Sol76], wodurch sich die Notwendigkeit ergibt, das gesamte Rekonstruktionsproblem als inverses Problem mit unbeschränktem Operator zu betrachten. Der Aufbau der Arbeit folgt dem Prinzip, zunächst theoretische Grundlagen sowohl zu unbeschränkten Operatoren als auch zur ET darzustellen und diese anschließend in Rekonstruktionsverfahren und numerischen Ergebnissen zu konkretisieren. Kapitel 1 behandelt die Theorie unbeschränkter Operatoren auf Banach- und Hilberträumen und führt das Verfahren der approximativen Inversen allgemein ein. Es werden Bedingungen für die Regularisierungseigenschaft angegeben und bei speziellen Wahlen von Mollifiern nachgewiesen. Das Prinzip der Feature-Rekonstruktion wird behandelt, und am Beispiel der zweidimensionalen Röntgen-Transformation werden die zuvor erarbeiteten Konzepte näher beleuchtet. Kapitel 2 widmet sich der mathematischen Modellierung der Bildgebung in der Elektronen-Tomographie. Die einzelnen physikalischen Bausteine werden separat untersucht und mit Hilfe von Approximationen und Annahmen so weit vereinfacht, dass sie sich zu einem linearen Gesamtmodell zusammensetzen lassen. Der entstehende lineare Operator wird schließlich mathematisch analysiert. Kapitel 3 kombiniert die Resultate aus den beiden vorangehenden Kapiteln und leitet Rekonstruktionsformeln zur ET her. Dabei wird zunächst ein vereinfachtes Modell ohne Faltung betrachtet, anhand dessen die Regularisierungseigenschaft und die Berechnung von Rekonstruktionskernen für spezielle Mollifier aufgezeigt werden. Die Übertragung der Ergebnisse auf das vollständige Modell ist aufgrund der Gestalt des Faltungskerns nur teilweise möglich. Hierzu wird ein Konvergenzsatz bewiesen, der die bestmögliche Rekonstruktion in Abhängigkeit von einem zusätzlichen Verfahrensparameter charakterisiert. Im abschließenden Kapitel 4 werden numerische Resultate präsentiert, welche die Eignung der approximativen Inversen als Rekonstruktionsverfahren unterstreichen. Zunächst wird als einfaches eindimensionales Beispiel die fraktionelle Ableitung betrachtet und anhand simulierter Daten gezeigt, dass die hergeleitete Methode sowohl für

exakte als auch für gestörte Daten gute Rekonstruktionsergebnisse liefert. Im Anschluss werden mit Hilfe eines numerischen Phantoms und daraus erzeugten Daten die approximative Inversion des ET-Modelloperators unter verschiedenen Gesichtspunkten untersucht. Hierzu zählen die Wahl des Mollifiers und verschiedener weiterer Verfahrensparameter, der Einfluss der Faltung und die Feature-Rekonstruktion am Beispiel des Laplace-Operators. Schließlich wird anhand eines realen Datensatzes verdeutlicht, dass die in dieser Arbeit vorgestellte Methode im Vergleich zu Referenz-Verfahren gleichwertige (SIRT) bzw. signifikant bessere (WBP) Ergebnisse liefert. Als zweites Beispiel zur Feature-Rekonstruktion wird die Korrelation der gesuchten Lösung mit einem zylindrischen „Muster“ in variierender Orientierung dargestellt.

Kapitel 1

Inverse Probleme mit unbeschränktem Operator

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen inverser Probleme mit unbeschränktem Modeloperator erarbeitet, bevor das Verfahren der approximativen Inversen als Lösungsstrategie vorgestellt wird. Dabei sind die Definitionen und Sätze stets für den allgemeinen Fall von Banachräumen formuliert und nur dann für den Spezialfall von Hilberträumen angegeben, wenn dadurch stärkere Aussagen möglich sind. Als wichtiges Beispiel wird die zweidimensionale Röntgen-Transformation als unbeschränkter Operator zwischen Hilberträumen analysiert.

1.1 Unbeschränkte Operatoren

Sei $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ ein Banachraum und $\mathcal{X}'$ sein algebraischer *Dualraum*, der zusammen mit der *Bilinearform*

$$\begin{aligned}\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} : \mathcal{X} \times \mathcal{X}' &\longrightarrow \mathbb{C}, \\ \langle x, x' \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} &= x'(x), \quad x \in \mathcal{X}, \quad x' \in \mathcal{X}'\end{aligned}\tag{1.1}$$

das duale Paar $\langle \mathcal{X}, \mathcal{X}' \rangle$ bildet. Die Schreibweise

$$\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y}.$$

stehe für einen Operator $\mathcal{A}$, der eine Teilmenge $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{X}$ in einen Banachraum $\mathcal{Y}$ abbildet. In dieser Notation bezeichnet $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ den *Definitionsbereich* von $\mathcal{A}$.

1.1 Definition

Ein linearer Operator $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y}$ heißt *dicht definiert*, falls sein Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ bzgl. $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ dicht in $\mathcal{X}$ liegt. Die entsprechende Menge der dicht definierten Operatoren von $\mathcal{X}$ nach $\mathcal{Y}$ sei bezeichnet mit

$$d(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = \{ \mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y} \text{ linear} \mid \overline{\mathcal{D}(\mathcal{A})} = \mathcal{X} \}.\tag{1.2}$$

Ist der *Graph*

$$\mathcal{G}(\mathcal{A}) = \{ (x, \mathcal{A}x) \mid x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\tag{1.3}$$

von $\mathcal{A}$ in $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ abgeschlossen, so nennt man $\mathcal{A}$ einen *abgeschlossenen Operator*. Die Menge der dicht definierten abgeschlossenen Operatoren sei bezeichnet mit

$$C(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = \{ \mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y} \text{ linear} \mid \overline{\mathcal{D}(\mathcal{A})} = \mathcal{X}, \overline{\mathcal{G}(\mathcal{A})} = \mathcal{G}(\mathcal{A}) \} \quad (1.4)$$

(engl. **Closed**). Ist hingegen $\overline{\mathcal{G}(\mathcal{A})}$ lediglich der Graph eines Operators $\overline{\mathcal{A}}$, so heißt $\mathcal{A}$ *abschließbar* und $\overline{\mathcal{A}}$ die *Abschließung* von $\mathcal{A}$. Für die entsprechende Menge wird in dieser Arbeit die Bezeichnung

$$c(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = \{ \mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y} \text{ linear} \mid \overline{\mathcal{D}(\mathcal{A})} = \mathcal{X}, \exists \overline{\mathcal{A}} : \overline{\mathcal{G}(\mathcal{A})} = \mathcal{G}(\overline{\mathcal{A}}) \} \quad (1.5)$$

verwendet (engl. **closable**). Mit $\ell(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ seien die stetigen linearen Operatoren von $\mathcal{X}$ nach $\mathcal{Y}$ bezeichnet. Im Fall $\mathcal{X} = \mathcal{Y}$ hat sich die Schreibweise $\ell(\mathcal{X})$ statt $\ell(\mathcal{X}, \mathcal{X})$ durchgesetzt. Bei den anderen hier eingeführten Mengen wird analog verfahren. $\square$

Ein stetiger linearer Operator ist immer auch abgeschlossen, und der *Satz vom abgeschlossenen Graphen* [Yos95, II.6., Theorem 1] besagt umgekehrt, dass unter den abgeschlossenen Operatoren jene stetig sind, die auf ganz $\mathcal{X}$ definiert sind.

1.2 Beispiel (Fraktionelle Ableitung [TG99, HMW09])

Es ist bekannt [SKM93], dass die Berechnung der *fraktionellen Ableitung* $f = \mathcal{D}_\beta g$, $0 < \beta < 1$, äquivalent ist zur Lösung der Integralgleichung $\mathcal{A}_\beta f = g$ mit

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\beta : L^2(\mathbb{R}) \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta) &\longrightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ \mathcal{A}_\beta f(s) &= \Gamma(\beta)^{-1} \int_{-\infty}^s \frac{f(t)}{(s-t)^{1-\beta}} dt, \quad s \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Mit Hilfe der Fouriertransformation kann der Definitionsbereich beschrieben werden durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta) = \{ f \in L^2(\mathbb{R}) \mid |\sigma|^{-\beta} \widehat{f} \in L^2(\mathbb{R}) \}, \quad (1.7)$$

und für solche Funktionen gilt die Darstellung

$$\mathcal{F} \mathcal{A}_\beta f(\sigma) = (-i\sigma)^{-\beta} \widehat{f}(\sigma). \quad (1.8)$$

Der Operator $\mathcal{A}_\beta$ ist dicht definiert, abgeschlossen, injektiv und unbeschränkt. Sein Bild ist nicht abgeschlossen in $L^2(\mathbb{R})$ [TG99]. $\square$

Analog zum adjungierten Operator auf Hilberträumen lässt sich mit Hilfe der Bilinearform ein dualer Operator definieren, der von $\mathcal{Y}'$ nach $\mathcal{X}'$ abbildet. Die zum klassischen Fall analoge Charakterisierung wird durch die folgende Definition eingeführt.

1.3 Definition (Duale Bedingung)

Sei $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y}$ linear. Ein Paar $(x', y') \in \mathcal{X}' \times \mathcal{Y}'$ erfüllt die *duale Bedingung* (D) bzgl. $\mathcal{A}$, falls gilt:

$$\langle \mathcal{A}x, y' \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'} = \langle x, x' \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} \quad \text{für alle } x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}). \quad (\text{D})$$

□

Da im Unterschied zum klassischen Fall der Operator $\mathcal{A}$ nicht notwendigerweise beschränkt ist, kann ohne weitere Voraussetzungen nicht ausgeschlossen werden, dass es ein weiteres Element $w' \in \mathcal{X}'$ gibt, so dass (w', y') ebenfalls (D) erfüllen. Dies hätte zur Folge, dass es keine eindeutige Zuordnung $y' \mapsto x'$ gäbe, die zur Definition eines dualen Operators nötig wäre. Damit Eindeutigkeit sicher gestellt ist, muss die Klasse der betrachteten Operatoren auf $d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ eingeschränkt werden.

1.4 Lemma ([Yos95, VII.1., Theorem 1])

Erfüllt ein Paar (x', y') die duale Bedingung (D), so ist die Zuordnung $y' \mapsto x'$ genau dann eindeutig, wenn $\mathcal{A}$ dicht definiert ist.

1.5 Definition (Dualer Operator)

Sei $\mathcal{A} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Der zu $\mathcal{A}$ *duale Operator* ist definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{A}' : \mathcal{Y}' \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}') &\longrightarrow \mathcal{X}', \\ \mathcal{A}'y' &= x', \quad \text{wobei } (x', y') \text{ (D) erfüllen.} \end{aligned} \quad (1.9)$$

Der Definitionsbereich von $\mathcal{A}'$ ist gegeben durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}') = \{y' \in \mathcal{Y}' \mid \exists x' \in \mathcal{X}', \text{ so dass (D) für } (x', y') \text{ gilt}\}. \quad (1.10)$$

□

Offenbar ist $\mathcal{A}'$ ein linearer Operator, da er mit Hilfe von Bilinearformen erklärt ist. Darüber hinaus gilt jedoch bereits eine wesentlich stärkere Aussage:

1.6 Lemma

Ein dualer Operator ist stets abgeschlossen.

Beweis: Die Behauptung ergibt sich aus dem Beweis von [Kab11, Satz 13.6 a)], indem man den adjungierten durch den dualen Operator ersetzt und die dort auftretende Isometrie $\mathcal{U}$ als Abbildung $\mathcal{Y}' \times \mathcal{X}' \longrightarrow \mathcal{X}' \times \mathcal{Y}'$ definiert. □

Für Hilberträume lässt sich analog zum klassischen Fall ein adjungierter Operator definieren, der eng mit dem dualen Operator verwandt ist. Seien dazu nun $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ Hilberträume mit Skalarprodukten $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X}}$ bzw. $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Y}}$.

1.7 Definition (Adjungierte Bedingung)

Sei $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{Y}$ linear. Ein Paar $(x^*, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ erfüllt die *adjungierte Bedingung* (D^*) , falls gilt:

$$\langle \mathcal{A}x, y \rangle_{\mathcal{Y}} = \langle x, x^* \rangle_{\mathcal{X}} \quad \text{für alle } x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}). \quad (D^*)$$

□

Gemäß dem Riesz'schen Darstellungssatz gibt es isometrische, konjugiert lineare Bijektionen $i_{\mathcal{X}} : \mathcal{X}' \rightarrow \mathcal{X}$ und $i_{\mathcal{Y}} : \mathcal{Y}' \rightarrow \mathcal{Y}$, die auch *kanonische Einbettungen* genannt werden. Mit den Bezeichnungen $x' = i_{\mathcal{X}}^{-1}x^* = \langle \cdot, x^* \rangle_{\mathcal{X}}$ und $y' = i_{\mathcal{Y}}^{-1}y = \langle \cdot, y \rangle_{\mathcal{Y}}$ wird offenbar, dass die Bedingung (D) im Hilbertraumfall äquivalent ist zu (D^*) , vgl. [Yos95, VII.2., Definition 1]. Konsequenterweise ist dann wie im allgemeinen Fall die Zuordnung $y \mapsto x^*$ genau dann eindeutig, wenn $\mathcal{A}$ dicht definiert ist.

1.8 Definition (Adjungierter Operator)

Sei $\mathcal{A} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Der zu $\mathcal{A}$ *adjungierte Operator* ist definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^* : \mathcal{Y} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}^*) &\rightarrow \mathcal{X}, \\ \mathcal{A}^*y &= x^*, \quad \text{wobei } (x^*, y) \text{ } (D^*) \text{ erfüllen.} \end{aligned} \quad (1.11)$$

Der Definitionsbereich von $\mathcal{A}^*$ ist gegeben durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = \{y \in \mathcal{Y} \mid \exists x^* \in \mathcal{X}, \text{ s.d. } (D^*) \text{ für } (x^*, y) \text{ gilt}\}. \quad (1.12)$$

□

Dass der adjungierte im wesentlichen dem dualen Operator entspricht, besagt das folgende Lemma, das unmittelbar aus der zuvor beschriebenen Äquivalenz folgt.

1.9 Lemma

Zwischen $\mathcal{A}'$ und $\mathcal{A}^*$ gelten die Beziehungen

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = i_{\mathcal{Y}}(\mathcal{D}(\mathcal{A}')) \quad \text{und} \quad \mathcal{A}^* = i_{\mathcal{X}}\mathcal{A}'i_{\mathcal{Y}}^{-1}.$$

Beweis: Vgl. [Yos95, VII.2., Definition 1].

□

1.10 Beispiel (Fraktionale Ableitung)

Aus der Fourier-Darstellung (1.8) ergibt sich formal die Identität

$$\mathcal{F}\mathcal{A}_\beta^*g(\sigma) = (i\sigma)^{-\beta}\widehat{g}(\sigma), \quad (1.13)$$

so dass für den Definitionsbereich des adjungierten Operators $\mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta^*) = \mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta)$ folgt. Mit Hilfe einer Variablentransformation im Skalarprodukt $\langle \mathcal{A}_\beta f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R})}$ erhält man die Darstellung

$$\mathcal{A}_\beta^*g(s) = \Gamma(\beta)^{-1} \int_s^\infty \frac{g(t)}{(t-s)^{1-\beta}} dt \quad (1.14)$$

des adjungierten Operators. $\square$

Zu einem Operator $\mathcal{A}$ zwischen zwei Hilberträumen lässt sich der biduale Operator $\mathcal{A}^{**} = (\mathcal{A}^*)^* : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}^{**}) \rightarrow \mathcal{Y}$ bilden, falls $\mathcal{A}^*$ dicht definiert ist. Die Voraussetzung an $\mathcal{A}$ zur Bildung des Bidualen und das Verhältnis der beiden Operatoren beleuchtet der folgende Satz.

1.11 Satz ([Kab11, Satz 13.6])

Seien $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Dann ist $\mathcal{A}^* \in d(\mathcal{Y}, \mathcal{X})$ genau dann, wenn $\mathcal{A} \in c(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$, d. h. wenn $\mathcal{A}$ abschließbar ist. In diesem Fall ist $\mathcal{A}^{**}$ wohldefiniert, und es gilt $\mathcal{A}^{**} = \overline{\mathcal{A}}$.

Eine weitere wichtige Eigenschaft betrifft die Komposition von Operatoren und deren Duale. Wird ein beschränkter Operator $\mathcal{S}$ von links mit dem unbeschränkten Operator $\mathcal{A}$ multipliziert, so lässt sich die Darstellung des dualen Operators $(\mathcal{S}\mathcal{A})'$ von dem bekannten Fall übertragen, dass beide Operatoren beschränkt sind.

1.12 Satz ([Yos95, VII.2., Theorem 3 ii])

Seien $\mathcal{A} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ und $\mathcal{S} \in \ell(\mathcal{Y})$. Dann gilt die Operatorgleichung $(\mathcal{S}\mathcal{A})' = \mathcal{A}'\mathcal{S}'$.

1.13 Korollar

Sind $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ Hilberträume, so gilt $(\mathcal{S}\mathcal{A})^* = \mathcal{A}^*\mathcal{S}^*$ unter den Voraussetzungen von Satz 1.12.

Beweis: Zum einen gilt

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(\mathcal{A}^* \mathcal{S}^*) &= \{y \in \mathcal{Y} \mid \mathcal{S}^* y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)\} \\
&= \{y \in \mathcal{Y} \mid i_{\mathcal{Y}} \mathcal{S}' i_{\mathcal{Y}}^{-1} y \in i_{\mathcal{Y}}(\mathcal{D}(\mathcal{A}'))\} && \text{(Lemma 1.9)} \\
&= i_{\mathcal{Y}}\left(\{y' \in \mathcal{Y}' \mid i_{\mathcal{Y}} \mathcal{S}' y' \in i_{\mathcal{Y}}(\mathcal{D}(\mathcal{A}'))\}\right) \\
&= i_{\mathcal{Y}}(\{y' \in \mathcal{Y}' \mid \mathcal{S}' y' \in \mathcal{D}(\mathcal{A}')\}) \\
&= i_{\mathcal{Y}}(\mathcal{D}(\mathcal{A}' \mathcal{S}')) \\
&= i_{\mathcal{Y}}(\mathcal{D}((\mathcal{S} \mathcal{A})')) && \text{(Satz 1.12)} \\
&= \mathcal{D}((\mathcal{S} \mathcal{A})^*) && \text{(Lemma 1.9).}
\end{aligned}$$

Zum anderen berechnet man ebenfalls nach Lemma 1.9 für alle $y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^* \mathcal{S}^*)$:

$$\mathcal{A}^* \mathcal{S}^* y = i_{\mathcal{X}} \mathcal{A}' i_{\mathcal{Y}}^{-1} i_{\mathcal{Y}} \mathcal{S}' i_{\mathcal{Y}}^{-1} y = i_{\mathcal{X}} (\mathcal{S} \mathcal{A})' i_{\mathcal{Y}}^{-1} y = (\mathcal{S} \mathcal{A})^* y.$$

□

Während die Bildung des Adjungierten eines Operatorprodukts dem klassischen Resultat entspricht, sofern der erste Faktor beschränkt ist, müssen für die Abschließbarkeit bzw. Abgeschlossenheit stärkere Bedingungen vorausgesetzt werden. Diese beiden Eigenschaften lassen sich ausnutzen, um Aussagen über den Adjungierten eines Operatorprodukts bei umgekehrter Reihenfolge der Faktoren zu treffen.

1.14 Lemma

Sei $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ und $\mathcal{S} \in \ell(\mathcal{Y})$ injektiv mit abgeschlossenem Bild $\mathcal{R}(\mathcal{S})$. Dann ist $\mathcal{B} = \mathcal{S} \mathcal{A}$ ein abgeschlossener Operator.

Beweis: Die Abgeschlossenheit des Graphen $\mathcal{G}(\mathcal{A})$ lässt sich in Form eines Folgenkriteriums charakterisieren: Ist $(x_n)_n \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$ mit $x_n \rightarrow x$ und $\mathcal{A}x_n \rightarrow y$, so ist $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ und es gilt $\mathcal{A}x = y$.

Sei nun $(x_n)_n$ eine Folge in $\mathcal{D}(\mathcal{B}) = \mathcal{D}(\mathcal{A})$ mit $x_n \rightarrow x$ und $\mathcal{B}x_n \rightarrow z$. Nach dem Satz von der offenen Abbildung ist $\mathcal{S}^{-1} : \mathcal{R}(\mathcal{S}) \rightarrow \mathcal{Y}$ stetig, und somit gilt $\mathcal{S}^{-1}z \leftarrow \mathcal{S}^{-1}\mathcal{B}x_n = \mathcal{A}x_n \rightarrow y$. Wegen der Abgeschlossenheit von $\mathcal{A}$ ist zudem $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{B})$, und es gilt $\mathcal{A}x = \mathcal{S}^{-1}z$ bzw. $\mathcal{B}x = z$. Dies zeigt die Abgeschlossenheit von $\mathcal{B}$. □

1.15 Lemma

Seien $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} \in c(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Für $\mathcal{S} \in \ell(\mathcal{Y})$ gelte $\mathcal{S}^*(\mathcal{D}(\mathcal{A}^*)) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$. Dann ist das Produkt $\mathcal{B} = \mathcal{S} \mathcal{A}$ abschließbar.

Beweis: Nach [Kab11, Satz 13.6 b)] ist $\mathcal{B}$ genau dann abschließbar, wenn $\mathcal{D}(\mathcal{B}^*)$ dicht in $\mathcal{Y}$ liegt. Laut Korollar 1.13 ist $\mathcal{B}^* = \mathcal{A}^* \mathcal{S}^*$, und damit liegt nach Voraussetzung an $\mathcal{S}^*$ die Menge $\mathcal{D}(\mathcal{B}^*) = \{y \in \mathcal{Y} \mid \mathcal{S}^* y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)\} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$ dicht in $\mathcal{Y}$. $\square$

Mit Hilfe dieses Lemmas ist es nun möglich, das Resultat von Korollar 1.13 mit umgekehrter Reihenfolge der Operatoren zu zeigen.

1.16 Satz

Sei $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ und $\mathcal{T} \in \ell(\mathcal{X})$ mit $\mathcal{T}(\mathcal{D}(\mathcal{A})) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$. Der adjungierte Operator $\mathcal{T}^*$ sei injektiv mit abgeschlossenem Bild. Dann gilt $(\mathcal{A}\mathcal{T})^* = \mathcal{T}^* \mathcal{A}^*$.

Beweis: Da die Operatoren $\mathcal{A}$ und $\mathcal{T}$ abgeschlossen sind, gilt $\mathcal{A}^{**} = \mathcal{A}$ und $\mathcal{T}^{**} = \mathcal{T}$ nach Satz 1.11. Folglich lassen sich sowohl $\mathcal{A}$ als auch $\mathcal{T}$ als Adjungierte der Operatoren $\mathcal{C} = \mathcal{A}^*$ bzw. $\mathcal{S} = \mathcal{T}^*$ schreiben. Aus Lemma 1.14 und den Voraussetzungen an $\mathcal{S}$ ergibt sich die Abgeschlossenheit von $\mathcal{S}\mathcal{C}$, und die Anwendung von Korollar 1.13 liefert schließlich $(\mathcal{C}^* \mathcal{S}^*)^* = (\mathcal{S}\mathcal{C})^{**} = \mathcal{S}\mathcal{C}$ und somit die Behauptung. $\square$

Ein weiteres wichtiges Konzept zur Untersuchung von linearen Operatoren ist die Zerlegung der beteiligten Räume in orthogonale Komplemente, die mit Hilfe des Operators definiert werden. Die Bilinearformen der Banachräume induzieren einen Orthogonalitätsbegriff, bei dem aufgrund der Asymmetrie der Formen bezüglich der beiden Argumente zwischen linker und rechter Orthogonalität unterschieden werden muss. Einige grundlegende Eigenschaften von Hilberträumen lassen sich so verallgemeinern.

1.17 Definition

Zu einer Menge $\mathcal{M} \subset \mathcal{X}$ sei der (*Rechts-*)*Orthogonalraum* definiert als

$$\mathcal{M}^\perp = \{x' \in \mathcal{X}' \mid \langle x, x' \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = 0 \text{ für alle } x \in \mathcal{M}\}. \quad (1.15)$$

Entsprechend sei zu $\mathcal{N} \subset \mathcal{X}'$ der (*Links-*)*Orthogonalraum* definiert als

$${}^\perp \mathcal{N} = \{x \in \mathcal{X} \mid \langle x, x' \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = 0 \text{ für alle } x' \in \mathcal{N}\}. \quad (1.16)$$

Ist $\mathcal{X}$ ein Hilbertraum, so schreibt man $\mathcal{N}^\perp$ statt ${}^\perp \mathcal{N}$, da in diesem Fall zwischen Rechts- und Linksothogonalität kein Unterschied besteht. $\square$

1.18 Lemma

Für einen beliebigen Unterraum $\mathcal{U} \subset \mathcal{X}$ gilt

$${}^\perp \mathcal{U}^\perp = \overline{\mathcal{U}}.$$

Beweis: Der Fall $\mathcal{U} = \{0\}$ ist trivial. Sei nun $\mathcal{U} \neq \{0\}$. Da $\langle x, x' \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = 0$ für alle $x \in \mathcal{U}$, $x' \in \mathcal{U}^\perp$, gilt offenbar $\mathcal{U} \subset {}^\perp \mathcal{U}^\perp$, und wegen der Stetigkeit der Bilinearform auch $\overline{\mathcal{U}} \subset {}^\perp \mathcal{U}^\perp$.

Angenommen, es gäbe ein $x^* \in {}^\perp \mathcal{U}^\perp \setminus \overline{\mathcal{U}}$. Nach dem Satz von Hahn-Banach existierte dann ein $\lambda \in \mathcal{X}'$ mit $\langle x, \lambda \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = 0$ für alle $x \in \overline{\mathcal{U}}$ und $\langle x^*, \lambda \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} \neq 0$. Aus ersterem folgte dann $\lambda \in \mathcal{U}^\perp$, und in Kombination mit der zweiten Aussage ergäbe dies $x^* \not\perp \lambda$, also $x^* \notin {}^\perp \mathcal{U}^\perp$ im Widerspruch zur Annahme. Es folgt somit die Behauptung. $\square$

Ein weiteres Lemma, das analog zum Fall beschränkter Operatoren auf Hilberträumen gilt, betrifft den Zusammenhang zwischen dem Bild eines Operators und dem Nullraum seines Dualen.

1.19 Lemma

Ist $\mathcal{A} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$, so erfüllen die Nullräume und Bilder

$$\mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp = \mathcal{N}(\mathcal{A}'), \quad \overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})} = {}^\perp \mathcal{N}(\mathcal{A}').$$

Beweis: Die erste Gleichheit gilt wegen

$$\begin{aligned} y' \in \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp &\Leftrightarrow \forall x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) : \langle \mathcal{A}x, y' \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'} = 0 = \langle x, 0 \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} \\ &\Leftrightarrow (0, y') \in \mathcal{X}' \times \mathcal{Y}' \text{ erfüllt (D)} \\ &\Leftrightarrow y' \in \mathcal{D}(\mathcal{A}') \text{ und } \mathcal{A}'y' = 0 \\ &\Leftrightarrow y' \in \mathcal{N}(\mathcal{A}'). \end{aligned}$$

Die zweite folgt unmittelbar durch Anwendung von Lemma 1.18. $\square$

In Hilberträumen gilt für abschließbare Operatoren auch die Umkehrung.

1.20 Lemma ([Kab11, Satz 13.8])

Seien $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} \in c(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Dann gelten die Identitäten

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp &= \mathcal{N}(\mathcal{A}^*), & \overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})} &= \mathcal{N}(\mathcal{A}^*)^\perp, \\ \mathcal{R}(\mathcal{A}^*)^\perp &= \mathcal{N}(\overline{\mathcal{A}}), & \overline{\mathcal{R}(\mathcal{A}^*)} &= \mathcal{N}(\overline{\mathcal{A}})^\perp. \end{aligned}$$

Im Bereich der beschränkten Operatoren auf Hilberträumen ist das Konzept der Moore-Penrose-Inversen und deren Bedeutung für die Theorie der inversen Probleme gut untersucht [Lou89, Rie03]. Die Verallgemeinerung für unbeschränkte Hilbertraumoperatoren wird im folgenden erläutert. Hierzu ist die Einführung einer weiteren Notation erforderlich, vgl. [Nas87, Abschnitt 5].

1.21 Definition

Seien $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y}$. Die Menge

$$\mathcal{C}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}) \cap \mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp \subset \mathcal{X} \quad (1.17)$$

heißt *Carrier von $\mathcal{A}$* . Der Definitionsbereich der (noch zu definierenden) Moore-Penrose-Inversen ist gegeben durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger) = \mathcal{R}(\mathcal{A}) \oplus \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp \subset \mathcal{Y}. \quad (1.18)$$

□

Bemerkung: Der Begriff des Carriers kommt in der Theorie der Moore-Penrose-Inversen von beschränkten Operatoren nicht vor, da er dort mit $\mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$ übereinstimmt. □

1.22 Satz (Moore-Penrose-Inverse [Nas87, Theorem 5.1])

Seien $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ Hilberträume und $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Mit $\mathcal{Q}$ und $\mathcal{R}$ seien die orthogonalen Projektionen auf $\mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$ bzw. $\overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})}$ bezeichnet. Die folgenden Definitionen der Moore-Penrose-Inversen (oder verallgemeinerten Inversen) $\mathcal{A}^\dagger$ von $\mathcal{A}$ sind äquivalent:

a) $\mathcal{A}^\dagger$ ist die eindeutige lineare Fortsetzung von $(\mathcal{A}|_{\mathcal{C}(\mathcal{A})})^{-1}$ auf $\mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$, so dass $\mathcal{N}(\mathcal{A}^\dagger) = \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp$.

b)

$$\begin{cases} \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}^\dagger \text{ auf } \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger), \\ \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{R}|_{\mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)}, \\ \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} = \mathcal{Q}|_{\mathcal{D}(\mathcal{A})}. \end{cases}$$

c)

$$\begin{cases} \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} = \mathcal{A} \text{ auf } \mathcal{D}(\mathcal{A}), \\ \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}^\dagger \text{ auf } \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger), \\ \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} \text{ und } \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger \text{ sind symmetrisch.} \end{cases}$$

d) Zu $y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$ ist $\mathcal{A}^\dagger y$ die eindeutige Lösung minimaler Norm der projizierten Gleichung $\mathcal{A}x = \mathcal{R}y$.

e) Zu $y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$ ist $\mathcal{A}^\dagger y$ die eindeutige Lösung minimaler Norm des Minimierungsproblems $\|\mathcal{A}x - y\|_{\mathcal{Y}} \longrightarrow \min$.

f) Zu $y \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$ ist $\mathcal{A}^\dagger y$ die eindeutige Lösung minimaler Norm der Normalgleichung $\mathcal{A}^*(\mathcal{A}x - y) = 0$.

g) Die gleichen Aussagen wie in d), e) und f) mit der Forderung „in $\mathcal{C}(\mathcal{A})$ “ statt „minimaler Norm“.

Die orthogonale Zerlegung $\mathcal{X} = \mathcal{N}(\mathcal{A}) \oplus \mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$, die eine einfache Folgerung aus dem Projektionssatz [Yos95, III.1., Theorem 1] ist, induziert einen *stetigen* Projektionsoperator $\tilde{\mathcal{Q}}$ auf $\mathcal{X}$, der die folgenden Eigenschaften besitzt:

- i) $\mathcal{N}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{R}(\tilde{\mathcal{Q}})$,
- ii) $\tilde{\mathcal{Q}}x \in \mathcal{N}(\mathcal{A})$ für alle $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$,
- iii) $\mathcal{C}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}) \cap \mathcal{N}(\tilde{\mathcal{Q}})$ ist dicht in $\mathcal{N}(\tilde{\mathcal{Q}})$.

Zudem gibt es einen *stetigen* Projektionsoperator $\mathcal{R}$ auf $\overline{\mathcal{R}(\mathcal{A})}$ mit $\mathcal{N}(\mathcal{R}) = \mathcal{R}(\mathcal{A})^\perp$. Diese Eigenschaften lassen sich auch für allgemeine Banachräume formulieren, und es stellt sich heraus, dass die Existenz der beiden o. g. stetigen Projektoren hinreichend ist, um eine Moore-Penrose-Inverse zu definieren, welche die Eigenschaften in Satz 1.22 b) erfüllt. Dieser Operator hängt allerdings von den gewählten Projektoren ab [Nas87, Theorem 10.4], und zudem ist im Gegensatz zu Hilberträumen die Existenz solcher Projektionsoperatoren in Banachräumen nicht gesichert. Zwar lässt sich stets eine orthogonale Zerlegung des Raumes angeben, aber zum einen ist der Orthogonalitätsbegriff ein anderer, zum anderen ist das orthogonale Komplement eines Unterraumes im allgemeinen kein Unterraum, sondern eine nichtlineare Mannigfaltigkeit [Alb05]. Es lässt sich sogar zeigen, dass ein Banachraum, in dem sich zu jedem abgeschlossenen Unterraum ein orthogonal komplementärer Unterraum finden lässt, isomorph zu einem Hilbertraum sein muss [LT71]. Darüber hinaus ist, selbst wenn eine solche Moore-Penrose-Inverse existiert, nicht ohne weitere Voraussetzungen gesichert, dass sie auf Bestapproximationen (Teil e)) abbildet.

1.2 Das Verfahren der approximativen Inversen (AI)

In der Einleitung wurde bereits auf die Schlechtgestellttheit inverser Probleme aufmerksam gemacht, durch die eine *Regularisierung* unerlässlich wird. Dabei wurde der Begriff der Regularisierung im klassischen Sinne, d. h. für beschränkte Hilbertraumoperatoren erklärt. In diesem Abschnitt wird nun mit dem Verfahren der *approximativen Inversen* eine solche Regularisierungsmethode vorgestellt, die sich unter ganz unterschiedlichen Voraussetzungen anwenden lässt.

In der ursprünglichen Fassung [LM90] werden stetige Operatoren zwischen Hilberträumen betrachtet und die Methode generell eingeführt. Der Leitgedanke des Artikels ist dabei, im Gegensatz zu vielen etablierten Verfahren, nicht die Änderung des mathematischen Modells durch Projektion auf einen endlichdimensionalen Unterraum (z. B. ART [Her80]), sondern ähnlich wie bei der gefilterten Rückprojektion

[Nat86, Abschnitt V.1] eine kontinuierliche Darstellung der approximativen Lösung, die erst im letzten Schritt, der numerischen Umsetzung, diskretisiert wird.

Die Arbeit [SS10] erweitert das Konzept auf Banachräume und führt dadurch erstmalig ein nicht-iteratives Verfahren zur Regularisierung in Banachräumen ein. Das besondere Augenmerk liegt dabei auf stetigen Funktionen und L^p -Funktionen.

In [Lou11] werden die unterschiedlichen Schreibweisen der Methode in einer einheitlichen Notation zusammengeführt und eine Verallgemeinerung des Verfahrens vorgestellt, die es ermöglicht, die Anwendung eines Auswertungsoperators auf die unbekannte Lösung direkt zu berechnen, ohne zuvor eine Approximation an die Lösung selbst bestimmen zu müssen („Feature-Rekonstruktion“). Darüber hinaus werden Konvergenz und Ordnungsoptimalität der verallgemeinerten Methode nachgewiesen.

Die generelle Idee der approximativen Inversen ist es, einen *Rekonstruktionskern* als Lösung des adjungierten Problems zu bestimmen, wobei ein frei wählbarer *Mollifier* als rechte Seite fungiert. Wendet man diesen Rekonstruktionskern auf die Daten des ursprünglichen Problems an, so stellt sich heraus, dass das Resultat gleich der Anwendung des Mollifiers auf die gesuchte Lösung ist. Mit Hilfe des Rekonstruktionskerns ist es somit möglich, den Operator näherungsweise zu invertieren. Die Bestimmung des Kerns ist dabei zwar theoretisch genauso schwierig wie das Ausgangsproblem, doch die rechte Seite des Hilfsproblems ist exakt bekannt und unabhängig von den Daten(-fehlern). Häufig ist es sogar möglich, analytische Darstellungen des Kerns anzugeben, falls der Mollifier günstig gewählt ist.

Die hier erwähnten Begriffe werden in den beiden folgenden Abschnitten definiert und näher untersucht.

1.2.1 AI in Banachräumen

Das Hauptaugenmerk dieses Abschnitts liegt aus Gründen der Übersichtlichkeit auf der approximativen Inversen auf L^p -Räumen mit $1 \leq p < \infty$. Das entsprechende Verfahren auf dem Raum der stetigen Funktionen mit kompaktem Träger wird in [SS10] näher untersucht. Der L^∞ -Fall hingegen wird auch in jener Arbeit nicht behandelt.

Im Folgenden sei stets angenommen, dass der zu invertierende Operator $\mathcal{A}$ *injektiv* ist. Wie sich herausstellt, ist dies keine Einschränkung, sondern eine Folgerung aus den Bedingungen, die an einen Mollifier gestellt werden. Die folgende Definition konkretisiert diese Voraussetzungen.

1.2.3 Definition (Mollifier [SS10, Definition 2])

Sei $\mathcal{X}$ ein Banachraum von Funktionen, deren Definitionsbereich eine offene Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist. Eine Familie $\{\delta_x^\gamma\}_{x \in \Omega}^{\gamma > 0} \subset \mathcal{X}'$ heißt *Mollifier für $\mathcal{X}$* oder *$\mathcal{X}$ -Mollifier*, falls

a) für jedes $f \in \mathcal{X}$ die Familie $\{f^\gamma\}_{\gamma>0}$, definiert durch

$$f^\gamma(x) = \langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'}, \quad x \in \Omega, \quad (1.19)$$

in $\mathcal{X}$ liegt und

b) die Funktionsschar $\{f^\gamma\}_{\gamma>0}$ gegen f konvergiert gemäß

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \|f - f^\gamma\|_{\mathcal{X}} = 0. \quad (1.20)$$

Im weiteren Verlauf wird die Schreibweise „Der Mollifier δ_x^γ “ mehrfach verwendet und ist als Kurzform für $\{\delta_x^\gamma\}_{x \in \Omega}^{\gamma>0}$ zu verstehen. $\square$

In [SS10] wird eine Klasse von Faltungsmollifiern für $L^p(\Omega)$ mit beschränktem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ angegeben, bei denen die erzeugende Funktion in $L^{p'}(\Omega)$ liegt, wobei p' der zu p konjugierte Exponent ist, d. h. es gilt $1/p + 1/p' = 1$. Im Fall unbeschränkter Definitionsgebiete wird dort jedoch nur unter einer zusätzlichen Abklingbedingung die Eigenschaft a) nachgewiesen. Der folgende Satz gibt an, wie im Fall $\mathcal{X} = L^p(\mathbb{R}^d)$, $1 \leq p < \infty$ auf einfache Art und Weise ein Mollifier konstruiert werden kann.

1.24 Satz

Sei $\eta \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^{p'}(\mathbb{R}^d)$ mit $\int_{\mathbb{R}^d} \eta(x) dx = 1$. Desweiteren sei $\eta^\gamma(x) = \gamma^{-d} \eta(\gamma^{-1}x)$, und für $f \in L^p(\mathbb{R}^d)$ gelte

$$\langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{L^p \times (L^p)'} = f * \eta^\gamma(x)$$

mit der Faltung „*“ auf $\mathbb{R}^d$, s. Definition A.4. Dann ist δ_x^γ ein $L^p(\mathbb{R}^d)$ -Mollifier.

Beweis: Setzt man in der Young'schen Ungleichung (A.19) $g = \eta^\gamma$ und $q = p'$ (also $r = \infty$), so folgt für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$

$$|\langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{L^p \times (L^p)'}| = |f * \eta^\gamma(x)| \leq \|f\|_{L^p} \|\eta^\gamma\|_{L^{p'}}.$$

Eine einfache Rechnung zeigt, dass $\|\eta^\gamma\|_{L^{p'}} = \gamma^{-d/p'} \|\eta\|_{L^{p'}}$, und somit ist δ_x^γ ein Element des Dualraums $(L^p)'$. Andererseits ergibt sich mit $q = 1$, $r = p$ die Ungleichung

$$\|f^\gamma\|_{L^p} = \|f * \eta^\gamma\|_{L^p} \leq \|f\|_{L^p} \|\eta^\gamma\|_{L^1} = \|f\|_{L^p} \|\eta\|_{L^1},$$

d. h. Eigenschaft a) in Definition 1.23 ist erfüllt. Die Konvergenzaussage in Teil b) wird bewiesen in [SW71, Kapitel 1, Theorem 1.18]. $\square$

Ist ein Mollifier δ_x^γ gewählt, so bestimmt man einen zugehörigen *Rekonstruktionskern* $\psi_x^\gamma \in \mathcal{Y}'$ als Lösung der Schar der *dualen Gleichungen*

$$\mathcal{A}'\psi_x^\gamma = \delta_x^\gamma, \quad x \in \Omega. \quad (1.21)$$

Das folgende Lemma zeigt, dass die Injektivität von $\mathcal{A}$ bereits eine notwendige Voraussetzung für die Lösbarkeit dieser Gleichungen ist.

1.25 Lemma

Sei δ_x^γ ein Mollifier gemäß Definition 1.23. Zudem gelte $\delta_x^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{A}')$ für fast alle $x \in \Omega$. Dann ist $\mathcal{A}$ injektiv.

Beweis: Für ein beliebiges Element $f \in \mathcal{N}(\mathcal{A})$ und $\gamma > 0$, $x \in \Omega$, gilt

$$\langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = \langle f, \mathcal{A}'\psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = \langle \mathcal{A}f, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'} = 0.$$

Somit ist $f^\gamma = 0$ für alle $\gamma > 0$. Nach der Approximationseigenschaft (1.20) im Banachraum $\mathcal{X}$ gilt jedoch $\lim_{\gamma \rightarrow 0} \|f - f^\gamma\|_{\mathcal{X}} = 0$ und somit $f = 0$. $\square$

Mit Hilfe des Rekonstruktionskerns lässt sich nun der Operator definieren, nach dem das Verfahren der approximativen Inversen benannt ist.

1.26 Definition (Approximative Inverse [LM90])

Eine Familie $\{\psi_x^\gamma\}_{x \in \Omega}^{\gamma > 0} \subset \mathcal{Y}'$, deren Elemente zu einem gegebenen Mollifier δ_x^γ für alle $x \in \Omega$, $\gamma > 0$ die Gleichung (1.21) erfüllen, heißt *Rekonstruktionskern* bzgl. δ_x^γ zur *Approximation* von $\mathcal{A}^{-1}$. Die Operatorfamilie $\{\mathcal{A}^\gamma\}_{\gamma > 0}$, definiert durch

$$\mathcal{A}^\gamma g(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'}, \quad g \in \mathcal{Y}, \quad (1.22)$$

heißt *approximative Inverse* zu $\mathcal{A}$ bzgl. δ_x^γ . $\square$

1.27 Beispiel (Fraktionelle Ableitung)

Der Operator $\mathcal{A}_\beta$ ist injektiv, weshalb die Theorie dieses Abschnitts angewandt werden kann. Hilberträume sind selbstdual, daher können Elemente des Dualraums $\mathcal{X}' = L^2(\mathbb{R})'$ als Funktionen aufgefasst werden. Zur Bestimmung eines Rekonstruktionskerns ist die Gleichung

$$\mathcal{A}_\beta^* \psi_x^\gamma = \delta_x^\gamma$$

zu lösen. Durch Fouriertransformation beider Seiten ergibt sich nach (1.13)

$$(i\sigma)^{-\beta} \mathcal{F}\psi_x^\gamma = \mathcal{F}\delta_x^\gamma$$

und somit

$$\mathcal{F}\psi_x^\gamma = (i\sigma)^\beta \mathcal{F}\delta_x^\gamma.$$

Diese Formel lässt sich zur Berechnung von ψ_x^γ problemlos numerisch auswerten. Die Approximative Inverse von $\mathcal{A}_\beta$ zu δ_x^γ ist schließlich gegeben durch

$$\mathcal{A}_\beta^\gamma g(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{L^2(\mathbb{R})} = \int_{\mathbb{R}} g(s) \psi_x^\gamma(s) \, ds.$$

□

Die folgenden einfachen Eigenschaften der approximativen Inversen ergeben sich unmittelbar aus den Definitionen von $\mathcal{A}^\gamma$ und δ_x^γ [SS10].

1.28 Lemma

Die Operatoren $\mathcal{A}^\gamma$ sind linear als Abbildungen $\mathcal{Y} \longrightarrow \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}\}$. Ist $g = \mathcal{A}f$ für $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$, so folgt

$$\mathcal{A}^\gamma g(x) = \langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = f^\gamma(x), \quad x \in \Omega,$$

und damit $\mathcal{A}^\gamma g \in \mathcal{X}$ sowie $\lim_{\gamma \rightarrow 0} \mathcal{A}^\gamma g = f$.

Beweis: Die Linearität von $\mathcal{A}^\gamma$ entspricht der Linearität von $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'}$ im ersten Argument. Aus der Gleichungskette

$$\mathcal{A}^\gamma g(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'} = \langle \mathcal{A}f, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'} = \langle f, \mathcal{A}' \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'} = \langle f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'}$$

folgt die behauptete Darstellung, und die beiden restlichen Aussagen sind Konsequenzen der Definition von δ_x^γ als Mollifier gemäß Definition 1.23. □

Nach Konstruktion bildet somit jeder der Operatoren $\mathcal{A}^\gamma$ das Bild $\mathcal{R}(\mathcal{A})$ auf $\mathcal{X}$ ab. Dass für ein beliebiges $g \in \mathcal{Y}$ die Funktion $\mathcal{A}^\gamma g$ in $\mathcal{X}$ liegt, ist hingegen nicht gewährleistet, und falls dies gilt, muss $\mathcal{A}^\gamma : \mathcal{Y} \longrightarrow \mathcal{X}$ nicht notwendigerweise stetig sein.

Die bisherige Formulierung (1.22) setzt voraus, dass im Falle einer numerischen Umsetzung des Lösungsverfahrens, welches durch den Operator $\mathcal{A}^\gamma$ repräsentiert wird, als Eingabedaten $g = \mathcal{A}f$ vorliegen. Typischerweise treten jedoch sowohl bei der mathematischen Modellierung als auch bei der Messung der tatsächlichen Daten Fehler auf. Erstere ergeben sich durch Approximationen, bei letzteren handelt es sich vor allem um technisch oder physikalisch bedingte Ungenauigkeiten im Messprozess. Im Ergebnis liegen statt g gestörte Daten g^δ vor, die im allgemeinen nicht mehr im Bild von $\mathcal{A}$ enthalten sind. Um auch in diesem Fall gute Approximationen an die gesuchte Größe f zu erzielen, muss $\mathcal{A}^\gamma$ eine *Regularisierungseigenschaft* erfüllen, die im folgenden definiert wird.

1.29 Definition (Regularisierung [Lou89, Definition 3.3.1])

Seien $g \in \mathcal{R}(\mathcal{A})$ und $(g^\delta)_{\delta>0} \subset \mathcal{Y}$ mit $\|g - g^\delta\|_{\mathcal{Y}} \leq \delta$. Eine Familie $(\mathcal{A}^\gamma)_{\gamma>0}$ von Operatoren $\mathcal{A}^\gamma : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$ heißt *Regularisierung* von $\mathcal{A}^{-1}$, wenn es eine *Parameterwahl* $\gamma = \gamma(\delta, g^\delta)$ gibt mit $\lim_{\delta \rightarrow 0} \gamma(\delta, g^\delta) = 0$, so dass

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\mathcal{A}^{-1}g - \mathcal{A}^{\gamma(\delta, g^\delta)}g^\delta\|_{\mathcal{X}} = 0.$$

□

An dieser Stelle liegt es auf der Hand zu fragen, ob das zuvor eingeführte Verfahren der approximativen Inversen eine Regularisierung gemäß Definition 1.29 darstellt. Der folgende Satz gibt die Bedingungen an, unter denen diese Frage positiv beantwortet werden kann.

1.30 Satz ([SS10, Theorem 1])

Die approximative Inverse $(\mathcal{A}^\gamma)_{\gamma>0}$ zu $\mathcal{A}$ sei eine Familie stetiger linearer Operatoren $\mathcal{A}^\gamma : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$, deren Norm sich gemäß

$$\|\mathcal{A}^\gamma\|_{\mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}} \leq l^\gamma$$

gegen eine von γ abhängige Konstante l^γ abschätzen lässt. Weiterhin gelten die Bezeichnungen von Definition 1.29. Der Regularisierungsparameter $\gamma = \gamma(\delta)$ sei so gewählt, dass für $\delta \rightarrow 0$ die beiden Bedingungen

$$\gamma(\delta) = o(1), \quad l^{\gamma(\delta)} = o(\delta^{-1})$$

erfüllt sind. Dann folgt für $g \in \mathcal{R}(\mathcal{A})$ die Konvergenz

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\mathcal{A}^{-1}g - \mathcal{A}^{\gamma(\delta)}g^\delta\|_{\mathcal{X}} = 0,$$

d. h. die approximative Inverse ist eine Regularisierung von $\mathcal{A}^{-1}$.

Die abstrakten Bedingungen in Satz 1.30 lassen sich konkreter fassen für den Fall, dass $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ Lebesgue'sche Maßräume sind. Der Raum $\mathcal{X}$ bestehe nun aus L^p -Funktionen auf einer Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit $p \in [1, \infty[$. Für den Definitionsbereich der Funktionen in $\mathcal{Y}$ wird eine allgemeinere Struktur zugelassen (z. B. Tangentialbündel), welche die Betrachtung einer größeren Klasse von Operatoren $\mathcal{A}$ ermöglicht.

1.31 Korollar (vgl. [SS10, Lemma 2])

Seien $\mathcal{X} = L^p(\Omega)$ und $\mathcal{Y} = L^q(S)$ für einen Maßraum (S, μ) und $p, q \in [1, \infty[$. Weiterhin sei $\psi_x^\gamma \in L^{q'}(S)$ ein Rekonstruktionskern zum L^p -Mollifier δ_x^γ . Dann gilt mit

$$r_p^\gamma(z) = \left(\int_{\Omega} |\psi_x^\gamma(z)|^p dx \right)^{1/p}, \quad z \in S,$$

dass die Bedingungen

$$\gamma(\delta) = o(1), \quad \|r_p^{\gamma(\delta)}\|_{L^{q'}(S)} = o(\delta^{-1}) \quad (\delta \rightarrow 0)$$

hinreichend dafür sind, dass $\mathcal{A}^\gamma$ eine Regularisierung von $\mathcal{A}^{-1}$ ist.

Beweis: Mit Hilfe der Minkowski-Ungleichung (Satz A.9) und der Hölder-Ungleichung ergibt sich

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}^\gamma g\|_{L^p} &= \left(\int_{\Omega} |\mathcal{A}^\gamma g(x)|^p dx \right)^{1/p} \\ &= \left(\int_{\Omega} \left| \int_S g(z) \psi_x^\gamma(z) d\mu(z) \right|^p dx \right)^{1/p} && \text{(Definition von } \mathcal{A}^\gamma \text{)} \\ &\leq \int_S \left(\int_{\Omega} |g(z) \psi_x^\gamma(z)|^p dx \right)^{1/p} dz && \text{(Minkowski-Ungl.)} \\ &= \int_S |g(z)| \left(\int_{\Omega} |\psi_x^\gamma(z)|^p dx \right)^{1/p} dz \\ &= \int_S |g(z)| r_p^\gamma(z) dz \\ &\leq \|g\|_{L^q(S)} \|r_p^\gamma\|_{L^{q'}(S)} && \text{(Hölder-Ungl.).} \end{aligned}$$

Somit ist $\|\mathcal{A}^\gamma\|_{\mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}} \leq \|r_p^\gamma\|_{L^{q'}(S)}$, und mit Satz 1.30 folgt die Behauptung. $\square$

Bemerkung: Bei Rekonstruktionskernen, die vom Mollifier eine Faltungsstruktur erben (siehe z. B. Satz 1.45), ist r_p^γ eine Konstante, d. h. die Norm in Korollar 1.31 ist unbeschränkt, falls $\mu(S) = \infty$. Für solche Kerne muss die Abschätzung von $\|\mathcal{A}^\gamma\|$ wie beispielsweise in Lemma 1.46 mit anderen Mitteln nachgewiesen werden. $\square$

Gegenstand der abschließenden Betrachtung in diesem Abschnitt ist eine wichtige Erweiterung der approximativen Inversen, die unter dem Stichwort *Feature-Rekonstruktion* [Lou11] bekannt ist. Bei dieser Variante interessiert man sich nicht für die unbekannte Funktion f an sich, sondern für eine „analysierte“ Version $\mathcal{L}f$, wobei $\mathcal{L} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{L}) \rightarrow \mathcal{W}$ ein linearer Analyseoperator ist. So lassen sich z. B. ∇f bzw. Δf als Eingabedaten für Algorithmen zur Kantenerkennung verwenden oder $w * f$ zur Erkennung eines Musters, das durch die „Schablone“ w repräsentiert wird. Die Vorteile der direkten Berechnung von $\mathcal{L}f$ aus den Daten im Vergleich zur getrennten Ausführung von Rekonstruktions- und Analyseschritt liegen zum einen im Bereich der numerischen Effizienz, vor allem aber in der Stabilität der Berechnung, was in [Lou11] verdeutlicht wird.

Sei nun $\mathcal{W}$ ein Banachraum, $\mathcal{L} \in d(\mathcal{X}, \mathcal{W})$ und δ_x^γ ein $\mathcal{W}$ -Mollifier. Für $f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$ und

$\delta_x^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{L}')$ gilt offenbar

$$\langle \mathcal{L}f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{W} \times \mathcal{W}'} = \langle f, \mathcal{L}'\delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}'},$$

d. h. ersetzt man im ursprünglichen dualen Problem (1.21) die rechte Seite durch $\mathcal{L}'\delta_x^\gamma$, erhält man durch Lösung von

$$\mathcal{A}'\psi_x^{\mathcal{L},\gamma} = \mathcal{L}'\delta_x^\gamma, \quad x \in \Omega \quad (1.23)$$

einen Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{L}f$.

1.32 Definition ($\mathcal{L}$ -Approximative Inverse)

Eine Familie $\{\psi_x^{\mathcal{L},\gamma}\}_{x \in \Omega}^{\gamma > 0} \subset \mathcal{Y}'$, die zu einem gegebenen $\mathcal{W}$ -Mollifier δ_x^γ für alle $x \in \Omega$, $\gamma > 0$ Gleichung (1.23) erfüllen, heißt *Rekonstruktionskern bzgl. δ_x^γ zur Approximation von $\mathcal{L}\mathcal{A}^{-1}$* . Die Operatorfamilie $\{\mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma}\}_{\gamma > 0}$, definiert durch

$$\mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma}g(x) = \langle g, \psi_x^{\mathcal{L},\gamma} \rangle_{\mathcal{Y} \times \mathcal{Y}'}, \quad g \in Y, \quad (1.24)$$

heißt *$\mathcal{L}$ -approximative Inverse* zu $\mathcal{A}$ bzgl. δ_x^γ . $\square$

Es lässt sich nun leicht zeigen, dass $\mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma}$ eine Regularisierung von $\mathcal{L}\mathcal{A}^{-1}$ ist, sofern die Bedingungen von Satz 1.30 mit $\mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma}$ statt $\mathcal{A}^\gamma$ erfüllt sind. Dies bedeutet konkret, dass mit den Bezeichnungen aus Definition 1.29 die Konvergenz

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\mathcal{L}\mathcal{A}^{-1}g - \mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma(\delta)}g^\delta\|_X = 0$$

gilt. In Abschnitt 1.3.2 wird anhand einer konkreten Klasse von Analyseoperatoren $\mathcal{L}$ auf Hilberträumen am Beispiel der 2d-Röntgen-Transformation dargelegt, wie sich die Rekonstruktionskerne in diesem Fall berechnen lassen und wann die Bedingungen für die Regularisierungseigenschaft erfüllt sind.

1.2.2 AI in Hilberträumen

Bisher war stets die Annahme gültig, dass $\mathcal{A}$ injektiv ist und somit ein dicht definierter inverser Operator $\mathcal{A}^{-1}$ existiert. In Hilberträumen kann auf diese Voraussetzung verzichtet werden, denn nach Satz 1.22 existiert zu jedem abgeschlossenen und dicht definierten Operator eine Moore-Penrose-Inverse $\mathcal{A}^\dagger$, welche die Rolle von $\mathcal{A}^{-1}$ übernimmt. Zudem kann das Verfahren der approximativen Inversen dahingehend verallgemeinert werden, dass der Mollifier nicht mehr im Bild von $\mathcal{A}^*$ liegen muss wie zuvor in (1.21).

Sei dazu δ_x^γ ein $\mathcal{X}$ -Mollifier. Gesucht ist nun ein Rekonstruktionskern als Lösung des Problems

$$\|\mathcal{A}^*\psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma\|_X \longrightarrow \min, \quad x \in \Omega,$$

das sich äquivalent schreiben lässt als

$$\mathcal{A}^* \psi_x^\gamma = \mathcal{Q} \delta_x^\gamma, \quad x \in \Omega \quad (1.25)$$

mit dem orthogonalen Projektor $\mathcal{Q}$ auf $\overline{\mathcal{R}(\mathcal{A}^*)} = \mathcal{N}(\mathcal{A})^\perp$. Eine weitere äquivalente Formulierung ist

$$\overline{\mathcal{A}}(\mathcal{A}^* \psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (1.26)$$

vgl. Lemma 1.20. Offenbar gibt es eine Lösung ψ_x^γ dieser Normalgleichung genau dann, wenn $\delta_x^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{A}^*) \oplus \mathcal{R}(\mathcal{A}^*)^\perp$ gilt. Mit Hilfe dieser Formulierung lässt sich die approximative Inverse folgendermaßen verallgemeinern:

1.33 Definition (Approximative Inverse II)

Eine Familie $\{\psi_x^\gamma\}_{x \in \Omega}^{\gamma > 0}$ mit (1.26) für alle $x \in \Omega$, $\gamma > 0$ heißt *Rekonstruktionskern* bzgl. δ_x^γ zur *Approximation von $\mathcal{A}^\dagger$* . Die Operatorfamilie $\{\mathcal{A}^\gamma\}_{\gamma > 0}$ definiert durch

$$\mathcal{A}^\gamma g(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y}}, \quad g \in Y, \quad (1.27)$$

heißt *approximative Inverse* zu $\mathcal{A}$ bzgl. δ_x^γ . $\square$

Auch der Begriff der Regularisierung lässt sich ausdehnen.

1.34 Definition (Regularisierung II)

Seien $g \in \mathcal{R}(\mathcal{A})$ und $(g^\delta)_{\delta > 0} \subset \mathcal{Y}$ mit $\|g - g^\delta\|_{\mathcal{Y}} \leq \delta$. Eine Familie $(\mathcal{A}^\gamma)_{\gamma > 0}$ von Operatoren $\mathcal{A}^\gamma : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$ heißt *Regularisierung von $\mathcal{A}^\dagger$* , wenn es eine *Parameterwahl* $\gamma = \gamma(\delta, g^\delta)$ gibt mit $\lim_{\delta \rightarrow 0} \gamma(\delta, g^\delta) = 0$, so dass

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\mathcal{A}^\dagger g - \mathcal{A}^{\gamma(\delta, g^\delta)} g^\delta\|_{\mathcal{X}} = 0.$$

$\square$

Häufig findet man eine Variante dieser Definition, in der die Bedingung $g \in \mathcal{R}(\mathcal{A})$ ersetzt ist durch $g \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$, d. h. die exakten Daten dürfen Anteile besitzen, die nicht im Bild des Operators liegen. In obiger Version werden solche Modellfehler, die senkrecht auf dem Bild stehen, nicht berücksichtigt. Da es jedoch ohnehin nicht möglich ist, sämtliche Modellfehler, über deren Struktur sich i. a. nur wenig sagen lässt, bei der Rekonstruktion zu eliminieren (Anteile in $\partial \mathcal{R}(\mathcal{A})$ können nicht kontrolliert werden), wird obige, etwas schwächere Form der Regularisierung angewandt.

1.35 Korollar (Analogon zu Korollar 1.31)

Seien $\mathcal{X} = L^2(\Omega)$ und $\mathcal{Y} = L^2(S)$ für einen Maßraum (S, μ) . Weiterhin sei ψ_x^γ ein Rekonstruktionskern zum $\mathcal{X}$ -Mollifier δ_x^γ . Dann gilt mit

$$r^\gamma(z) = \left(\int_{\Omega} |\psi_x^\gamma(z)|^2 dx \right)^{1/2}, \quad z \in S,$$

dass die Bedingungen

$$\gamma(\delta) = o(1), \quad \|r^{\gamma(\delta)}\|_{L^2(S)} = o(\delta^{-1}) \quad (\delta \rightarrow 0)$$

hinreichend dafür sind, dass $\mathcal{A}^\gamma$ eine Regularisierung von $\mathcal{A}^\dagger$ ist.

Beweis: Zu zeigen ist lediglich, dass $\|\mathcal{A}^\dagger g - \mathcal{A}^\gamma g\|_{\mathcal{X}} \rightarrow 0$ für $g = \mathcal{A}f \in \mathcal{R}(\mathcal{A})$. Da Projektoren in Hilberträumen selbstadjungiert sind, ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^\gamma g(x) &= \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{Y}} = \langle f, \mathcal{A}^* \psi_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}} = \langle f, \mathcal{Q} \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}} \\ &= \langle \mathcal{Q} f, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}} = \langle \mathcal{A}^\dagger g, \delta_x^\gamma \rangle_{\mathcal{X}}. \end{aligned}$$

Nach Konstruktion von δ_x^γ folgt die Behauptung. $\square$

Im nächsten Schritt ist das Produkt $\mathcal{B} = \mathcal{S}\mathcal{A}$ eines dicht definierten und abgeschlossenen linearen Operators $\mathcal{A}$ mit einem stetigen, injektiven linearen Operator $\mathcal{S}$ Gegenstand der Betrachtung. Ist $\mathcal{B}$ abschließbar und damit $\mathcal{B}^*$ dicht definiert, dann gibt es ohne weitere Voraussetzungen eine Moore-Penrose-Inverse $(\mathcal{B}^*)^\dagger$, die jedoch (auch bei stetigen Operatoren) im allgemeinen nicht mit der Komposition $(\mathcal{S}^*)^\dagger(\mathcal{A}^*)^\dagger$ übereinstimmt. Insofern kann man nicht erwarten, dass der Rekonstruktionskern zur Inversion des zusammengesetzten Operators $\mathcal{B}$ sich durch sukzessive Lösung der Teilprobleme ergibt. Der folgende Satz zeigt, dass unter gewissen Voraussetzungen die Minimierungseigenschaft erhalten bleibt.

1.36 Satz

Sei $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$, und $\mathcal{S} \in \ell(\mathcal{Y})$ sei so gewählt, dass $\mathcal{B} = \mathcal{S}\mathcal{A}$ abschließbar ist (vgl. Lemmata 1.14 und 1.15). Desweiteren sei δ_x^γ ein $\mathcal{X}$ -Mollifier mit $\delta_x^\gamma \in \mathcal{D}((\mathcal{A}^*)^\dagger) = \mathcal{R}(\mathcal{A}^*) \oplus \mathcal{R}(\mathcal{A}^*)^\perp$. Es gelte

$$\begin{aligned} w_x^\gamma &= (\mathcal{A}^*)^\dagger \delta_x^\gamma, \\ \mathcal{S}^* \psi_x^\gamma &= w_x^\gamma. \end{aligned}$$

Dann ist ψ_x^γ ein Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{B}^\dagger$.

Beweis: Nach Konstruktion ist $\mathcal{S}^* \psi_x^\gamma = (\mathcal{A}^*)^\dagger \delta_x^\gamma$. Aufgrund von Satz 1.22 f) liegt $r = \mathcal{A}^* \mathcal{S}^* \psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma$ in $\mathcal{N}(\mathcal{A})$, also insbesondere in $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{B})$. Daher gilt $0 = \mathcal{B}r = \bar{\mathcal{B}}r = \mathcal{B}^{**}r$, das heißt ψ_x^γ erfüllt die Normalgleichung

$$\mathcal{B}^{**}(\mathcal{B}^* \psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma) = 0$$

und somit die Bedingung (1.26) für einen Rekonstruktionskern. $\square$

Der nächste Satz zeigt, wie sich die Eigenschaft eines Mollifiers, durch Translation erzeugt zu werden, auf den Rekonstruktionskern überträgt, sofern der Operator $\mathcal{A}$ eine Vertauschungsrelation mit der Translation erfüllt. Durch die Ausnutzung dieser Struktur lässt sich das Problem der Bestimmung des Rekonstruktionskerns für *jedes* $x \in \Omega$ auf das Bestimmungsproblem für *ein* $x_0 \in \Omega$ reduzieren. Für den allgemeineren Fall von Banachräumen gilt eine analoge Aussage [SS10, Lemma 1].

1.37 Satz (Vertauschungsrelationen, vgl. [Lou11, Theorem 3.5])

Sei $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$. Zu jedem $x \in \Omega$ gebe es $\mathcal{T}_x^1 \in \ell(\mathcal{X})$ mit $\mathcal{T}_x^1(\mathcal{N}(\mathcal{A})) = \mathcal{N}(\mathcal{A})$ sowie $\mathcal{T}_x^2 \in \ell(\mathcal{Y})$, so dass die Vertauschungsrelation

$$\mathcal{T}_x^1 \mathcal{A}^* = \mathcal{A}^* \mathcal{T}_x^2$$

gilt.

a) Ist $\delta_x^\gamma = \mathcal{T}_x^1 \eta^\gamma$ ein $\mathcal{X}$ -Mollifier und erfüllt ϕ^γ die Normalgleichung

$$\mathcal{A}(\mathcal{A}^* \phi^\gamma - \eta^\gamma) = 0$$

so ist $\psi_x^\gamma = \mathcal{T}_x^2 \phi^\gamma$ ein Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{A}^\dagger$.

b) Sei $\delta_x^\gamma = \mathcal{T}_x^3 \eta^\gamma$ mit $\mathcal{T}_x^3 \in \ell(\mathcal{W})$ ein $\mathcal{W}$ -Mollifier. Für $\mathcal{L} \in c(\mathcal{X}, \mathcal{W})$ gelte

$$\mathcal{L}^* \mathcal{T}_x^3 = \mathcal{T}_x^1 \mathcal{L}^*.$$

Löst $\phi^{\mathcal{L}, \gamma}$ die Normalgleichung

$$\mathcal{A}(\mathcal{A}^* \phi^{\mathcal{L}, \gamma} - \mathcal{L}^* \eta^\gamma) = 0,$$

dann ist $\psi_x^{\mathcal{L}, \gamma} = \mathcal{T}_x^2 \phi^{\mathcal{L}, \gamma}$ ein Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{L} \mathcal{A}^\dagger$.

Beweis: Nach Konstruktion gilt im Fall a)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathcal{A}^* \psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma) &= \mathcal{A}(\mathcal{A}^* \mathcal{T}_x^2 \phi^\gamma - \mathcal{T}_x^1 \eta^\gamma) \\ &= \mathcal{A} \mathcal{T}_x^1 (\mathcal{A}^* \phi^\gamma - \eta^\gamma) \\ &= 0, \end{aligned}$$

da mit $r = (\mathcal{A}^* \phi^\gamma - \eta^\gamma)$ auch $\mathcal{T}_x^1 r$ in $\mathcal{N}(\mathcal{A})$ liegt. Teil b) beweist man analog, indem man zusätzlich die Vertauschungsrelation für $\mathcal{L}^*$ anwendet. $\square$

1.38 Beispiel (Fraktionelle Ableitung)

Für den stetigen Translationsoperator $\mathcal{T}_t^1 f(s) = f(s - t)$ gilt mit der Darstellung

(1.14) des Adjungierten $\mathcal{A}_\beta^*$ die Vertauschungsrelation

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_\beta^* \mathcal{T}_t^1 f(s) &= \Gamma(\beta)^{-1} \int_s^\infty \mathcal{T}_t^1 f(r) (r-s)^{\beta-1} dr \\
&= \Gamma(\beta)^{-1} \int_s^\infty f(r-t) (r-s)^{\beta-1} dr \\
&= \Gamma(\beta)^{-1} \int_{s-t}^\infty f(r) (r+t-s)^{\beta-1} dr \\
&= \mathcal{A}_\beta^* f(s-t) \\
&= \mathcal{T}_t^1 \mathcal{A}_\beta^* f(s).
\end{aligned}$$

Wählt man nun gemäß Satz 1.37 einen Mollifier

$$\delta_t^\gamma(s) = \mathcal{T}_t^1 \eta^\gamma(s) = \eta^\gamma(s-t),$$

mit $\eta^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{A}_\beta^*)$ so vererbt sich diese Verschiebungsstruktur auf den Rekonstruktionkern. Löst nämlich $\phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta^*)$ die Gleichung

$$\mathcal{A}_\beta^* \phi^\gamma = \eta^\gamma,$$

was nach (1.13) gleichbedeutend ist mit

$$\widehat{\phi^\gamma}(\sigma) = (i\sigma)^\beta \widehat{e^\gamma}(\sigma),$$

so ist $\psi_t^\gamma = \mathcal{T}_t^1 \phi^\gamma$ ein Rekonstruktionkern zu δ_t^γ . Die Rekonstruktionsformel zur Lösung von $\mathcal{A}_\beta f = g$ erhält man nun gemäß

$$\begin{aligned}
\langle f, \delta_t^\gamma \rangle_{L^2(\mathbb{R})} &= \langle g, \mathcal{T}_t^1 \phi^\gamma \rangle_{L^2(\mathbb{R})} && \text{(Lemma 1.28)} \\
&= \int_{\mathbb{R}} g(s) \phi^\gamma(s-t) ds \\
&= g * \check{\phi}^\gamma(t)
\end{aligned}$$

mit $\check{f}(t) = f(-t)$ und der 1d-Faltung gemäß Definition A.4. Andererseits gilt

$$\begin{aligned}
f^\gamma(t) &= \langle f, \mathcal{T}_t^1 \eta^\gamma \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \\
&= \int_{\mathbb{R}} f(s) e^\gamma(s-t) ds \\
&= f * \check{e}^\gamma(t),
\end{aligned}$$

d. h. die Approximation an die gesuchte Lösung ergibt sich als

$$f^\gamma = f * \check{e}^\gamma = g * \check{\phi}^\gamma.$$

□

1.3 2d-Röntgen-Transformation (RT)

Die zweidimensionale Röntgen-Transformation bzw. die bis auf Parametrisierung äquivalente Radon-Transformation dient in vielen Arbeiten zu inversen Problemen als Anschauungsbeispiel, da sich an ihr typische Phänomene, analytische Strukturen und numerische Schwierigkeiten gut aufzeigen lassen. Diese Arbeit fasst sie als unbeschränkten Operator auf und untersucht ihre Eigenschaften im Hinblick auf die Theorie im vorhergehenden Abschnitt. Darüber hinaus spielt die 2d-Röntgen-Transformation eine entscheidende Rolle im mathematischen Modell der Elektronen-Tomographie in Kapitel 2, weshalb eine umfassende Betrachtung an dieser Stelle sinnvoll erscheint.

1.3.1 Analytische Eigenschaften

Eine umfassende Abhandlung über die Röntgen-Transformation als unbeschränkter Operator findet sich in den beiden Arbeiten [Sol76] und [SSW77], die als Basis für diesen Abschnitt dienen. Die dort erarbeiteten Resultate werden hier für den zweidimensionalen Fall, der später in Abschnitt 2.7 wieder aufgegriffen wird, formuliert und ergänzt.

1.39 Definition (2d-Röntgen-Transformation)

Sei $S_+^1 = \{\theta \in S^1 \mid \theta_2 > 0\}$ der obere Halbkreis und

$$\mathcal{T}^2 = \{(\theta, b) \mid \theta \in S_+^1, b \in \theta^\perp\} \quad (1.28)$$

das entsprechende Tangentialbündel. Die *2d-Röntgen-Transformation* sei definiert gemäß

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_2 : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{P}_2) &\longrightarrow \mathcal{Y} \\ \mathcal{P}_2 f(\theta, b) &= \int_{\mathbb{R}} f(\lambda\theta + b) \, d\lambda, \quad (\theta, b) \in \mathcal{T}^2 \end{aligned} \quad (1.29)$$

als Abbildung zwischen den Hilberträumen $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^2)$ und $\mathcal{Y} = L^2(\mathcal{T}^2)$. Der Definitionsbereich ist dabei der in (A.3) definierte Raum $S(\mathbb{R}^2)$ der schnell fallenden Funktionen auf $\mathbb{R}^2$. $\square$

Die folgenden Eigenschaften von $\mathcal{P}_2$ finden sich in [Sol76] bzw. der einschlägigen Literatur zur Röntgen-Transformation [Nat86, Nat04] und zur Approximation in Hilberträumen.

1.40 Satz (Eigenschaften und Inversionsformel der RT)

Die Röntgen-Transformation besitzt folgende Eigenschaften:

- a) $\mathcal{D}(\mathcal{P}_2)$ liegt dicht in $\mathcal{X}$.
- b) $\mathcal{N}(\mathcal{P}_2) = \{0\}$, d. h. $\mathcal{P}_2$ ist injektiv.
- c) $\mathcal{P}_2$ ist abschließbar mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) \mid |\zeta|^{-1/2} \widehat{f} \in L^2(\mathbb{R}^2)\}. \quad (1.30)$$

- d) Der adjungierte Operator ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_2^* : \mathcal{Y} \supset \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*) &\longrightarrow \mathcal{X} \\ \mathcal{P}_2^* g(z) &= \int_{\mathbb{S}_+^1} g(\theta, \Pi_\theta z) d\theta, \quad z \in \mathbb{R}^2, \end{aligned} \quad (1.31)$$

wobei $\Pi_\theta z = z - \langle z, \theta \rangle \theta$ und

$$\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*) = \{g \in L^2(\mathcal{T}^2) \mid \|\mathcal{P}_2^* g\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} < \infty\}. \quad (1.32)$$

- e) Für $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2})$ und $g = \overline{\mathcal{P}_2} f$ gilt die Inversionsformel

$$f = (2\pi)^{-1} \Lambda^{1/2} \mathcal{P}_2^* \Lambda_b^{1/2} g \quad (1.33)$$

mit

$$(\Lambda^s f)^\wedge(\zeta) = |\zeta|^s \widehat{f}(\zeta), \quad \mathcal{F}_b \Lambda_b^s g(\theta, \beta) = |\beta|^s \mathcal{F}_b g(\theta, \beta). \quad (1.34)$$

Hierbei bezeichnet $(\cdot)^\wedge$ die Fourier-Transformation von $(\cdot)$ und $\mathcal{F}_b$ die FT auf $\mathcal{T}^2$ bezüglich der zweiten Variablen, vgl. Definitionen A.1 und A.3.

Bemerkungen:

- a) Für $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2})$ lässt sich die Funktion $\overline{\mathcal{P}_2} f$ nicht mehr notwendigerweise durch das Integral (1.29) darstellen, da die Integrierbarkeit über Geraden nicht garantiert werden kann, siehe [Sol76, Remark 2.6]. Aus diesem Grund ist auch die naheliegende Definition

$$\mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2}) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^2) \mid \int_{\mathbb{S}_+^1} \|\mathcal{P}_2 f(\theta, \cdot)\|_{L^2(\theta^\perp)}^2 d\theta < \infty \right\}$$

nicht ohne weiteres möglich.

- b) Aus der Injektivität von $\mathcal{P}_2$ folgt nicht die Injektivität von $\overline{\mathcal{P}_2}$.

- c) Ohne die Zusatzforderung der globalen Integrierbarkeit in der Definition von $\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ liegt für $g \in L^2(\mathcal{T}^2)$ die Funktion $\mathcal{P}_2^*g$ lediglich in $L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2)$ [Sol76, Lemma 4.1].
- d) Es gilt $(\overline{\mathcal{P}_2})^* = \mathcal{P}_2^*$ [Kab11, Satz 13.6 c)].
- e) Eine Verallgemeinerung [Sol76, Theorem 4.4] der Inversionsformel lässt sich mit Hilfe der Räume

$$\mathcal{D}_a = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) \mid |\zeta|^a \widehat{f} \in L^2(\mathbb{R}^2)\}, \quad a \in \mathbb{R},$$

herleiten. Für $a \geq 0$ stimmen sie mit den Sobolev-Räumen $H^a(\mathbb{R}^2)$ überein, und zudem ist $\mathcal{D}_{-1/2} = \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2})$. Gilt $f \in \mathcal{D}_{(a-1)/2} \cap \mathcal{D}_{-1/2}$ ($a \geq 1$) bzw. $f \in \mathcal{D}_{a/2-1}$ ($a < 1$), so folgt für $g = \overline{\mathcal{P}_2}f$ die Identität

$$f = (2\pi)^{-1} \Lambda^{1-a/2} \mathcal{P}_2^* \Lambda_b^{a/2} g.$$

Im Fall $a = 2$, d. h. $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2}) \cap H^{1/2}$, ergibt sich die klassische Inversionsformel

$$f = (2\pi)^{-1} \mathcal{P}_2^* \Lambda_b g.$$

□

1.41 Satz

Zu $\zeta \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ sei $\hat{\zeta}$ derjenige Einheitsvektor senkrecht zu ζ , der in $\mathcal{S}_+^1$ liegt. Dann gilt für $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$:

$$(\mathcal{P}_2^*g)^\wedge(\zeta) = (2\pi)^{1/2} |\zeta|^{-1} \mathcal{F}_b g(\hat{\zeta}, \zeta).$$

Beweis: Es wird gezeigt, dass die Behauptung im distributionellen Sinne gilt. Sei dazu $w = \widehat{u}$ die Fourier-Transformierte einer reellwertigen Funktion $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$. Dann gilt nach Definition von $\mathcal{P}_2^*$ und der Verschiebungsregel (A.10):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{P}_2^*g(z) \widehat{w}(z) \, dz &= \int_{\mathcal{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} g(\theta, b) \mathcal{P}_2 \widehat{w}(\theta, b) \, db \, d\theta \\ &= \int_{\mathcal{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} \mathcal{F}_b g(\theta, \beta) \mathcal{F}_b^{-1} \mathcal{P}_2 \widehat{w}(\theta, \beta) \, d\beta \, d\theta. \end{aligned}$$

Da nach (A.8) mit $\widehat{w} = u(-\cdot)$ auch $\mathcal{P}_2 \widehat{w}$ reellwertig ist, folgt

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_b^{-1} \mathcal{P}_2 \widehat{w}(\theta, \beta) &= \overline{\mathcal{F}_b \mathcal{P}_2 \widehat{w}(\theta, \beta)} && \text{(nach (A.9))} \\
&= (2\pi)^{1/2} \overline{\mathcal{F}^2 w(\beta)} && \text{(nach (A.27))} \\
&= (2\pi)^{1/2} \overline{w(-\beta)} && \text{(nach (A.8))} \\
&= (2\pi)^{1/2} \widehat{w(-\beta)} && \text{(Def. von } w) \\
&= (2\pi)^{1/2} w(\beta) && \text{(nach Satz A.2 c).}
\end{aligned}$$

Unter Verwendung der Transformationsformel aus Lemma A.8 erhält man

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{P}_2^* g(z) \widehat{w}(z) \, dz &= (2\pi)^{1/2} \int_{S_+^1} \int_{\theta^\perp} \mathcal{F}_b g(\theta, \beta) w(\beta) \, d\beta \, d\theta \\
&= (2\pi)^{1/2} \int_{\mathbb{R}^2} |\zeta|^{-1} \mathcal{F}_b g(\hat{\zeta}, \zeta) w(\zeta) \, d\zeta.
\end{aligned}$$

Dies zeigt die Behauptung im distributionellen Sinn, und wegen $\mathcal{P}_2^* g \in L^2(\mathbb{R}^2)$ gilt sie auch im klassischen Sinn. $\square$

1.42 Korollar

Der Definitionsbereich von $\mathcal{P}_2^*$ besitzt die Darstellung

$$\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*) = \{g \in L^2(\mathcal{T}^2) \mid |\beta|^{-1/2} \mathcal{F}_b g \in L^2(\mathcal{T}^2)\}.$$

Beweis: Mit der Definition (1.32) von $\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ ist $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ äquivalent zu

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_2^* g \in L^2(\mathbb{R}^2) &\Leftrightarrow \\
&\infty > \int_{\mathbb{R}^2} |\mathcal{P}_2^* g(z)|^2 \, dz \\
&= \int_{\mathbb{R}^2} |(\mathcal{P}_2^* g)^\wedge(\zeta)|^2 \, d\zeta && \text{(nach (A.5))} \\
&= 2\pi \int_{\mathbb{R}^2} |\zeta|^{-2} |\mathcal{F}_b g(\hat{\zeta}, \zeta)|^2 \, d\zeta && \text{(nach Satz 1.41)} \\
&= 2\pi \int_{S_+^1} \int_{\theta^\perp} |\beta|^{-1} |\mathcal{F}_b g(\theta, \beta)|^2 \, d\beta \, d\theta && \text{(nach Lemma A.8).}
\end{aligned}$$

$\square$

Aus diesen Erkenntnissen lässt sich unmittelbar eine Inversionsformel für den adjungierten Operator herleiten.

1.43 Satz (Inversionsformel des Adjungierten)

Sei $f = \mathcal{P}_2^* g$ für ein $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$. Dann gilt

$$g = (2\pi)^{-1} \Lambda_b^{1/2} \overline{\mathcal{P}_2} \Lambda^{1/2} f.$$

Beweis: Da $f = \mathcal{P}_2^* g$ in $L^2(\mathbb{R}^2)$ liegt, ist $\Lambda^{1/2} f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2})$ nach (1.30). Zudem ist nach [Sol76, Theorem 2.4] der Operator

$$V = (2\pi)^{-1/2} \Lambda_b^{1/2} \overline{\mathcal{P}_2} : L^2(\mathbb{R}^2) \longrightarrow L^2(\mathcal{T}^2)$$

eine Isometrie. Mit den Projektionssätzen für $\overline{\mathcal{P}_2}$ und $\mathcal{P}_2^*$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_b V \Lambda^{1/2} f(\theta, \beta) &= |\beta|^{1/2} (\Lambda^{1/2} f)^\wedge(\beta) && \text{(nach (A.27))} \\ &= |\beta| \widehat{f}(\beta) \\ &= (2\pi)^{1/2} \mathcal{F}_b g(\theta, \beta) && \text{(nach Satz 1.41).} \end{aligned}$$

Durch Anwendung von $(2\pi)^{-1/2} \mathcal{F}_b^{-1}$ erhält man die behauptete Identität. $\square$

Bemerkung: Analog zu Punkt e) in der Bemerkung nach Satz 1.40 lässt sich auch für $\mathcal{P}_2^*$ eine Schar von Inversionsformeln herleiten, die unter stärkeren Regularitätsannahmen an g gültig sind. Da diese jedoch im weiteren Verlauf nicht von Belang sind, werden sie nicht explizit angegeben. $\square$

Ein weiterer Aspekt, der im Hinblick auf die approximative Inverse eine wichtige Rolle spielt, ist die Vertauschung der RT mit Translationsoperatoren. Das folgende Lemma weist die Voraussetzungen von Satz 1.37 für $\overline{\mathcal{P}_2}$ nach.

1.44 Lemma

Für ein beliebiges $z \in \mathbb{R}^2$ erfüllen die Translationsoperatoren

$$\mathcal{T}_z^1 f(w) = f(z - w), \quad \mathcal{T}_z^2 g(\theta, b) = g(\theta, \Pi_\theta z - b) \quad (1.35)$$

mit $\Pi_\theta z = z - \langle z, \theta \rangle \theta$ die Vertauschungsrelation $\mathcal{T}_z^1 \mathcal{P}_2^* = \mathcal{P}_2^* \mathcal{T}_z^2$, und der Nullraum $\mathcal{N}(\overline{\mathcal{P}_2})$ ist invariant unter $\mathcal{T}_z^1$.

Beweis: Nach Satz A.2 f) gilt

$$\mathcal{F}_b \mathcal{T}_z^2 g(\theta, \beta) = e^{-i\langle \beta, \Pi_\theta z \rangle} \mathcal{F}_b g(\theta, \beta),$$

weshalb $\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ invariant ist unter $\mathcal{T}_z^2$. Für $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_2^* \mathcal{T}_z^2 g(w) &= \int_{\mathbb{S}_+^1} \mathcal{T}_z^2 g(\theta, \Pi_\theta w) \, d\theta \\ &= \int_{\mathbb{S}_+^1} g(\theta, \Pi_\theta z - \Pi_\theta w) \, d\theta \\ &= \int_{\mathbb{S}_+^1} g(\theta, \Pi_\theta(z - w)) \, d\theta \\ &= \mathcal{P}_2^* g(z - w) \\ &= \mathcal{T}_z^1 \mathcal{P}_2^* g(w).\end{aligned}$$

Da offenbar $\mathcal{T}_z^1$ eine Isometrie definiert, ist $f \in \mathcal{N}(\overline{\mathcal{P}_2}) = \mathcal{R}(\mathcal{P}_2^*)^\perp$ äquivalent zu

$$0 = \langle f, \mathcal{P}_2^* g \rangle_x = \langle \mathcal{T}_z^1 f, \mathcal{P}_2^* \mathcal{T}_z^2 g \rangle_x$$

für alle $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$. Wegen der Invarianz von $\mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ unter $\mathcal{T}_z^2$ folgt $f \in \mathcal{R}(\mathcal{P}_2^*)^\perp \Leftrightarrow \mathcal{T}_z^1 f \in \mathcal{R}(\mathcal{P}_2^*)^\perp$, d. h. $\mathcal{N}(\overline{\mathcal{P}_2})$ ist invariant unter $\mathcal{T}_z^1$. $\square$

1.3.2 AI zur 2d-Röntgen-Transformation

Nachdem nun die wichtigsten analytischen Eigenschaften bekannt sind, wird das Verfahren der approximativen Inversen für die Röntgen-Transformation konkretisiert. Nutzt man die Vertauschungsrelation, die zum Ende des vergangenen Abschnitts hergeleitet wurde, so ergibt sich mit dem folgenden Satz eine Rekonstruktionsformel vom Typ *gefilterte Rückprojektion*, d. h. Filterung (=Faltung) der Daten mit anschließender Rückprojektion (Anwendung des adjungierten Operators).

Notation: Zur Vereinfachung der Schreibweise sei ab jetzt $\mathcal{P}_2$ die *Abschließung* der 2d-RT.

1.45 Satz (AI zur 2d-RT mit Faltungsmollifier)

Sei $\delta_z^\gamma = \mathcal{T}_z^1 \eta^\gamma$ ein $L^2(\mathbb{R}^2)$ -Mollifier. Die Faltung $*_b$ bzgl. der Variablen b sei erklärt wie in (A.25). Dann ist die Operatorfamilie $\{\mathcal{P}_2^\gamma\}_{\gamma>0}$ definiert durch

$$\mathcal{P}_2^\gamma g = \mathcal{P}_2^*(g *_b \phi^\gamma)$$

eine approximative Inverse zu $\mathcal{P}_2$, sofern $g *_b \phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ für alle $g \in L^2(\mathcal{T}^2)$ gilt und ϕ^γ die Normalgleichung

$$\mathcal{P}_2(\mathcal{P}_2^* \phi^\gamma - \eta^\gamma) = 0$$

löst.

Beweis: Aufgrund der Sätze 1.37 und 1.44 ist $\psi_z^\gamma = \mathcal{T}_z^2 \phi^\gamma$ ein Rekonstruktionskern zu $\mathcal{P}_2$. Der entsprechende Operator $\mathcal{P}_2^\gamma$ lässt sich darstellen als

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_2^\gamma g(z) &= \langle g, \psi_z^\gamma \rangle_{L^2(\mathcal{T}^2)} \\
&= \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} g(\theta, b) \mathcal{T}_z^2 \phi^\gamma(\theta, b) \, db \, d\theta \\
&= \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} g(\theta, b) \phi^\gamma(\theta, \Pi_\theta z - b) \, db \, d\theta \\
&= \int_{\mathbb{S}_+^1} g *_b \phi^\gamma(\theta, \Pi_\theta z) \, d\theta \\
&= \mathcal{P}_2^*(g *_b \phi^\gamma)(z).
\end{aligned}$$

□

Ob das hier hergeleitete Verfahren eine Regularisierung darstellt, hängt laut Satz 1.30 entscheidend davon ab, wie sich die Norm der approximativen Inversen abschätzen lässt. Das folgende Lemma leitet eine allgemeine Abschätzung her, und der darauf folgende Satz liefert für spezielle Mollifier die angestrebte Regularisierungseigenschaft.

1.46 Lemma (Normabschätzung der AI)

*Gilt $\mathcal{F}_b h \in L^\infty(\mathcal{T}^2)$ sowohl für $h = \phi^\gamma$ als auch für $h = \Lambda_b^{-1/2} \phi^\gamma$, so ist $g *_b \phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ für alle $g \in L^2(\mathcal{T}^2)$. Die Norm der approximativen Inversen lässt sich abschätzen gemäß*

$$\|\mathcal{P}_2^\gamma\| \leq 2\pi \sup_{(\theta, \beta) \in \mathcal{T}^2} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_b \phi^\gamma(\theta, \beta)|.$$

Beweis: Für $g \in L^2(\mathcal{T}^2)$ ist unter obigen Voraussetzungen an ϕ^γ das Produkt $(2\pi)^{1/2} \mathcal{F}_b g \cdot \mathcal{F}_b \phi^\gamma$ ein Element von $L^2(\mathcal{T}^2)$, und dasselbe gilt für $(2\pi)^{1/2} \mathcal{F}_b g \cdot \mathcal{F}_b \Lambda_b^{-1/2} \phi^\gamma$. Daher lässt sich der Faltungssatz anwenden und mit Korollar 1.42 nachweisen, dass $g *_b \phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$. Für die FT von $\mathcal{P}_2^\gamma g$ gilt dann nach Satz 1.41

$$\begin{aligned}
(\mathcal{P}_2^\gamma g)^\wedge(\zeta) &= (\mathcal{P}_2^*(g *_b \phi^\gamma))^\wedge(\zeta) \\
&= (2\pi)^{1/2} |\zeta|^{-1} \mathcal{F}_b(g *_b \phi^\gamma)(\hat{\zeta}, \zeta) \\
&= 2\pi |\zeta|^{-1} \mathcal{F}_b g(\hat{\zeta}, \zeta) \mathcal{F}_b \phi^\gamma(\hat{\zeta}, \zeta),
\end{aligned}$$

d. h. die Norm von $\mathcal{P}_2^\gamma$ lässt sich abschätzen gemäß

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{P}_2^\gamma g\|_{L^2(\mathcal{T}^2)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^2} |(\mathcal{P}_2^\gamma g)^\wedge(\zeta)|^2 d\zeta \\
&= 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}^2} |\zeta|^{-2} |\mathcal{F}_b g(\hat{\zeta}, \zeta) \mathcal{F}_b \phi^\gamma(\hat{\zeta}, \zeta)|^2 d\zeta \\
&= 4\pi^2 \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} |\beta|^{-1} |\mathcal{F}_b g(\theta, \beta) \mathcal{F}_b \phi^\gamma(\theta, \beta)|^2 d\beta d\theta \\
&\leq 4\pi^2 \sup_{(\theta, \beta) \in \mathcal{T}^2} \{|\beta|^{-1} |\mathcal{F}_b \phi^\gamma(\theta, \beta)|^2\} \|\mathcal{F}_b g\|_{L^2(\mathcal{T}^2)}^2.
\end{aligned}$$

Mit $\|\mathcal{F}_b g\|_{L^2(\mathcal{T}^2)} = \|g\|_{L^2(\mathcal{T}^2)}$ folgt die Behauptung. $\square$

Zur weiteren Konkretisierung des Verfahrens wird nun die erzeugende Funktion des Mollifiers festgelegt. Als Beispiele werden die folgenden Funktionen von $z \in \mathbb{R}^2$ betrachtet:

$$\eta_1^\gamma(z) = \pi^{-1} \gamma^{-2} \chi_{B_\gamma}(z), \quad (1.36)$$

$$\eta_2^\gamma(z) = (2\pi\gamma^2)^{-1} \frac{J_1(\gamma^{-1}|z|)}{\gamma^{-1}|z|}, \quad (1.37)$$

$$\eta_3^\gamma(z) = (2\pi\gamma^2)^{-1} \exp\left(-\frac{|z|^2}{2\gamma^2}\right). \quad (1.38)$$

Hierbei stellt χ_{B_γ} die charakteristische Funktion der um Null zentrierten Kugel mit Radius γ dar, und J_1 ist die Bessel-Funktion erster Art mit Index $\nu = 1$ [AS72]. Alle drei Funktionen besitzen Integralwert 1, und η_1^γ sowie η_3^γ sind Elemente von $L^1(\mathbb{R}^2) \cap L^2(\mathbb{R}^2)$. Folglich sind die Bedingungen von Satz 1.24 erfüllt und die entsprechenden Elemente $\delta_{x,j}^\gamma = \mathcal{T}_x^1 \eta_j^\gamma$ tatsächlich Mollifier im Sinne von Definition 1.23. Die Funktion η_2^γ ist kein Element von L^1 , so dass sie im strengen Sinne keinen Mollifier erzeugt. Dennoch wird sie hier aufgrund ihrer einfachen Struktur als Vergleich betrachtet.

Die Anwendung von $\delta_{x,1}^\gamma$ entspricht per definitionem einer (ungewichteten) lokalen Mittelung der Funktion über eine Kreisscheibe mit Radius γ , durch $\delta_{x,2}^\gamma$ werden gemäß (1.40) räumliche Frequenzen verworfen, die betragsmäßig größer sind als γ^{-1} , während der Gauß-Mollifier $\delta_{x,3}^\gamma$ gleichzeitig eine glättende Mittelung durchführt und hohe Frequenzen in einer glatten Art und Weise dämpft. Die Fourier-Transformierten sind bekanntermaßen gegeben durch

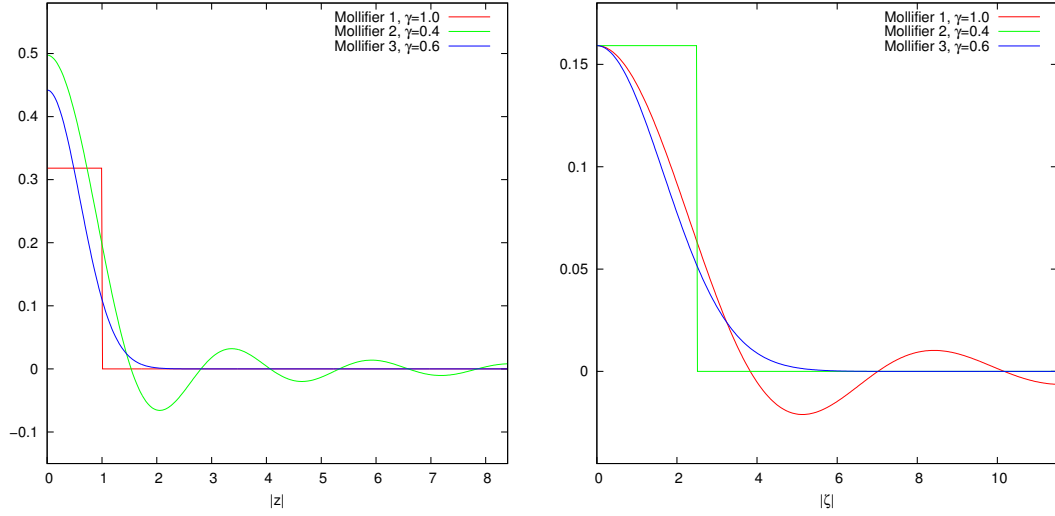


Abbildung 1.1 – Graphen der Mollifier (1.36)–(1.38) und ihrer Fourier-Transformierten (1.39)–(1.41). Der Parameter γ ist jeweils so gewählt, dass sich im Frequenzraum für alle drei Mollifier etwa die gleiche Breite ergibt.

$$\widehat{\eta}_1^\gamma(\zeta) = \pi^{-1} \frac{J_1(\gamma|\zeta|)}{\gamma|\zeta|}, \quad (1.39)$$

$$\widehat{\eta}_2^\gamma(\zeta) = (2\pi)^{-1} \chi_{B_{1/\gamma}}(\zeta), \quad (1.40)$$

$$\widehat{\eta}_3^\gamma(\zeta) = (2\pi)^{-1} \exp\left(-\frac{\gamma^2|\zeta|^2}{2}\right). \quad (1.41)$$

Mit diesen Darstellungen lassen sich die erzeugenden Funktionen der Rekonstruktionskerne explizit angeben, und auch die Regularisierungseigenschaft kann nachgewiesen werden.

1.47 Satz (AI als Regularisierungsverfahren)

Die Funktionen ϕ_j^γ , $j \in \{1, 2, 3\}$, definiert durch

$$\mathcal{F}_b \phi_j^\gamma(\theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \widehat{\eta}_j^\gamma(\beta), \quad \theta \in \mathcal{S}_+^1, \quad \beta \in \theta^\perp,$$

erfüllen $\mathcal{P}_2^* \phi_j^\gamma = \eta_j^\gamma$. Die dadurch definierten approximativen Inversen $\mathcal{P}_{2,j}^\gamma$ stellen Regularisierungsverfahren zur Approximation von $\mathcal{P}_2^\dagger$ dar, falls der Regularisierungsparameter γ gemäß

$$\gamma(\delta) = \mathcal{O}(\delta^q), \quad 0 < q < 2$$

gewählt wird.

Beweis: Die Eigenschaft $\phi_j^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ ist nach Korollar 1.42 erfüllt, falls das Integral

$$\int_{\theta^\perp} ||\beta|^{-1/2} \mathcal{F}_b \phi_j^\gamma(\theta, \beta)|^2 d\beta = \int_{\theta^\perp} ||\beta|^{1/2} \widehat{\eta_j^\gamma}(\beta)|^2 d\beta$$

konvergiert, denn der Wert ist wegen der Rotationssymmetrie der Mollifier unabhängig von θ , und das Integral über $\mathcal{S}_+^1$ ergibt lediglich den Zusatzfaktor π . Für $j = 2$ und $j = 3$ ist die Konvergenz aufgrund der Darstellungen (1.40) und (1.41) offensichtlich. Die Asymptotik $|J_1(r)| \sim r^{-1/2}$ für $r \rightarrow \infty$ und die Stetigkeit des Integranden sichert die Konvergenz auch im Fall $j = 1$. Somit folgt nach Satz 1.41 unmittelbar $\mathcal{P}_2^* \phi_j^\gamma = \eta_j^\gamma$.

Für die obere Schranke der Operatornorm in Lemma 1.46 gilt

$$\begin{aligned} 2\pi \sup_{(\theta, \beta) \in \mathcal{T}^2} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_b \phi_j^\gamma(\theta, \beta)| &= (2\pi)^{1/2} \sup_{(\theta, \beta) \in \mathcal{T}^2} |\beta|^{1/2} |\widehat{\eta_j^\gamma}(\beta)| \\ &= (2\pi)^{-1/2} \sup_{r \geq 0} w_j(r) \end{aligned}$$

mit den Funktionen

$$w_1(r) = 2\gamma^{-1/2} \frac{|J_1(\gamma r)|}{(\gamma r)^{1/2}},$$

$$w_2(r) = r^{1/2} \chi_{[0, \gamma^{-1}]}(r),$$

$$w_3(r) = r^{1/2} \exp\left(-\frac{\gamma^2 r^2}{2}\right),$$

die sich aus den Gleichungen (1.39)–(1.41) ergeben. Im Folgenden werden die Suprema dieser Hilfsfunktionen abgeschätzt.

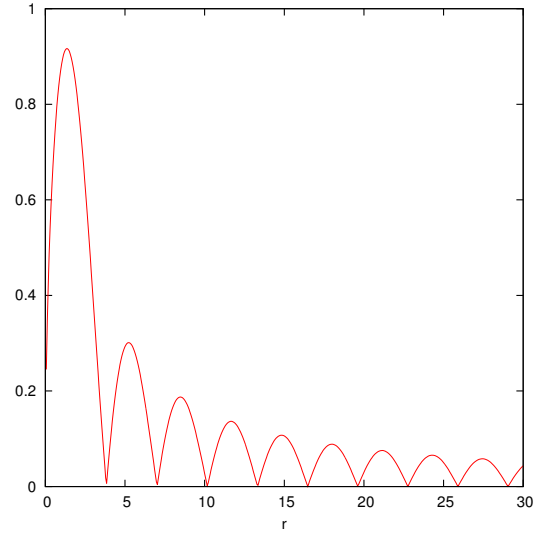


Abbildung 1.2 – Graph der Funktion $r \mapsto 2|J_1(r)|/r^{1/2}$

- i) Wegen $w_1(0) = 0 = \lim_{r \rightarrow \infty} w_1(r)$ und der Asymptotik von $J_1(r)$ für $r \gg 1$ muss das erste lokale Maximum von $r \mapsto 2|J_1(r)|/r^{1/2}$ bereits das absolute Maximum sein, dessen Funktionswert sich anhand des Graphen in Abbildung 1.2 grob gegen 1 abschätzen lässt. Es folgt $\sup w_1(r) \leq \gamma^{-1/2}$.
- ii) Die Funktion w_2 nimmt ihr Maximum offenbar an der rechten Intervallgrenze an, d. h. $\sup w_2(r) = \gamma^{-1/2}$.

- iii) Das einzige lokale Maximum von w_3 liegt bei $\bar{r} = (\sqrt{2}\gamma)^{-1}$ und ist wegen $w_3(0) = 0 = \lim_{r \rightarrow \infty} w_3(r)$ auch das globale Maximum. Der Funktionswert an dieser Stelle ist $w_3(\bar{r}) = (2e)^{-1/4} \gamma^{-1/2}$.

Folglich gilt für die entsprechenden approximativen Inversen die Abschätzung

$$\|\mathcal{P}_{2,j}^\gamma\| \leq c_j \gamma^{-1/2}$$

mit Konstanten $c_1 = c_2 = 1$ und $c_3 = (2e)^{-1/4}$. Mit der vorausgesetzten Parameterwahl $\gamma(\delta) = \mathcal{O}(\delta^q)$, $0 < q < 2$ ergibt sich daher die Asymptotik $\|\mathcal{P}_{2,j}^{\gamma(\delta)}\| = o(\delta^{-1})$. Nach Satz 1.30 ist damit $\mathcal{P}_{2,j}^\gamma$ eine Regularisierung zur Approximation von $\mathcal{P}_2^\dagger$. $\square$

Zuletzt wird nun anhand eines wichtigen Beispiels aufgezeigt, wie das am Ende von Abschnitt 1.2.1 skizzierte Verfahren der Feature-Rekonstruktion auf die 2d-Röntgen-Transformation angewandt werden kann. Die Aufgabe besteht darin, eine Approximation an $\mathcal{L}f$ aus den Daten $g = \mathcal{P}_2 f$ mit Hilfe eines Rekonstruktionskerns $\psi^{\mathcal{L},\gamma}$ zu berechnen.

Sei dazu $\mathcal{L}$ ein Operator, der im L^2 -Sinn formal die Eigenschaft

$$(\mathcal{L}f)^\wedge(\zeta) = u(\zeta)\hat{f}(\zeta), \quad (1.42)$$

erfüllt. Für den Definitionsbereich eines solchen Operators gilt offenbar

$$\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) \mid u \cdot \hat{f} \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (1.43)$$

Die reellwertige Funktion u sei dabei lokal beschränkt und von höchstens polynomiellem Wachstum für $|\zeta| \rightarrow \infty$, so dass $S(\mathbb{R}^2) \subset \mathcal{D}(\mathcal{L})$ gilt. Es lässt sich zudem leicht zeigen, dass $\mathcal{L}$ in diesem Fall selbstadjungiert ist.

Zwei wichtige Vertreter dieser Klasse von Operatoren sind Faltungsoperatoren mit integrierbarem Kern und Differentialoperatoren, die sich als $\mathcal{L} = p(-i\nabla)$ mit einem reellen Polynom p schreiben lassen, beispielsweise $\mathcal{L} = -i\partial_j$ oder $\mathcal{L} = -\Delta$. Solche Analyseoperatoren spielen in der Bildverarbeitung eine wichtige Rolle. So werden Faltungen zur Mustererkennung eingesetzt, indem die Korrelation $f * \chi$ mit der charakteristischen Funktion χ eines *Templates* berechnet wird, das eine bestimmte Form und Ausrichtung hat. Dieses Verfahren nennt man *template matching* [Ros03]. Die Funktion u in (1.42) ist dabei gegeben durch $u = 2\pi\hat{\chi}$. Differentialoperatoren kommen vor allem bei der Kantenerkennung zum Einsatz. Die partiellen Ableitungen $\partial_j f$ oder auch Δf fungieren dabei als Eingabedaten für Verfahren wie den Canny-Algorithmus [Can86] oder den Marr-Hildreth-Algorithmus [HM80]. Ist $\mathcal{L} = p(-i\nabla)$ ein solcher Operator, so lässt sich seine Anwendung im Frequenzraum als eine Multiplikation mit $u = p$ schreiben, vgl. Satz A.2 e).

Mit der Rechenregel für Translationen in Satz A.2 f) folgt die Vertauschungsrelation

$$(\mathcal{T}_z^1 \mathcal{L} \phi)^\wedge(\zeta) = e^{-i\langle z, \zeta \rangle} u(\zeta) \hat{\phi}(\zeta) = u(\zeta) (\mathcal{T}_z^1 \phi)^\wedge(\zeta) = (\mathcal{L} \mathcal{T}_z^1 \phi)^\wedge(\zeta)$$

für $\mathcal{L}^* = \mathcal{L}$, d. h. die Voraussetzungen von Satz 1.37 b) sind mit $\mathcal{W} = \mathfrak{X}$ und $\mathcal{T}_z^1 = \mathcal{T}_z^3$ erfüllt. Es genügt demnach, das Hilfsproblem

$$\mathcal{P}_2^* \phi^{\mathcal{L}, \gamma} = \mathcal{L} \eta^\gamma \quad (1.44)$$

zu lösen, woraus sich dann mit $\psi_z^{\mathcal{L}, \gamma} = \mathcal{T}_z^2 \phi^{\mathcal{L}, \gamma}$ ein Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{LP}_2^\dagger$ ergibt. Insgesamt lässt sich mit den bereits zuvor angewandten Techniken der folgende Satz herleiten, der die wichtigsten Punkte des Falles $\mathcal{L} = \text{id}_{\mathfrak{X}}$, nämlich Darstellung des Kerns, Rekonstruktionsformel und Normabschätzung der approximativen Inversen, auf Analyseoperatoren $\mathcal{L}$ mit der angegebenen Struktur (1.42) überträgt.

1.48 Satz

Sei $\eta^\gamma = \eta_j^\gamma$ für $j \in \{2, 3\}$. Dann erfüllt die Funktion $\phi^{\mathcal{L}, \gamma}$, definiert durch

$$\mathcal{F}_b \phi^{\mathcal{L}, \gamma}(\theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| u(\beta) \widehat{\eta^\gamma}(\beta),$$

die Gleichung $\mathcal{P}_2^* \phi^{\mathcal{L}, \gamma} = \mathcal{L} \eta^\gamma$. Die Operatorfamilie $\{\mathcal{P}_2^{\mathcal{L}, \gamma}\}_{\gamma > 0}$ mit

$$\mathcal{P}_2^{\mathcal{L}, \gamma} g = \mathcal{P}_2^*(g *_b \phi^{\mathcal{L}, \gamma}), \quad g \in L^2(\mathfrak{T}^2)$$

ist eine $\mathcal{L}$ -approximative Inverse zu $\mathcal{P}_2$, und es gilt

$$\|\mathcal{P}_2^{\mathcal{L}, \gamma}\| \leq (2\pi)^{1/2} \sup_{(\theta, \beta) \in \mathfrak{T}^2} |\beta|^{1/2} u(\beta) |\widehat{\eta^\gamma}(\beta)|.$$

Beweis: Wegen des höchstens polynomiellen Wachstums von u sind die Funktionen η_j^γ ($j = 2, 3$) Elemente von $\mathcal{D}(\mathcal{L})$, und die Argumentation im Beweis von Satz 1.47 lässt sich direkt auf $\phi^{\mathcal{L}, \gamma}$ übertragen, um die Identität $\mathcal{P}_2^* \phi^\gamma = \mathcal{L} \eta^\gamma$ nachzuweisen. Dass $\mathcal{P}_2^{\mathcal{L}, \gamma}$ eine $\mathcal{L}$ -approximative Inverse zu $\mathcal{P}_2$ definiert, ergibt sich analog zu Satz 1.45, indem man dort ϕ_j^γ durch $\phi_j^{\mathcal{L}, \gamma}$ ersetzt. $\square$

Bemerkung: Aufgrund der lokalen Beschränktheit von u lässt sich die Regularisierungseigenschaft für $\mathcal{P}_2^{\mathcal{L}, \gamma}$ mit $\eta^\gamma = \eta_2^\gamma$ leicht nachweisen, indem man die Konstante c_2 im Beweis von Satz 1.47 ersetzt durch $\tilde{c}_2 = \sup_{|\zeta| < \gamma} |u(\zeta)|$. Beim Gauß-Mollifier η_3^γ ist solch eine allgemeine Abschätzung nicht möglich. Hier lässt sich nur für konkrete Wahlen von u eine Aussage treffen. Bei der Funktion η_1^γ hingegen kann nicht davon ausgegangen werden, dass sie ein Element von $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ ist, da die Fourier-Transformierte nur langsam fällt. Aus diesem Grund ist der Fall $j = 1$ in obigem Satz nicht berücksichtigt. $\square$

Kapitel 2

Mathematische Modellierung der Elektronen-Tomographie (ET)

Ziel dieses Kapitels ist es, ein mathematisches Modell der *Elektronen-Tomographie* herzuleiten, auf welches die in Kapitel 1 entwickelte Theorie angewandt werden kann. Bei der ET handelt es sich um ein tomographisches Verfahren, bei dem zur Bildgebung ein Transmissionselektronenmikroskop (TEM) eingesetzt wird. Transmission bedeutet hierbei, dass die bildgebenden Elektronen die Probe durchdringen und von einem dahinter angebrachten Detektor registriert werden. Zudem wird die Probe nicht wie beim Rasterelektronenmikroskop Punkt für Punkt mit einem fokussierten Strahl abgetastet, sondern gleichmäßig auf der gesamten Fläche bestrahlt.

Der Strahlengang der Elektronen ist in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt. Jedes einzelne Elektron wird zunächst durch ein starkes elektrisches Feld beschleunigt, passiert eine Reihe von Linsen und Blenden und trifft auf die Probe, an der es gestreut wird. Anschließend wird es wiederum durch Linsen und Blenden so abgelenkt, dass auf dem Detektor schließlich ein vergrößertes Bild entsteht.

Für die Wechselwirkung des Elektrons mit der Materie des Präparats wird ein lineares Modell auf Basis der Born-Approximation entwickelt. Die Wirkung des Linsen- und Blendensystems lässt sich mit Hilfe der Wellenoptik beschreiben als Faltung mit einer Funktion, deren Eigenschaften von den Parametern des Mikroskops abhängen. Die resultierenden „exakten“ Daten beschreiben die Wahrscheinlichkeit eines Elektrons, an einem bestimmten Punkt auf dem Detektor aufzutreffen. Die endliche Zahl der Realisierungen dieses Zufallsexperiments bewirkt schließlich, dass als Daten eine verrauschte Approximation an die exakte Wahrscheinlichkeitsverteilung gemessen wird.

Um die dreidimensionale Struktur des bestrahlten Objekts berechnen zu können, wird eine Vielzahl solcher zweidimensionaler Aufnahmen erzeugt, wobei in jeder Messung eine andere Orientierung der Probe zum Elektronenstrahl vorliegt. Dies wird dadurch erreicht, dass eine drehbare Halterung zur Befestigung der Probe verwendet wird.

Die physikalische Beschreibung des gesamten Vorgangs der Bilderzeugung im TEM, welche in diesem Kapitel erfolgt, gestaltet sich als recht komplex. Aus diesem Grund ist sie in mehrere separate Schritte aufgegliedert.

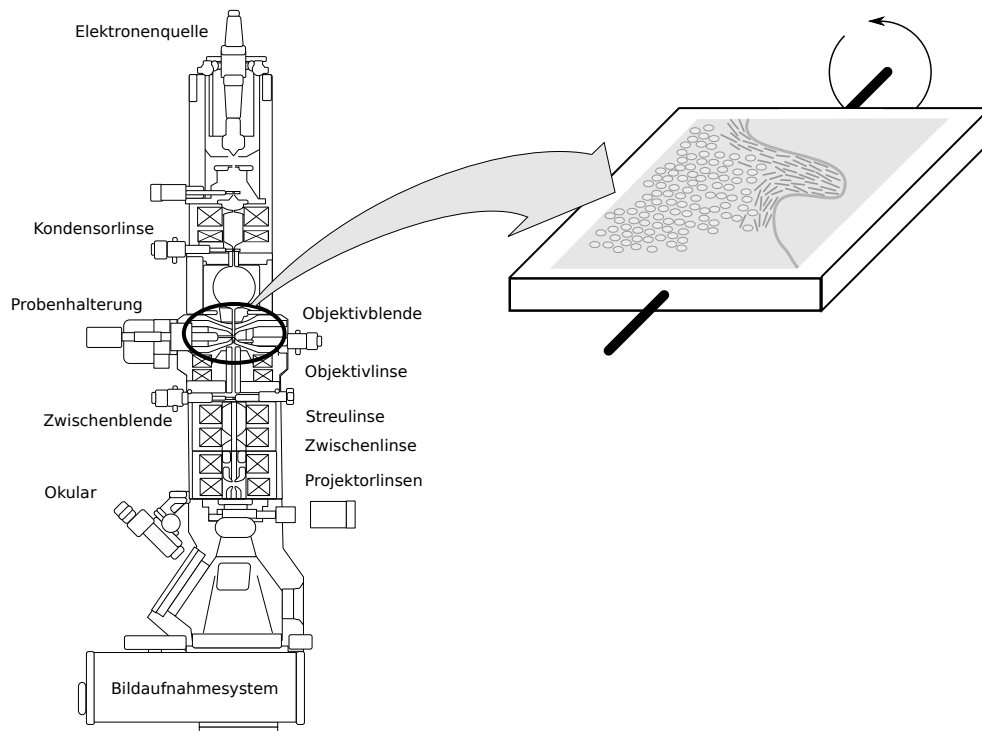


Abbildung 2.1 – Schematischer Aufbau eines TEM mit vergrößerter Skizze des Probenhalters

2.1 Wechselwirkung von Elektronen mit Materie

Der Zustand eines Elektrons, das auf die zu untersuchende Probe trifft, lässt sich beschreiben als monochromatische ebene Welle mit Wellenzahl $\kappa > 0$ und Ausbreitungsrichtung ω . Es wird durch elastische oder inelastische Stöße mit den Hüllenelektronen der Atome in der Probe gestreut, wobei das Probenmaterial näherungsweise als inhomogenes Kontinuum betrachtet werden kann. Die für diesen Streuvorgang maßgebliche physikalische Größe ist der komplexe *Brechungsindex* $n = n_1 + in_2/\kappa$ ($n_1 > 0$, $n_2 \geq 0$), dessen Realteil wie in der klassischen elektromagnetischen Beugungstheorie elastische, d. h. energieerhaltende Veränderungen der Wellenfront beschreibt, während der Imaginärteil die dissipativen Vorgänge zusammenfasst. Bei quantenmechanischen Streuprozessen beschreibt die besagte Welle den Zustand eines einzelnen Elektrons. Diese Welle besteht aus einem gestreuten und einem ungestreuten Anteil, welche beide in den als quellenfrei angenommenen Außenraum abstrahlen. Mathematisch lässt sich dieses physikalische Modell beschreiben durch

die *Helmholtz-Gleichung mit Sommerfeldt-Abstrahlbedingung*

$$\Delta\psi(x) + \kappa^2 n(x)\psi(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (2.1)$$

$$\psi = \psi_i + \psi_s \quad (2.2)$$

$$\psi_i(x) = e^{i\kappa\langle\omega, x\rangle} \quad (2.3)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(i\kappa\psi_s(x) - \frac{\partial}{\partial r} \psi_s(x) \right) = 0, \quad r = |x|, \quad (2.4)$$

wobei die letzte Bedingung gleichmäßig bzgl. der Richtung $x/|x|$ gelten soll [Col03]. Unter hinreichenden Glattheitsbedingungen an n und den Rand des kompakten Trägers $\text{supp}(n - 1)$ der *Kontrastfunktion* $f = n - 1$ ist die eindeutige Lösbarkeit des Systems (2.1)–(2.4) im klassischen Sinn garantiert [CK93]. Mit Hilfe dieser Kontrastfunktion, per definitionem gleich der Differenz zwischen den Brechindizes von Objekt und Vakuum, lässt sich obiges Problem äquivalent umformulieren zur *Lippmann-Schwinger-Integralgleichung*

$$(\text{id} - \mathcal{G}_f)\psi = \psi_i \quad (2.5)$$

mit

$$\mathcal{G}_f\psi(x) = \kappa^2 \int_{\mathbb{R}^3} G(x, y) f(y) \psi(y) \, dy \quad (2.6)$$

und

$$G(x, y) = \frac{\exp(i\kappa|x - y|)}{4\pi|x - y|} \quad (2.7)$$

sowie dem Identitätsoperator id . Zunächst lässt sich leicht zeigen, dass die einfallende Welle ψ_i der homogenen Gleichung

$$\Delta\psi_i + \kappa^2\psi_i = 0$$

genügt und somit das in (2.1)–(2.4) eingeführte Modell bei Abwesenheit eines Streuobjekts die richtige, d. h. physikalisch sinnvolle Lösung liefert. Damit lässt sich Gleichung (2.1) umformen zu

$$\Delta\psi_s + \kappa^2\psi_s = -\kappa^2 f(\psi_i + \psi_s).$$

Nun verwendet man die *retardierte Green'sche Funktion* des Helmholtz-Operators im Vakuum, d. h. diejenige Lösung G von

$$\Delta_y G(x, y) + \kappa^2 G(x, y) = -\delta_x, \quad (2.8)$$

welche die Abstrahlbedingung (2.4) erfüllt. Mit Hilfe dieser Funktion, die gerade durch die Kugelwelle (2.7) gegeben ist, lässt sich mit der Darstellung

$$\psi_s(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \delta_x(y) \psi_s(y) \, dy$$

durch Einsetzen von (2.8) die Gleichung

$$\psi_s(x) = \kappa^2 \int_{\mathbb{R}^3} G(x, y) f(y) \psi(y) dy$$

für das Streufeld und damit (2.5) für das Gesamtfeld herleiten. Das hier dargelegte Prinzip, dass jeder Punkt des Streuobjekts als Emittent einer Kugelwelle (2.7) aufgefasst werden kann, nennt man auch das *Huygens-Fresnel'sche Prinzip* [BW99, Abschnitt 8.2].

Unter der Bedingung $\|\mathcal{G}_f\| < 1$ ist der lineare Operator $\text{id} - \mathcal{G}_f$ invertierbar, und der inverse Operator ist gegeben durch die Neumann-Reihe

$$(\text{id} - \mathcal{G}_f)^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{G}_f^l,$$

die in diesem speziellen Fall auch häufig *Born-Reihe* genannt wird. Das Feld ψ lässt sich folglich im konvergenten Fall darstellen als

$$\psi = (\text{id} - \mathcal{G}_f)^{-1} \psi_i = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{G}_f^l \psi_i, \quad (2.9)$$

wobei die Anwendung von $\mathcal{G}_f^l$ als l -fache Streuung der einfallenden Welle gedeutet werden kann [BW99, Abschnitt 13.1.4]. Daran erkennt man unmittelbar, dass die Beziehung zwischen Streuobjekt f und resultierender Welle ψ nichtlinear ist.

2.2 Wellenoptik

Bei der Kirchhoff'schen Beugungstheorie, die in diesem Abschnitt angewandt wird, betrachtet man Wellen, die eine feste Ausbreitungsrichtung $\omega \in S^2$ haben und sich in dieser Richtung von einer Ebene zur nächsten weiterbewegen. Um eine Welle vollständig zu beschreiben, genügt es, zu jedem (signierten) Abstand $\lambda \in \mathbb{R}$ die zweidimensionale Wellenfunktion $u_\lambda(\omega, \cdot) = \psi|_{\mathcal{H}_\lambda(\omega)}$ anzugeben, wobei $\mathcal{H}_\lambda(\omega) = \lambda\omega + \omega^\perp$ die um $\lambda\omega$ verschobene Hyperebene senkrecht zu ω darstellt. Die präzise Definitionsgleichung für u_λ lautet

$$u_\lambda(\omega, v) = \psi(\lambda\omega + v), \quad v \in \omega^\perp. \quad (2.10)$$

Die Veränderung einer Welle beim Übergang von einer Ebene zur nächsten wird im Rahmen der Nahfeld-Approximation [BW99, Abschnitt 8.3.3] beschrieben durch den *Fresnel-Propagator* oder das *Fresnel'sche Beugungsintegral*

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\lambda u(\omega, v) &= \int_{\omega^\perp} b_\lambda(\omega, v - t) u(\omega, t) dt \\ &= b_\lambda *_{\omega^\perp} u(\omega, v), \quad v \in \omega^\perp \end{aligned} \quad (2.11)$$

mit

$$b_\lambda(\omega, v) = \frac{1}{2\pi i} \frac{\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} \exp\left(\frac{i\kappa}{2\lambda} |v|^2\right), \quad (2.12)$$

wobei λ den Abstand zwischen den beiden Ebenen darstellt. Zur Definition der Faltung „ $\ast_v$ “ siehe (A.24). Der Faltungskern b_λ wird auch als PSF (*engl.* point spread function) des Beugungsoperators bezeichnet. Mit Hilfe funktionentheoretischer Methoden (vgl. [Jon03]) lässt sich zeigen, dass die Fourier-Transformierte $\mathcal{F}_v b_\lambda$ bezüglich der Variablen $v \in \omega^\perp$ (vgl. (A.15)) gegeben ist durch

$$\mathcal{F}_v b_\lambda(\omega, \nu) = \frac{1}{2\pi} e^{i\kappa\lambda} \exp\left(-\frac{i\lambda}{2\kappa} |\nu|^2\right). \quad (2.13)$$

Diese Fourier-Darstellung einer PSF wird häufig als CTF (*Engl.* contrast transfer function) bezeichnet. Mit dem Faltungssatz (A.20)

$$\mathcal{F}_v \mathcal{B}_\lambda u(\omega, \nu) = 2\pi \mathcal{F}_v b_\lambda(\omega, \nu) \mathcal{F}_v u(\omega, \nu)$$

und der aus (2.13) folgenden Identität $|2\pi \mathcal{F}_v b_\lambda| \equiv 1$ ergibt sich daraus unmittelbar $\|\mathcal{F}_v \mathcal{B}_\lambda u\|_{L^2(\omega^\perp)} = \|\mathcal{F}_v u\|_{L^2(\omega^\perp)}$, was nach der Parseval'schen Gleichung bedeutet, dass $\mathcal{B}_\lambda$ die Gesamtintensität $\|u\|_{L^2(\omega^\perp)}^2$ einer Welle nicht verändert.

Im idealisierten optischen System eines Elektronenmikroskops sind sämtliche optische Elemente, die Einfluss auf die Elektronenwelle nehmen, in Ebenen angeordnet. In Abbildung 2.2 sind die Abstände λ_S , λ_B und λ_D skizziert, die im Verlauf dieses Abschnitts eine Rolle spielen. Dabei beziehen sich diese Abstände jeweils auf die Linsenebene, an welcher die Streutheorie im späteren Abschnitt 2.4.1 endet und die in diesem Abschnitt behandelte Wellenoptik beginnt. Desweiteren bezeichne u_λ^- die an der Hyperebene H_λ ankommende Welle, während u_λ^+ die von H_λ ausgehende Welle symbolisiert.

Beginnend mit einer Wellenfunktion u_0^- in der Linsenebene ($\lambda = 0$), lässt sich mit Hilfe der Fourier-Optik zeigen, dass sich die Wirkung der Linse auf die Welle u_0^- in guter Näherung als Multiplikation

$$u_0^+(\omega, v) = \exp\left(-\frac{i\kappa}{2\lambda_B} |v|^2\right) u_0^-(\omega, v)$$

mit einem komplexen Phasenfaktor beschreiben lässt [Goo05, Abschnitt 5.1]. Den Übergang zur darauf folgenden Blendenebene liefert der Beugungsoperator $\mathcal{B}_{\lambda_B}$:

$$u_{\lambda_B}^- = \mathcal{B}_{\lambda_B} u_0^+.$$

Die Blende wiederum lässt die Welle innerhalb der Öffnung unverändert und absorbiert sie im restlichen Bereich, was sich beschreiben lässt als Multiplikation mit der

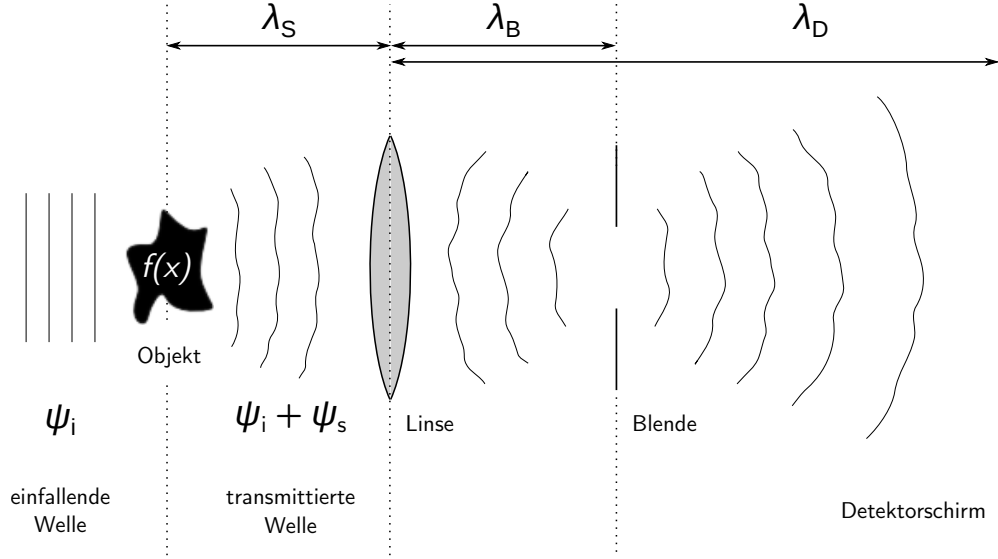


Abbildung 2.2 – Skizze des idealisierten optischen Systems im TEM. Die einfallende ebene Welle wird durch das Objekt gestreut, durchläuft das Linsen-Blenden-System und trifft auf den Detektor.

charakteristischen Funktion χ_B der Blendenöffnung:

$$u_{\lambda_B}^+ = \chi_B u_{\lambda_B}^-.$$

Schließlich pflanzt sich die Welle zum Detektor fort, der sich im Abstand $\lambda_D - \lambda_B$ zur Blende befindet. Dieser Vorgang wird erneut mit Hilfe des Beugungsoperators dargestellt:

$$u = u_{\lambda_D}^- = \mathcal{B}_{\lambda_D - \lambda_B} u_{\lambda_B}^+.$$

Trifft man nun die vereinfachenden Annahmen, dass die Blende zum einen in der Brennebene der Linse liegt und zum anderen kreisförmig ist, so ergibt sich insgesamt für die Wirkung des optischen Systems (zur Herleitung siehe Anhang B.1)

$$u(\omega, v) = h(v) (p_O *_v u_0)(\omega, m^{-1}v), \quad (2.14)$$

wobei $m > 0$ der Vergrößerungsfaktor der Optik ist und der von v abhängige Vorfaktor h sowie die Optik-PSF p_O definiert sind durch

$$h(v) = -\frac{i}{2} m^{-1/2} e^{i\kappa(\lambda_S + \lambda_D)} \exp\left(\frac{i\kappa}{2(\lambda_D - \lambda_B)} |v|^2\right) \quad (2.15)$$

und

$$\mathcal{F}_v p_O(\omega, v) = -\frac{i}{\pi} m^{-1/2} e^{-i\kappa\lambda_S} \exp\left(\frac{i\lambda_S}{2\kappa} |\nu|^2\right) \chi_{r_B}(|\nu|) e^{iz_P(|\nu|)} e^{-z_E(|\nu|)}. \quad (2.16)$$

Die Funktion χ_{r_B} ist hierbei die in (B.7) beschriebene skalierte charakteristische Funktion der Blende, und die letzten beiden Faktoren in (2.16) stellen Korrekturterme dar, welche eingeführt werden, um Linsenfehler und Abweichungen vom Ideal einer perfekten Elektronenquelle zu berücksichtigen. Details hierzu finden sich in [HK94, Abschnitt 65].

2.3 Detektion eines Elektrons

Der bisherige Teil, in dem die Veränderung einer Welle auf dem Weg durch das Mikroskop behandelt wird, betrachtet nur ein einzelnes isoliertes Elektron, denn nach den Gesetzen der Quantenmechanik wird durch die Wellenfunktion der Zustand eines Teilchens beschrieben, der mit dem umgebenden System interagiert. Durch Anwendung eines Messoperators kann daraus eine *Wahrscheinlichkeitsaussage* über den Wert einer bestimmten physikalischen Messgröße getroffen werden, die diesem Operator entspricht. In unserem Fall ist $u(\omega, \cdot)$ die Einschränkung einer Wellenfunktion auf die Detektorebene $\mathcal{H}_{\lambda_D}(\omega)$. Daher beschreibt die *Intensität* $I(\omega, v) = |u(\omega, v)|^2$ die Dichtefunktion der Wahrscheinlichkeit, dass das betrachtete Elektron an der Stelle v durch die Ebene dringt. Die Aufteilung des zweidimensionalen Detektors in Pixel D_j führt zu den diskreten Wahrscheinlichkeiten

$$p_j = P[\text{Elektron trifft auf Pixel } D_j] = \int_{D_j} I \, dv \approx |D_j| I(\omega, v_j), \quad (2.17)$$

wobei v_j der Mittelpunkt von D_j ist. Um nun aus einzelnen Realisierungen eine Näherung an die Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmen zu können, muss eine hinreichend große Zahl von Realisierungen vorliegen. Die Probe wird also mit einer gewissen Dosis N an Elektronen bestrahlt, die in den einzelnen Detektorpixeln, auf welche sie treffen, gezählt werden. Ist hierbei n_p die Anzahl der Pixel und $n = N/n_p$ die Zahl der Teilchen, die anteilmäßig auf ein einzelnes Pixel entfallen, so gehorcht die Wahrscheinlichkeit, in der tatsächlichen Messung l Elektronen am Pixel j zu zählen, einer Poisson-Verteilung

$$P(Z_j = l) = \frac{\lambda_j^l}{l!} e^{-\lambda_j} \quad (2.18)$$

mit Erwartungswert und Varianz $\lambda_j = np_j$. Dies zeigt, dass sich die Standardabweichung in Relation zum Erwartungswert wie $O(n^{-1/2})$ verhält und damit das Bildrauschen im Verhältnis zum Signal mit zunehmender Elektronendosis abnimmt. Es ist also im Hinblick auf die Bildqualität vorteilhaft, die Probe mit möglichst vielen Elektronen zu bestrahlen. Aus praktischen Gründen sind der Gesamtdosis jedoch enge Grenzen gesetzt [Lut06], so dass Bilder in ET-Messreihen typischerweise ein starkes Rauschen aufweisen. Letztendlich lässt sich ein EM-Bild nach entsprechender

Normierung als eine Intensitätsverteilung $I = |u|^2$ auffassen, die mit Poisson- und Gauß'schem Bildrauschen belegt ist [SDCC04].

2.4 Approximationen

Prinzipiell wäre es nun möglich, die Bausteine aus den Abschnitten 2.1 bis 2.3 zusammenzusetzen, um ein vollständiges Modell für den Zusammenhang zwischen einer Kontrastfunktion f und der resultierenden Intensität I am Detektor zu erhalten. Da jedoch sowohl bei der Streuung als auch bei der Detektion nichtlineare Ausdrücke auftreten, wäre dieses Modell zu komplex zur Entwicklung von effizienten Lösungsverfahren für das inverse Problem. Eine Linearisierung ist in jedoch beiden Teilproblemen möglich für den Fall, dass das betrachtete Objekt ein *schwacher Streuer* ist.

2.4.1 Linearisierung der Streuung

Die abstrakte Bedingung der schwachen Streuung schlägt sich zuallererst in der Forderung $\|\mathcal{G}_f\| < 1$ nieder, die für die Lösungsformel (2.9) unerlässlich ist. Ersetzt man diese Minimalbedingung durch $\|\mathcal{G}_f\| \ll 1$, so lässt sich die Lösungsformel approximieren durch die Linearisierung

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{G}_f^l \psi_i \approx \psi_i + \mathcal{G}_f \psi_i, \quad (2.19)$$

welche auch bekannt ist unter dem Namen *Born-Approximation erster Ordnung* [BW99, Abschnitt 13.1.4]. Physikalisch kann die Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung dahingehend gedeutet werden, dass jedes Elektron höchstens einmal am Objekt gestreut wird und somit das Material für Elektronenstrahlung nahezu transparent ist. Offenbar ist die Durchlässigkeit umso geringer, je mehr Streuzentren vorhanden sind, d. h. je größer Dichte und Ordnungszahl des Materials sind und je dicker die Probe ist. Während in den Materialwissenschaften häufig Metalle und sonstige schwere Nuklide untersucht werden, bei denen Mehrfachstreuung nicht ausgeschlossen werden kann, kommen bei organischen Materialien in biologischen Anwendungen typischerweise nur leichte Atome vor, so dass dort von schwacher Streuung ausgegangen wird. Zudem nimmt die Transparenz nahezu aller Materialien mit wachsender Wellenzahl zu, weshalb ein TEM generell mit hohen Beschleunigungsspannungen (über 100 kV) betrieben wird. Eine quantitative Bedingung für die Gültigkeit der Born-Approximation findet sich in [KS01, Abschnitt 6.2.1], Fehlerabschätzungen werden in [Nat04] hergeleitet.

Um einen Übergang zur Wellenoptik zu schaffen, wird nun die gleiche 2d-Geometrie

eingeführt, die sich an der Ausbreitungsrichtung ω orientiert. Dazu sei in Anlehnung an (2.6) der *Streuoperator* definiert durch

$$\mathcal{U}f(\omega, v) = \kappa^2 \int_{\mathbb{R}^3} G(\lambda_S \omega + v, y) e^{i\kappa \langle \omega, y \rangle} f(y) dy. \quad (2.20)$$

Dieser liefert im Rahmen der Born-Approximation wegen

$$\psi_s = \psi - \psi_i = \mathcal{G}_f \psi_i = \int_{\mathbb{R}^3} G(\cdot, y) e^{i\kappa \langle \omega, y \rangle} f(y) dy$$

für gegebenes f und festes ω das auf die Linsenebene $\mathcal{H}_{\lambda_S}(\omega) = \lambda_S \omega + \omega^\perp$ eingeschränkte Streufeld ψ_s . Analog zum Projektionssatz (A.28) für die Röntgen-Transformation lässt sich für diesen Operator eine Darstellung im Frequenzraum angeben, die unter dem Namen *Propagationssatz* bekannt ist [NW01, Theorem 3.1]. Für $|\nu| < \kappa$ gilt die Darstellung

$$\mathcal{F}_v \mathcal{U}f(\omega, \nu) = i\kappa^2 (\pi/2)^{1/2} e^{i\lambda_S a(|\nu|)} a(|\nu|)^{-1} \widehat{f}((a(|\nu|) - \kappa)\omega + \nu), \quad (2.21)$$

wobei $a(s) = (\kappa^2 - s^2)^{1/2}$. Prinzipiell ist es möglich, basierend auf dem Propagationssatz den Operator $\mathcal{U}$ zu invertieren, indem man analog zur Herleitung der Inversionsformel für die Röntgen-Transformation vorgeht (vgl. [Nat86, Theorem 2.1]). Für den 2d-Fall gelang dies bereits 1982 [Dev82], jedoch gibt es bis dato für die dreidimensionale Transformation kein vergleichbares Ergebnis. Aus diesem Grund wird als weitere Approximation das Argument von $\widehat{f}$ gemäß $a(|\nu|) \approx \kappa$ vereinfacht. Im Ergebnis erhält man aus (2.21) aufgrund des Projektionssatzes (A.28) die näherungsweise Identität

$$\widehat{f}((a(|\nu|) - \kappa)\omega + \nu) \approx \widehat{f}(\nu) = (2\pi)^{-1/2} \mathcal{F}_v \mathcal{P}_3 f(\omega, \nu)$$

mit der 3d-Röntgen-Transformation

$$\mathcal{P}_3 f(\omega, v) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda \omega + v) d\lambda, \quad (2.22)$$

so dass sich letztendlich der vereinfachte Propagationssatz

$$\mathcal{F}_v \mathcal{U}f(\omega, \nu) \approx \frac{i\kappa^2}{2} e^{i\lambda_S a(|\nu|)} a(|\nu|)^{-1} \mathcal{F}_v \mathcal{P}_3 f(\omega, \nu)$$

ergibt. Durch Anwendung der inversen Fourier-Transformation und des Faltungssatzes ergibt sich damit für das Streufeld $u_{s,0} = \psi_s|_{\mathcal{H}_{\lambda_S}}$ in der Linsenebene die Darstellung

$$u_{s,0} = \mathcal{U}f \approx p_S *_v \mathcal{P}_3 f \quad (2.23)$$

mit

$$\mathcal{F}_v p_S(\omega, \nu) = \frac{i\kappa^2}{4\pi} e^{i\lambda_S a(|\nu|)} a(|\nu|)^{-1}. \quad (2.24)$$

In diesem vereinfachten Modell ist also das Streufeld bis auf eine Phasenkorrektur durch die *Streu-PSF* p_S identisch mit der *geradlinigen* Projektion der Kontrastfunktion entlang der Ausbreitungsrichtung ω der Elektronen.

2.4.2 Linearisierung der Intensität

Bereits bei der allgemeinen Formulierung des Streuproblems wird die Gesamtwelle als die Summe aus einem ungestreuten und einem gestreuten Anteil betrachtet. Die Born-Approximation im vorangehenden Paragraph geht von einem schwachen Streufeld aus, und die Beugung im optischen System moduliert lediglich die komplexe Phase, nicht die Amplitude (den Absolutbetrag) der beiden Teilwellen. Folglich gilt auch für den Anteil der gestreuten Welle am Detektor, dass dieser im Vergleich zum ungestreuten Anteil klein ist. Die Gesamtintensität lässt sich somit unter Vernachlässigung des quadratischen Streutermes $|u_s|^2$ approximieren durch

$$I = |u_i + u_s|^2 \approx |u_i|^2 + 2\operatorname{Re}(\overline{u_i}u_s). \quad (2.25)$$

2.4.3 Behebung der Unterbestimmtheit

Eine typische Schwierigkeit bei Beugungsproblemen stellt die Tatsache dar, dass Phase und Amplitude einer Welle nie gleichzeitig gemessen werden können. Wie in Abschnitt 2.3 erörtert, kann lediglich die Gesamtintensität näherungsweise bestimmt werden. Im Hinblick auf das später betrachtete inverse Problem liegt also zur Rekonstruktion der gesuchten *komplexen* Größe f lediglich *eine reelle* Messgröße I vor, d. h. das Problem ist unterbestimmt, solange weder zusätzliche Annahmen an die Kontrastfunktion noch das Vorliegen zusätzlicher Daten vorausgesetzt werden können. Die Generierung zusätzlicher Daten, beispielsweise durch Variation der Abbildungsbedingungen [MDB09], lässt sich wegen der Beschränkung der Gesamtdosis bei organischem Material bisher nicht realisieren, da bereits bei einer relativ geringen Elektronendosis merkliche Schäden an der Probe zu verzeichnen sind [Lut06]. Stattdessen hat sich die Annahme eines konstanten Amplitudenkontrastverhältnisses (ACR, engl. amplitude contrast ratio)

$$\operatorname{Im}(f) = \mu \operatorname{Re}(f) \quad (2.26)$$

in den Biowissenschaften durchgesetzt. Der Wert der Konstanten μ ist a priori unbekannt und muss entweder durch Schätzung festgelegt oder aus den Daten bestimmt werden [ZPSF97]. In Kapitel 4 wird der Einfluss dieses Parameters auf die Qualität der Rekonstruktion untersucht. Es stellt sich heraus, dass erst bei grober Überschätzung des Wertes gravierende Auswirkungen in Form von Artefakten festzustellen sind, so dass eine ungefähre Schätzung als ausreichend erachtet werden kann.

2.5 Gesamtmodell der Erzeugung eines Einzelbildes

Die Bausteine, die in den vorangehenden Abschnitten entwickelt wurden, können nun zu einem Gesamtmodell für die Erzeugung eines Bildes im Elektronenmikroskop zusammengefügt werden. Innerhalb der Linsenebene $\mathcal{H}_{\lambda_s}(\omega)$, der Schnittstelle

zwischen den Abschnitten 2.1 und 2.2, ergibt sich ein Gesamtfeld

$$u_0(\omega, v) = \psi(\lambda_S \omega + v),$$

das in einen ungestreuten Anteil $u_{i,0}$ und einen gestreuten Anteil $u_{s,0}$ zerfällt. Für ersteren ergibt sich aus (2.3) die konstante Funktion

$$u_{i,0}(\omega, v) = \psi_i(\lambda_S \omega + v) = e^{i\kappa \langle \omega, \lambda_S \omega + v \rangle} \equiv e^{i\kappa \lambda_S}.$$

Zur Bestimmung des ungestreuten Feldes am Detektor ist nach (2.14) die 2d-Faltung $p_O *_v u_{i,0}$ zu berechnen, die sich schreiben lässt als

$$p_O *_v u_{i,0}(\omega, v) = e^{i\kappa \lambda_S} \int_{\omega^\perp} p_O(\omega, v - t) e^{-i \langle 0, t \rangle} dt = 2\pi e^{i\kappa \lambda_S} \mathcal{F}_v p_O(\omega, 0).$$

Der ungestreute Anteil am Detektor ist somit

$$\begin{aligned} u_i(\omega, v) &= h(v)(p_O *_v u_{i,0})(\omega, m^{-1}v) && \text{(nach (2.14))} \\ &= 2\pi h(v) e^{i\kappa \lambda_S} \mathcal{F}_v p_O(\omega, 0) \\ &= -2im^{-1/2}h(v) && \text{(nach (2.16)).} \end{aligned}$$

Das Streufeld am Detektor ergibt sich, indem man die Formel (2.14) für die Wirkung der Optik auf das Streufeld (2.23) anwendet:

$$\begin{aligned} u_s(\omega, v) &= h(v)(p_O *_v u_{s,0})(\omega, m^{-1}v) \\ &= h(v)(p_O *_v p_S *_v \mathcal{P}_3 f)(\omega, m^{-1}v). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Um die Skalierung des zweiten Arguments zu umgehen, wird statt f die (isometrisch) dilatierete Kontrastfunktion

$$f_m(x) = \mathcal{D}^m f(x) = m^{-3/2} f(m^{-1}x)$$

betrachtet. Unter Ausnutzung der Vertauschungsrelationen von $\mathcal{D}^m$ mit der Faltung und der Röntgen-Transformation (siehe Anhang B.2) ergibt sich für den Zusammenhang zwischen der Kontrastfunktion f_m und dem Streufeld am Detektor die Gleichung

$$u_s(\omega, v) = m^{-1/2} h(v)(p *_v \mathcal{P}_3 f_m)(\omega, v),$$

wobei die komplexe PSF des Gesamtsystems gegeben ist durch

$$p(\omega, v) = m^{-2} p_O *_v p_S(\omega, m^{-1}v).$$

Im Frequenzraum gilt zunächst nach Satz A.2 g) für Dilatationen, dass

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_v p(\omega, \nu) &= m^{-1} \mathcal{F}_v \mathcal{D}_v^m (p_O *_v p_S)(\omega, \nu) \\ &= m^{-1} \mathcal{D}_v^{1/m} \mathcal{F}_v (p_O *_v p_S)(\omega, \nu) \\ &= \mathcal{F}_v (p_O *_v p_S)(\omega, m\nu), \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{D}_v^m$ die 2d-Dilatation bzgl. der Variablen v ist. Verwendet man nun die Darstellungen (2.16) und (2.24) der beiden CTFs, so lässt sich die Gesamt-CTF explizit angeben als

$$\mathcal{F}_v p(\omega, \nu) = \chi_{[0, R]}(|\nu|) \varrho(|\nu|) e^{i\alpha(|\nu|)} \quad (2.28)$$

mit

$$\begin{aligned} R &= \frac{\kappa r_B}{m \lambda_B}, \\ \varrho(s) &= \frac{\kappa^2}{2\pi} m^{1/2} a(ms)^{-1} e^{-z_e(ms)}, \\ \alpha(s) &= \lambda_S \left(a(ms) - \kappa + \frac{(ms)^2}{2\kappa} \right) + z_p(ms). \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich mit der Linearisierung (2.25) für die Intensität

$$\begin{aligned} I(\omega, v) &\approx 4m^{-1} |h(v)|^2 + 2|h(v)|^2 \operatorname{Re}(2im^{-1}(p *_v \mathcal{P}_3 f_m)(\omega, v)) \\ &= 4m^{-1} |h(v)|^2 \left(1 - \operatorname{Im}((p *_v \mathcal{P}_3 f_m)(\omega, v)) \right) \\ &= m^{-2} \left(1 - \operatorname{Im}((p *_v \mathcal{P}_3 f_m)(\omega, v)) \right), \end{aligned} \quad (2.29)$$

da $|h|^2 \equiv (4m)^{-1}$ nach (2.15). Um den Imaginärteil-Ausdruck aufzulösen, werden p und f_m in Real- und Imaginärteil aufgespalten, wodurch sich unter Verwendung der Annahme (2.26) eines konstanten ACR die Gleichung

$$\begin{aligned} p *_v \mathcal{P}_3 f_m &= (\operatorname{Re} p + i \operatorname{Im} p) *_v ((1 + i\mu) \mathcal{P}_3(\operatorname{Re} f_m)) \\ &= ((\operatorname{Re} p - \mu \operatorname{Im} p) + i(\operatorname{Im} p + \mu \operatorname{Re} p)) *_v \mathcal{P}_3(\operatorname{Re} f_m) \end{aligned} \quad (2.30)$$

ergibt. Damit lässt sich schließlich das folgende lineare Gesamtmodell der Bilderzeugung aufstellen.

2.1 Satz

Sei $f_{\text{re}} = \operatorname{Re} f_m$ die dilatierete Phasenkontrastfunktion und

$$p_\mu = \operatorname{Im} p + \mu \operatorname{Re} p \quad (2.31)$$

die Gesamt-PSF des Modellsystems bei konstanter ACR. Dann gilt für die Datenfunktion $g(\omega, v) = 1 - m^2 I(\omega, v)$ die Darstellung

$$g(\omega, v) = p_\mu *_v \mathcal{P}_3 f_{\text{re}}(\omega, v). \quad (2.32)$$

Dabei lässt sich die PSF p_μ im Frequenzraum schreiben als CTF

$$\mathcal{F}_v p_\mu(\omega, \nu) = (2\pi)^{-1} \chi_{[0, R]}(|\nu|) \varrho_\mu(|\nu|) \sin(\alpha_\mu(|\nu|)) \quad (2.33)$$

mit

$$R = \frac{\kappa r_B}{m \lambda_B} \quad (2.34)$$

$$\varrho_\mu(s) = m^{1/2} \kappa^2 (1 + \mu^2)^{1/2} a(ms)^{-1} e^{-z_e(ms)}, \quad (2.35)$$

$$\alpha_\mu(s) = \lambda_S \left(a(ms) - \kappa + \frac{(ms)^2}{2\kappa} \right) + z_p(ms) + \arctan(\mu). \quad (2.36)$$

Beweis: Die Behauptung bzgl. der Datenfunktion ergibt sich unmittelbar aus (2.29) und der Identifikation des Imaginärteils in (2.30) als $(\text{Im } p + \mu \text{Re } p) *_v \mathcal{P}_3(\text{Ref}_m)$. Zum Beweis von (2.33) verwendet man die Eigenschaft der Fourier-Transformation, gerade reellwertige Funktionen auf gerade reellwertige Funktionen abzubilden (Satz A.2 c)). Daraus folgt sofort, dass die Aufteilung von p in Real- und Imaginärteil bei Fourier-Transformation erhalten bleibt, d. h.

$$\text{Re}(\mathcal{F}_v p) = \mathcal{F}_v(\text{Re } p), \quad \text{Im}(\mathcal{F}_v p) = \mathcal{F}_v(\text{Im } p).$$

Es ergibt sich nach der Definition (2.28) der komplexen CTF

$$\text{Im}(\mathcal{F}_v p) + \mu \text{Re}(\mathcal{F}_v p) = (2\pi)^{-1} \chi_{[0,R]}(|\nu|) \varrho(|\nu|) \left(\sin(\alpha(|\nu|)) + \mu \cos(\alpha_\mu(|\nu|)) \right).$$

Schließlich liefert die trigonometrische Identität

$$\sin(\phi) + \mu \cos(\phi) = (1 + \mu^2)^{1/2} \sin(\phi + \arctan(\mu))$$

die Behauptung. $\square$

Bemerkung: Die im Frequenzraum definierte PSF (2.33) ist nach Satz A.2 d) auch im Ortsraum rotationssymmetrisch, sie hängt also nicht von der Richtung ω ab. Im speziellen bedeutet dies physikalisch, dass der Fokus im gesamten Bereich der Probe unabhängig von deren Ausrichtung konstant ist. In der Realität gibt es jedoch Abweichungen von dieser Idealisierung, welche mit Bildverarbeitungsmethoden aus den Daten geschätzt werden können [WT03, ZPSF97]. Der sich daraus ergebende variable Fokus würde sich hier in einer PSF niederschlagen, die eine tatsächliche Abhängigkeit von ω aufweist und zudem nicht verschiebungsinvariant ist. Der Einfachheit halber kommt in dieser Arbeit das Modell mit konstantem Fokus zur Anwendung. $\square$

Nachdem die recht aufwändige mathematische Modellierung der Bilderzeugung im Mikroskop abgeschlossen ist, steht nun die Frage an, wie dieses Modell erweitert werden kann, um einen Zugang für tomographische Methoden zu eröffnen. Welche Möglichkeiten mathematisch sinnvoll und praktisch umsetzbar sind, erörtert der folgende Abschnitt.

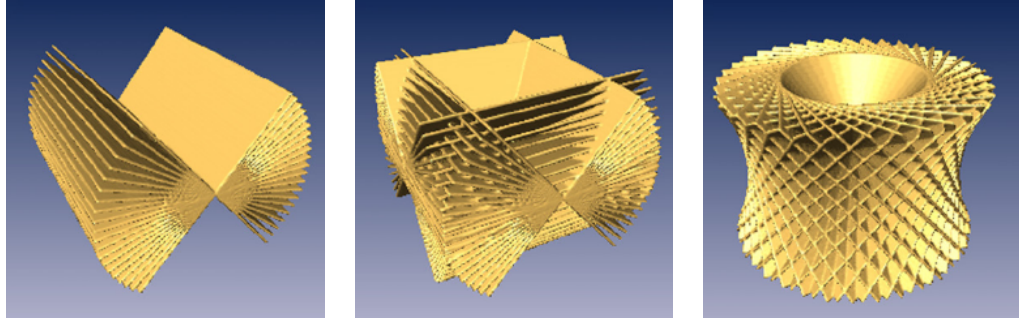


Abbildung 2.3 – Lage der Ebenen im Raum bei den verschiedenen Tiltschemata. Links: Single-axis. Mitte: Dual-axis. Rechts: Konischer Tilt. Bildquelle: [LCB⁺05].

2.6 Variation der Objektausrichtung

Bisher war die Einfallsrichtung $\omega \in \mathcal{S}^2$ stets eine Konstante innerhalb der Herleitung eines mathematischen Modells für die Entstehung *eines einzelnen* EM-Bildes. Um aus solch einer 2d-Information die *Phasenkontrastfunktion* f_{re} mit tomographischen Verfahren rekonstruieren zu können, wird ω variiert, d. h. das Objekt wird aus verschiedenen Richtungen bestrahlt. Dabei werden im Gegensatz zur CT nicht Strahlungsquelle und Detektor um das Objekt geführt, sondern das Objekt relativ zur festen optischen Achse (=Elektronenstrahlrichtung) des Mikroskops rotiert. Da die Länge des Strahlenwegs und damit die Absorption innerhalb der Probe mit wachsender Neigung zunimmt, können nur bis zu einem maximalen Drehwinkel Daten aufgenommen werden. Technisch realisieren lassen sich bis dato folgende Abtastkurven:

- *Single-Axis-Tilt*: Bei dieser einfachsten Variante wird die Probe um eine Achse gedreht, die senkrecht auf der optischen Achse steht. Da Single-Axis-Probenhalter zur Standardausstattung eines tomographiefähigen TEM gehören, ist diese Art der Abtastung am weitesten verbreitet. Die Richtungen ω durchlaufen hier die Kurve

$$\Gamma_{\text{sa}} = \{ \omega = (0, \sin(\vartheta), \cos(\vartheta)) \in \mathcal{S}^2 \mid -\vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_0 \},$$

und die Menge, auf der die Daten vorliegen, lässt sich darstellen als *Tangenti-
albündel* von Γ_{sa} ,

$$\mathcal{T}_{\text{sa}} = \{ (\omega, v) \mid \omega \in \Gamma_{\text{sa}}, v \in \omega^\perp \}.$$

- *Multi-Axis-Tilt*: Bei dieser Methode werden mehrere Single-Axis-Messreihen mit unterschiedlichen Drehachsen nacheinander ausgeführt. Sie eignet sich vor

allem für robustere Proben (in Kunstharz) [XDGS07], da bei gleicher Dosis pro Bild die Gesamtdosis auf ein Vielfaches steigt. Mathematisch gesehen unterscheidet sich diese Methode nicht vom Single-Axis-Tiltschema, da jede einzelne Tilt-Serie isoliert betrachtet werden kann.

- *Konischer Tilt*: Die Probe wird zuerst um einen festen Winkel ϑ_0 gedreht und anschließend in der Ebene des Probenträgers rotiert. Die zulässigen Richtungen ω beschreiben somit eine Kurve

$$\Gamma_{\text{ct}} = \{ \omega = (\sin(\vartheta_0) \sin(\phi), \sin(\vartheta_0) \cos(\phi), \cos(\vartheta_0)) \mid 0 \leq \phi < 2\pi \}.$$

Die Geometrie der resultierenden Transformation ist komplizierter als bei Single-Axis, da sie nicht mehr ohne weiteres auf zwei Dimensionen reduziert werden kann (vgl. Lemma 2.2). Erste Ergebnisse in Form von lokalen Rekonstruktionsalgorithmen und mikrolokaler Analysis finden sich in [QBC08].

Im folgenden Abschnitt wird die Single-Axis-Abtastung näher untersucht, die in den beiden erstgenannten Fällen auftritt. Die entsprechende Röntgen-Transformation mit variabler Richtung ist gegeben durch

$$\mathcal{P}_{\text{sa}} f(\omega, v) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda \omega + v) \, d\lambda, \quad (\omega, v) \in \mathcal{T}_{\text{sa}}.$$

2.7 Mathematische Untersuchung des Vorwärtsmodells

Vor der Umformung des Gesamtmodells in eine Operatorform wird die Röntgen-Transformation in einer Form parametrisiert, die sich als mathematisch günstig erweist. Fixiert man die erste Komponente von $x \in \mathbb{R}^3$, so lässt sich $\mathcal{P}_{\text{sa}}$ auffassen als 2d-Transformation bzgl. der beiden übrigen Komponenten, wie das folgende Lemma zeigt.

2.2 Lemma

Für $f \in S(\mathbb{R}^3)$ mit $f_s = f(s, \cdot)$, $s \in \mathbb{R}$ gilt

$$\mathcal{P}_{\text{sa}} f(\omega, v) = \mathcal{P}_2 f_s(\theta, b)$$

mit $\omega = (0, \theta)$ und $v = (s, b)$.

Beweis: Da sich offenbar jedes $\omega \in \Gamma_{\text{sa}}$ schreiben lässt als $\omega = (0, \theta)$ mit $\theta \in S^1$, ist die erste Komponente $v_1 = s$ von $v \in \omega^\perp$ beliebig, und die beiden restlichen bilden

einen Vektor $b \in \theta^\perp$. Es folgt

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{\text{sa}}f(\omega, v) &= \int_{\mathbb{R}} f(\lambda(0, \theta) + (s, b)) \, d\lambda \\ &= \int_{\mathbb{R}} f(s, \lambda\theta + b) \, d\lambda \\ &= \mathcal{P}_2f_s(\theta, b).\end{aligned}$$

□

Obiges Lemma zeigt, dass die Röntgen-Transformation $\mathcal{P}_{\text{sa}}$ eigentlich nur eine 2d-Transformation ist und die x_1 -Koordinate als Funktionsparameter aufgefasst werden kann. Diese Tatsache lässt sich dadurch berücksichtigen, dass der Bildraum mit eben-dieser Struktur ausgestattet und fortan die äquivalente Transformation $\mathcal{P}$ untersucht wird. Um die zweidimensionale Theorie aus Abschnitt 1.3 anwenden zu können, sei hier uneingeschränkter Tilt vorausgesetzt.

2.3 Definition

Sei $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\mathcal{Y} = L^2(\mathcal{T})$, wobei

$$\mathcal{T} = \mathbb{R} \times \mathcal{T}^2 = \{(s, \theta, b) \mid s \in \mathbb{R}, \theta \in \mathbb{S}_+^1, b \in \theta^\perp\} \quad (2.37)$$

das dreidimensionale *Single-Axis-Tangentialbündel* ist. Der Operator

$$\begin{aligned}\mathcal{P} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{P}) &\longrightarrow \mathcal{Y}, \\ \mathcal{P}f(s, \theta, b) &= \int_{\mathbb{R}} f(s, \lambda\theta + b) \, d\lambda = \mathcal{P}_2f_s(\theta, b)\end{aligned} \quad (2.38)$$

sei als *Single-Axis-Röntgen-Transformation* (SA-RT) bezeichnet. Ihr Definitionsbereich ist der Schwartz-Raum $\mathcal{D}(\mathcal{P}) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. □

Die Darstellung der Abschließung lässt sich vom 2d-Fall in Lemma 1.40 übertragen.

2.4 Satz

Der Operator $\mathcal{P}$ ist abschließbar mit

$$\mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid |\zeta|^{-1/2} \widehat{f}_s \in L^2(\mathbb{R}^2) \text{ für f. a. } s \in \mathbb{R}\}.$$

Beweis: Zunächst wird gezeigt, dass der Graph $\mathcal{G}(\overline{\mathcal{P}})$ abgeschlossen ist. Sei dazu $\{f_n\}_n$ eine Folge in $\mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}})$ mit $f_n \rightarrow f \in \mathcal{X}$ und $\overline{\mathcal{P}}f_n \rightarrow g \in \mathcal{Y}$. Zu beweisen ist, dass $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}})$ und $\overline{\mathcal{P}}f = g$.

Für f. a. $s \in \mathbb{R}$ gilt per definitionem $f_{n,s} \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}}_2)$. Damit folgt aus $f_{n,s} \rightarrow f_s \in L^2(\mathbb{R}^2)$

und $\overline{\mathcal{P}_2} f_{n,s} \rightarrow g_s \in L^2(\mathcal{T}^2)$ wegen der Abgeschlossenheit von $\overline{\mathcal{P}_2}$, dass $f_s \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}_2})$ mit $\overline{\mathcal{P}_2} f_s = g_s$. Dies impliziert die Abgeschlossenheit des Graphen von $\overline{\mathcal{P}}$. Ist desweiteren $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}})$, so gibt es mit dem gleichen Argument wie in [Sol76, Theorem 3.4.] eine Folge in $S(\mathbb{R}^3)$ mit $f_m \rightarrow f$ und $\mathcal{P} f_m \rightarrow g$. Somit lässt sich jede Folge in $\mathcal{G}(\overline{\mathcal{P}})$ sich durch eine Folge in $\mathcal{G}(\mathcal{P})$ approximieren. Schließlich folgt mit [Sol76, Lemma 3.1.], dass $S(\mathbb{R}^3) \subset \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}})$, d. h. $\overline{\mathcal{P}}$ ist eine Erweiterung von $\mathcal{P}$. $\square$

Eine Reihe weiterer Darstellungen und Eigenschaften, die für $\mathcal{P}_2$ gelten, können mit der gleichen Technik der Fixierung von s auf $\mathcal{P}$ übertragen werden. Der folgende Satz, auf dessen Beweis hier verzichtet wird, fasst die wichtigsten zusammen.

2.5 Satz (Eigenschaften und Inversionsformel der SA-RT)

Die Single-Axis-Röntgen-Transformation erfüllt folgende Eigenschaften:

- a) $\mathcal{D}(\mathcal{P})$ liegt dicht in $\mathcal{X}$.
- b) $\mathcal{P}$ ist injektiv.
- c) Ist $f(s, \cdot) \in L^1(\mathbb{R}^2)$, so gilt der Projektionssatz

$$\mathcal{F}_b \mathcal{P} f(s, \theta, \beta) = (2\pi)^{1/2} \mathcal{F}_z f(s, \beta)$$

für alle $\theta \in \mathbb{S}_+^1$ und fast alle $\beta \in \theta^\perp$.

- d) Der adjungierte Operator $\mathcal{P}^* : \mathcal{Y} \supset \mathcal{D}(\mathcal{P}^*) \rightarrow \mathcal{X}$ lässt sich darstellen als

$$\mathcal{P}^* g(s, z) = \int_{\mathbb{S}_+^1} g(s, \theta, \Pi_\theta z) d\theta = \mathcal{P}_2^* g_s(z) \quad (2.39)$$

mit $\Pi_\theta z = z - \langle z, \theta \rangle \theta$ und

$$\mathcal{D}(\mathcal{P}^*) = \{g \in L^2(\mathcal{T}) \mid |\beta|^{-1/2} \mathcal{F}_b g_s \in L^2(\mathcal{T}^2) \text{ für f. a. } s \in \mathbb{R}\}. \quad (2.40)$$

Im Frequenzraum nimmt der adjungierte Operator die Form

$$\mathcal{F}_z \mathcal{P}^* g(s, \zeta) = (2\pi)^{1/2} |\zeta|^{-1} \mathcal{F}_b g(s, \hat{\zeta}, \zeta) \quad (2.41)$$

an, wobei $\hat{\zeta}$ derjenige Einheitsvektor senkrecht zu ζ ist, der in $\mathbb{S}_+^1$ liegt.

- e) Für $f \in \mathcal{D}(\overline{\mathcal{P}})$ und $g = \overline{\mathcal{P}} f$ gilt die Inversionsformel

$$f = (2\pi)^{-1} \Lambda_z^{1/2} \mathcal{P}^* \Lambda_b^{1/2} g \quad (2.42)$$

mit

$$\mathcal{F}_z \Lambda_z^a f(s, \zeta) = |\zeta|^a \mathcal{F}_z f(s, \zeta), \quad \mathcal{F}_b \Lambda_b^a g(s, \theta, \beta) = |\beta|^a \mathcal{F}_b g(s, \theta, \beta). \quad (2.43)$$

Ist entsprechend $g \in \mathcal{D}(\mathcal{P}^*)$ und $f = \mathcal{P}^* g$, so lautet die Inversionsformel

$$g = (2\pi)^{-1} \Lambda_b^{1/2} \overline{\mathcal{P}} \Lambda_z^{1/2} f. \quad (2.44)$$

f) Die Translationsoperatoren

$$\mathcal{T}_z^1 f(s, w) = f(s, z - w), \quad \mathcal{T}_z^2 g(s, \theta, b) = g(s, \theta, \Pi_\theta z - b) \quad (2.45)$$

erfüllen für jedes $z \in \mathbb{R}^2$ die Vertauschungsrelation

$$\mathcal{T}_z^1 \mathcal{P}^* = \mathcal{P}^* \mathcal{T}_z^2.$$

Zudem kommutiert $\mathcal{P}^*$ mit dem Translationsoperator

$$\mathcal{T}_s^0 g(s, \theta, b) = g(s - \sigma, \theta, b). \quad (2.46)$$

Mit Hilfe dieser Transformation lässt sich das gesamte Single-Axis-Vorwärtsmodell in Operatorschreibweise zusammenfassen. Zur Verbesserung der Lesbarkeit wird folgende Festlegung getroffen.

Notation: Ab jetzt bezeichne $\mathcal{P}$ die *Abschließung* der Single-Axis-RT und f statt f_{re} den dilatierten Phasenkontrast.

2.6 Definition (Modelloperator der ET)

Der stetige selbstadjungierte Faltungsoperator $\mathcal{C}$ sei definiert durch

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : L^2(\mathcal{T}) &\longrightarrow L^2(\mathcal{T}), \\ \mathcal{C} g(s, \theta, b) &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\theta^\perp} k_\mu(s - \sigma, \theta, b - \beta) g(\sigma, \theta, \beta) d\beta d\sigma, \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$k_\mu(s, \theta, b) = p_\mu(\omega, v), \quad \omega = (0, \theta), \quad v = (s, b). \quad (2.48)$$

Der unbeschränkte Operator

$$\mathcal{A} = \mathcal{C} \mathcal{P} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{Y} \quad (2.49)$$

mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{P}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid |\zeta|^{-1/2} \widehat{f}_s \in L^2(\mathbb{R}^2) \text{ für f. a. } s \in \mathbb{R}\},$$

sei bezeichnet als *Modelloperator der Single-Axis-Elektronentomographie*. Mit ihm lässt sich die Datengleichung (2.32) in die simple Form $\mathcal{A}f = g$ bringen. Nach Korollar 1.13 ist der adjungierte Modelloperator gegeben durch

$$\mathcal{A}^* = \mathcal{P}^* \mathcal{C}.$$

□

Der stetige Operator $\mathcal{C}$ besitzt eine Pseudoinverse, die sich explizit angeben lässt.

2.7 Lemma

Die Pseudoinverse $\mathcal{C}^\dagger$ ist ein Faltungoperator mit Kern $k_\mu^\dagger$, welcher die Gestalt

$$k_\mu^\dagger(s, \theta, b) = p_\mu^\dagger(\omega,), \quad \omega = (0, \theta), \quad v = (s, b),$$

$$\mathcal{F}_v p_\mu^\dagger(\omega, \nu) = (2\pi)^{-1} \chi_{[0, R]}(|\nu|) \left(\varrho_\mu(|\nu|) \sin(\alpha_\mu(|\nu|)) \right)^{-1}$$

besitzt, wobei die Funktionen ϱ_μ und α_μ sowie die Konstante R in Satz 2.1 definiert sind.

Beweis: Die Normalgleichung nimmt aufgrund der Selbstadjungiertheit von $\mathcal{C}$ und der Darstellung (2.33) unter Fourier-Transformation bei verkürzter Schreibweise die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{F}_v \mathcal{C}(\mathcal{C}h - g) \\ &= \chi_{[0, R]} \varrho_\mu \sin(\alpha_\mu) \mathcal{F}_v(\mathcal{C}h - g) && \text{(nach (2.33))} \\ &= \chi_{[0, R]} \varrho_\mu \sin(\alpha_\mu) (\chi_{[0, R]} \varrho_\mu \sin(\alpha_\mu) \mathcal{F}_v h - \mathcal{F}_v g). \end{aligned}$$

Sie ist offenbar genau dann erfüllt, wenn der Klammerausdruck für fast alle $\nu = (\sigma, \beta)$ mit $|\nu| < R$ verschwindet. Damit hat jede Lösung h der Normalgleichung die Form

$$\mathcal{F}_v h(\omega, \nu) = \left(\varrho_\mu(|\nu|) \sin(\alpha_\mu(|\nu|)) \right)^{-1} \mathcal{F}_v g(\omega, \nu), \quad |\nu| < R,$$

wobei $\omega = (0, \theta)$. Der Klammerausdruck in dieser Definition verschwindet lediglich auf einer Nullmenge und lässt sich daher im Sinne von L^2 -Funktionsklassen invertieren. Wegen Gleichung (A.5) besitzt unter allen Lösungen diejenige minimale Norm, welche für $|\nu| \geq R$ verschwindet. $\square$

Zuletzt wird eine Vertauschungsrelation für $\mathcal{C}$ bewiesen, die zusammen mit der entsprechenden Eigenschaft von $\mathcal{P}$ in einer Vertauschungsrelation für den Modelloperator $\mathcal{A}$ resultiert.

2.8 Lemma

Die Translationsoperatoren $\mathcal{T}_s^0$ und $\mathcal{T}_z^2$ aus Satz 2.5 f) erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\mathcal{T}_s^0 \mathcal{C} = \mathcal{C} \mathcal{T}_s^0, \quad \mathcal{T}_z^2 \mathcal{C} = \mathcal{C} \mathcal{T}_z^2.$$

Damit gilt für den Modelloperator $\mathcal{A}$ die Relation

$$\mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^1 \mathcal{A}^* = \mathcal{A}^* \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^2.$$

Beweis: Die erste Aussage folgt mit $k_\mu(s, \theta, -b) = k_\mu(s, \theta, b) = k_\mu(-s, \theta, b)$ durch einfache Umparametrisierung des Faltungsintegrals. Die Vertauschungsrelation für $\mathcal{A}$ ergibt sich aus der Kombination der Relationen für $\mathcal{C}$ und $\mathcal{P}^*$. $\square$

Kapitel 3

Rekonstruktionsverfahren zur ET

3.1 Vereinfachtes Modell ohne Faltung

In diesem Abschnitt wird das Verfahren der approximativen Inversen zunächst auf das vereinfachte Modell $\mathcal{A} = \mathcal{P}(=\overline{\mathcal{P}})$ angewandt, das die Faltung mit der CTF (2.33) nicht berücksichtigt. Da dieser Operator für fixiertes $s \in \mathbb{R}$ nach Lemma 2.2 mit der 2d-Röntgen-Transformation übereinstimmt, können die Ergebnisse aus Abschnitt 1.3 zum Rekonstruktionsverfahren und zur Regularisierung analog übertragen werden. Als Definitions- und Bildräume werden wiederum die Hilberträume $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\mathcal{Y} = L^2(\mathcal{T})$ betrachtet.

3.1.1 Rekonstruktionsformel und -algorithmus

Das Hilfsproblem zur Bestimmung eines Rekonstruktionskerns $\psi_x^\gamma \in \mathcal{Y}$ zur Approximation von $\mathcal{P}^\dagger$ lautet

$$\mathcal{P}(\mathcal{P}^* \psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma) = 0 \quad (3.1)$$

mit einem zuvor festgelegten Mollifier $\delta_x^\gamma \in \mathcal{X}$. Mit den Darstellungen von $\mathcal{P}$ bzw. $\mathcal{P}^*$ lässt sich das Problem (3.1) durch Fixierung der ersten Komponente σ in $(\sigma, \theta, b) \in \mathcal{T}$ bzw. $(\sigma, \zeta) \in \mathbb{R}^3$ umschreiben zum entsprechenden 2d-Problem. Das folgende Lemma präzisiert diese Aussage.

3.1 Lemma

Seien $f_\sigma(\zeta) = f(\sigma, \zeta)$ und $g_\sigma(\theta, b) = g(\sigma, \theta, b)$ für $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $g \in L^2(\mathcal{T})$. Dann ist (3.1) äquivalent zu

$$\mathcal{P}_2(\mathcal{P}_2^* \psi_{x,\sigma}^\gamma - \delta_{x,\sigma}^\gamma) = 0.$$

Für die zugehörige approximative Inverse $\mathcal{P}^\gamma$ gilt die Darstellung

$$\mathcal{P}^\gamma g(x) = \int_{\mathbb{R}} \langle g_\sigma, \psi_{x,\sigma}^\gamma \rangle_{L^2(\mathcal{T}^2)} d\sigma,$$

d. h. sowohl das Hilfsproblem als auch die Rekonstruktionsformel reduzieren sich auf den 2d-Fall.

Beweis: Aus den Darstellungen (2.38) und (2.39) folgt unmittelbar die erste Aussage. Die Rekonstruktionsformel ergibt sich gemäß

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^\gamma g(x) &= \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{L^2(\mathcal{T})} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} g(\sigma, \theta, b) \psi_x^\gamma(\sigma, \theta, b) \, db \, d\theta \, d\sigma \\ &= \int_{\mathbb{R}} \langle g_\sigma, \psi_{x,\sigma}^\gamma \rangle_{L^2(\mathcal{T}^2)} \, d\sigma.\end{aligned}$$

□

Diese Rekonstruktionsformel lässt sich unmittelbar in der folgenden kontinuierlichen Form als Algorithmus umsetzen. Eine Diskretisierung der einzelnen Berechnungsschritte liefert dann eine Anleitung zur numerischen Implementierung des Verfahrens am Computer. Für den Mollifier wird angenommen, dass er im Bild des Adjungierten liegt, so dass die Inversionsformel direkt angewandt werden kann. Diese Bedingung ist in den späteren konkreten Beispielen stets erfüllt.

3.2 Algorithmus (Approximative Inverse zu $\mathcal{P}$)

Gegeben:

- Daten $g = g(\sigma, \theta, b) \in L^2(\mathcal{T})$
- Mollifier $\delta_x^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{P}^*) \quad (x \in \mathbb{R}^3)$

Vorbereitung:

- Rekonstruktionskern $\psi_x^\gamma = (2\pi)^{-1} \Lambda_b^{1/2} \mathcal{P} \Lambda_z^{1/2} \delta_x^\gamma$ nach Formel (2.44)

Rekonstruktion:

Für alle $x \in \mathbb{R}^3$:

Für alle $\sigma \in \mathbb{R}$:

Berechne das Skalarprodukt

$$F_\sigma^\gamma(x) = \langle g, \psi_x^\gamma \rangle_{L^2(\mathcal{T}^2)} = \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} g(\sigma, \theta, b) \psi_x^\gamma(\sigma, \theta, b) \, db \, d\theta.$$

Integriere über $\mathbb{R}$: $f^\gamma(x) = \int_{\mathbb{R}} F_\sigma^\gamma(x) \, d\sigma$

□

Sei nun $\delta_{x,\sigma}^\gamma = \mathcal{T}_z^1 e_{s,\sigma}^\gamma$ ein Mollifier mit Faltungsstruktur bezüglich der Variablen z . Löst die Funktion $w_{s,\sigma}^\gamma$ das Hilfsproblem

$$\mathcal{P}_2(\mathcal{P}_2^* w_{s,\sigma}^\gamma - e_{s,\sigma}^\gamma) = 0,$$

so wird nach Satz 1.37 und Lemma 1.44 durch $\psi_{x,\sigma}^\gamma = \mathcal{T}_z^2 w_{s,\sigma}^\gamma$, $x = (s, z)$, ein Rekonstruktionskern definiert. Die Rekonstruktionsformel für $\mathcal{P}$ nimmt daher nach Satz 1.45 die Form

$$\mathcal{P}^\gamma g(s, z) = \int_{\mathbb{R}} \mathcal{P}_2^*(g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma)(z) d\sigma \quad (3.2)$$

an.

3.3 Algorithmus (AI zu $\mathcal{P}$ mit Faltung bzgl. z)

Gegeben:

- Daten $g = g(\sigma, \theta, b) \in L^2(\mathcal{T})$
- Mollifier $e_{s,\sigma}^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{P}_2^*)$ ($s, \sigma \in \mathbb{R}$)

Vorbereitung:

- Rekonstruktionskern $w_{s,\sigma}^\gamma = (2\pi)^{-1} \Lambda_b^{1/2} \mathcal{P}_2 \Lambda^{1/2} e_{s,\sigma}^\gamma$ nach Satz 1.43

Rekonstruktion:

Für alle $x = (s, z) \in \mathbb{R}^3$:

Für alle $\sigma \in \mathbb{R}$:

Für alle $\theta \in \mathcal{S}_+^1$:

Berechne die 1d-Faltung $G_{s,\sigma}^\gamma = g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma$.

Werte die Faltung an der Stelle $b = \Pi_\theta z$ aus.

Integriere über $\mathcal{S}_+^1$:

$$F_{s,\sigma}^\gamma(z) = \int_{\mathcal{S}_+^1} G_{s,\sigma}^\gamma(\theta, \Pi_\theta z) d\theta$$

Integriere über $\mathbb{R}$: $f^\gamma(s, z) = \int_{\mathbb{R}} F_{s,\sigma}^\gamma(z) d\sigma$ □

Die Abschätzung der Norm von $\mathcal{P}^\gamma$ kann nun ebenfalls aus dem 2d-Fall in Lemma 1.46 hergeleitet werden. Das folgende Lemma behandelt zunächst den allgemeinen Fall.

3.4 Lemma

Es sei $\mathcal{F}_b h \in L^\infty(\mathcal{T}^2)$ mit $h = w_{s,\sigma}^\gamma$ bzw. $h = \Lambda_b^{-1/2} w_{s,\sigma}^\gamma$ für fast alle $s, \sigma \in \mathbb{R}$ erfüllt. Dann folgt mit

$$r^\gamma(s, \sigma) = 2\pi \sup_{(\theta, \beta) \in \mathcal{T}^2} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_b w_{s,\sigma}^\gamma(\theta, \beta)|$$

die Abschätzung

$$\|\mathcal{P}^\gamma\| \leq \|r^\gamma\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}.$$

Beweis: Wie im Beweis von Lemma 1.46 zeigt man, dass aufgrund der Voraussetzungen für fast alle s und σ die Eigenschaft $g *_b w_{s,\sigma}^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}_2^*)$ erfüllt ist. Nach der Rekonstruktionsformel (3.2) gilt

$$\|\mathcal{P}^\gamma g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \int_{\mathbb{R}} \mathcal{P}_2^*(g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma)(z) \, d\sigma \right|^2 dz \, ds.$$

Für den Integranden bzgl. s erhält man mit Hilfe der Minkowski-Ungleichung (Satz A.9) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \int_{\mathbb{R}} \mathcal{P}_2^*(g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma)(z) \, d\sigma \right|^2 dz &\leq \left(\int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}^2} |\mathcal{P}_2^*(g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma)(z)|^2 dz \right)^{1/2} d\sigma \right)^2 \\ &\leq \left(\int_{\mathbb{R}} 2\pi \|\mathcal{F}_b \Lambda_b^{-1/2} w_{s,\sigma}^\gamma\|_{L^\infty(\mathcal{T}^2)} \|g_\sigma\|_{L^2(\mathcal{T}^2)} d\sigma \right)^2 \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}} r^\gamma(s, \sigma) \|g_\sigma\|_{L^2(\mathcal{T}^2)} d\sigma \right)^2, \end{aligned}$$

wobei die zweite Ungleichung aus Lemma 1.46 mit $w_{s,\sigma}^\gamma$ statt ϕ^γ folgt. Man erhält für das obige Integral durch nochmalige Anwendung der Minkowski-Ungleichung schließlich

$$\begin{aligned} \|\mathcal{P}^\gamma g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} &\leq \left(\int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} r^\gamma(s, \sigma) \|g_\sigma\|_{L^2(\mathcal{T}^2)} d\sigma \right)^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} r^\gamma(s, \sigma)^2 \|g_\sigma\|_{L^2(\mathcal{T}^2)}^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} d\sigma \\ &= \int_{\mathbb{R}} \|r^\gamma(\cdot, \sigma)\|_{L^2(\mathbb{R})} \|g_\sigma\|_{L^2(\mathcal{T}^2)} d\sigma \\ &\leq \|r^\gamma\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \|g\|_{L^2(\mathcal{T})}. \end{aligned}$$

□

Ist der Mollifier auch bezüglich der ersten Variable vom Faltungstyp, d. h.

$$e_{\gamma,\sigma}^s(z) = \eta^\gamma(s - \sigma, z) = \mathcal{T}_s^0 \eta^\gamma(\sigma, z), \quad (3.3)$$

gilt also insgesamt $\delta_x^\gamma = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^1 \eta^\gamma$ mit den Translationsoperatoren $\mathcal{T}_0^z$ und $\mathcal{T}_z^1$ aus Satz 2.5 f), so überträgt sich diese Eigenschaft direkt auf den Rekonstruktionskern gemäß

$$w_{s,\sigma}^\gamma(\theta, b) = \phi^\gamma(s - \sigma, \theta, b) = \mathcal{T}_s^0 \phi^\gamma(\sigma, \theta, b), \quad (3.4)$$

d. h. der Rekonstruktionskern ergibt sich insgesamt als $\psi_x^\gamma = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^2 \phi^\gamma$. Für den Klammerausdruck in der Rekonstruktionsformel (3.2) erhält man in diesem Fall

$$\begin{aligned} (g_\sigma *_b w_{s,\sigma}^\gamma)(\theta, b) &= \int_{\theta^\perp} g_\sigma(\theta, \beta) w_{s,\sigma}^\gamma(\theta, b - \beta) d\beta \\ &= \int_{\theta^\perp} g(\sigma, \theta, \beta) \phi^\gamma(s - \sigma, \theta, b - \beta) d\beta. \end{aligned}$$

Wendet man nun den Operator $\mathcal{P}_2^*$ an und integriert bzgl. σ , so lassen sich die beiden Faltungen mit der Schreibweise (A.26) zusammenfassen, und mit der Darstellung (2.39) des Adjungierten $\mathcal{P}^*$ ergibt sich die kompakte Formel

$$\mathcal{P}^\gamma g = \mathcal{P}^*(g *_v \phi^\gamma). \quad (3.5)$$

Zur Bestimmung eines Rekonstruktionskerns genügt es nun, das Hilfsproblem

$$\mathcal{P}(\mathcal{P}^* \phi^\gamma - \eta^\gamma) = 0 \quad (3.6)$$

zu lösen.

3.5 Algorithmus (AI zu $\mathcal{P}$ mit Faltung bzgl. s und z)

Gegeben:

- Daten $g = g(\sigma, \theta, b) \in L^2(\mathcal{T})$
- Mollifier $\eta^\gamma \in \mathcal{R}(\mathcal{P}^*)$

Vorbereitung:

- Rekonstruktionskern $\phi^\gamma = (2\pi)^{-1} \Lambda_b^{1/2} \mathcal{P} \Lambda_z^{1/2} \eta^\gamma$ nach Formel (2.44)

Rekonstruktion:

Für alle $x = (s, z) \in \mathbb{R}^3$:

Für alle $\theta \in \mathbb{S}_+^1$:

Berechne die 2d-Faltung $G^\gamma = g *_v \phi^\gamma$.

Werte die Faltung an der Stelle $v = (s, \Pi_\theta z)$ aus.

Integriere über $\mathbb{S}_+^1$:

$$f^\gamma(s, z) = \int_{\mathbb{S}_+^1} G^\gamma(s, \theta, \Pi_\theta z) d\theta$$

□

Die Norm der entsprechenden approximativen Inversen $\mathcal{P}^\gamma$ kann mit Hilfe der Fourier-Transformation abgeschätzt werden.

3.6 Lemma

Es gelte $\mathcal{F}_v h \in L^\infty(\mathcal{T})$ sowohl für $h = \phi^\gamma$ als auch für $h = \Lambda_b^{-1/2} \phi^\gamma$. Dann folgt

$$\|\mathcal{P}^\gamma\| \leq (2\pi)^{3/2} \sup_{(\sigma, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_v \phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta)|.$$

Beweis: In Analogie zum Beweis von Lemma 1.46 folgt mit der Frequenzraum-Darstellung (2.41) von $\mathcal{P}^*$ und der Rekonstruktionsformel (3.5)

$$\begin{aligned} \|\mathcal{P}^\gamma g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 &= \|\mathcal{F}_s \mathcal{F}_z \mathcal{P}^\gamma g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \\ &= \|\mathcal{F}_s \mathcal{F}_z \mathcal{P}^*(g *_v \phi^\gamma)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^2} 2\pi |\zeta|^{-2} |\mathcal{F}_s \mathcal{F}_b(g *_v \phi^\gamma)(\sigma, \hat{\zeta}, \zeta)|^2 d\zeta d\sigma \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^2} (2\pi)^3 |\zeta|^{-2} |\mathcal{F}_v g(\sigma, \hat{\zeta}, \zeta)|^2 |\mathcal{F}_v \phi^\gamma(\sigma, \hat{\zeta}, \zeta)|^2 d\zeta d\sigma \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{S}_+^1} \int_{\theta^\perp} (2\pi)^3 |\beta|^{-1} |\mathcal{F}_v g(\sigma, \theta, \beta)|^2 |\mathcal{F}_v \phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta)|^2 d\beta d\theta d\sigma \\ &\leq (2\pi)^3 \sup_{(\sigma, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} |\beta|^{-1} |\mathcal{F}_v \phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta)|^2 \|\mathcal{F}_v g\|_{L^2(\mathcal{T})}^2 \end{aligned}$$

und damit die Behauptung. $\square$

3.1.2 Bestimmung eines Rekonstruktionskerns

Die Betrachtungen in diesem Abschnitt beschränken sich aus Gründen der Darstellbarkeit auf den Fall, dass der Mollifier sowohl bzgl. s als auch bzgl. z eine Faltingsstruktur aufweist. Der Rekonstruktionskern lässt sich wie bei der 2d-Röntgen-Transformation im Frequenzraum explizit angeben, sofern die Mindestanforderung $\phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{P}^*)$ erfüllt ist. Auch die Regularisierungseigenschaft lässt sich analog zum 2d-Fall nachweisen.

3.7 Satz

Für $x = (s, z) \in \mathbb{R}^3$ seien

$$\eta_1^\gamma(s, z) = (2\pi\gamma^3)^{-1} \chi_{[-\gamma, \gamma]}(s) \chi_{B_\gamma}(z), \quad (3.7)$$

$$\eta_2^\gamma(s, z) = (2\pi^2\gamma^3)^{-1} \operatorname{sinc}(\gamma^{-1}s) \frac{J_1(\gamma^{-1}|z|)}{\gamma^{-1}|z|}, \quad (3.8)$$

$$\eta_3^\gamma(x) = (2\pi\gamma^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2\gamma^2}\right) \quad (3.9)$$

erzeugende Funktionen von $L^2(\mathbb{R}^3)$ -Mollifiern mit Fourier-Transformierten

$$\widehat{\eta}_1^\gamma(\sigma, \zeta) = (2\pi^3)^{-1/2} \operatorname{sinc}(\gamma\sigma) \frac{J_1(\gamma|\zeta|)}{\gamma|\zeta|}, \quad (3.10)$$

$$\widehat{\eta}_2^\gamma(\sigma, \zeta) = (2\pi)^{-3/2} \chi_{[-1/\gamma, 1/\gamma]}(\sigma) \chi_{B_{1/\gamma}}(\zeta), \quad (3.11)$$

$$\widehat{\eta}_3^\gamma(\xi) = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(-\frac{|\gamma\xi|^2}{2}\right), \quad (3.12)$$

wobei $\xi = (\sigma, \zeta) \in \mathbb{R}^3$. Dann erzeugen die durch

$$\mathcal{F}_v \phi_j^\gamma(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \widehat{e}_j^\gamma(\sigma, \beta), \quad \sigma \in \mathbb{R}, \quad \theta \in \mathcal{S}_+^1, \quad \beta \in \theta^\perp$$

definierten Funktionen Rekonstruktionskerne $\psi_x^{\gamma,j} = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^2 \phi_j^\gamma$ zur Approximation von $\mathcal{P}^\dagger$. Für die Norm der approximativen Inversen gilt

$$\|\mathcal{P}_j^\gamma\| \leq c_j \gamma^{-1/2}$$

mit $c_1 = c_2 = 1$, $c_3 = (2e)^{-1/4}$, d. h. die Parameterwahl $\gamma(\delta) = \mathcal{O}(\delta^q)$, $0 < q < 2$ liefert ein Regularisierungsverfahren.

Beweis: Die erzeugenden Funktionen (3.7)–(3.9) sind jeweils Tensorprodukte einer Funktion von $s \in \mathbb{R}$ und einer Funktion von $z \in \mathbb{R}^2$. Deshalb kann für festes s der Beweis von Satz 1.47 analog übertragen werden. Die Fourier-Transformierten der 1d-Anteile,

$$\begin{aligned} \widehat{\tau}_1^\gamma(\sigma) &= (2\pi)^{-1/2} \operatorname{sinc}(\gamma\sigma), \\ \widehat{\tau}_2^\gamma(\sigma) &= (2\pi)^{-1/2} \chi_{[-1/\gamma, 1/\gamma]}(\sigma), \\ \widehat{\tau}_3^\gamma(\sigma) &= (2\pi)^{-1/2} \exp\left(-\frac{(\gamma\sigma)^2}{2}\right), \end{aligned}$$

erfüllen die Gleichung

$$(2\pi)^{1/2} \sup_{\sigma \in \mathbb{R}} |\widehat{\tau}_j^\gamma(\sigma)| = 1, \quad j = 1, 2, 3,$$

so dass die Behauptung folgt. $\square$

Bemerkung: Formal ist als 1d-Mollifier auch die Delta-Distribution, d. h. keine Glättung in der ersten Komponente, zulässig, da ihre Fourier-Transformierte beschränkt ist. Auf diese Art und Weise funktionieren die herkömmlichen Verfahren, bei denen eine Folge von separaten 2d-Problemen gelöst wird. Gerade bei stark verrauschten Daten erweist sich die zusätzliche Glättung in x -Richtung jedoch als vorteilhaft, wie beispielsweise Abbildung 4.23 zeigt (Vergleich mit WBP, bei dem keine x -Glättung stattfindet). $\square$

3.2 Vollständiges Modell der ET

Nach der Betrachtung des vereinfachten Modells wird nun die AI-Methode für das komplette Modell $\mathcal{A} = \mathcal{CP}$ der Elektronen-Tomographie konkretisiert. Als Folge der komplexeren Struktur des Operators ergeben sich hier zusätzliche Schwierigkeiten, da die Moore-Penrose-Inverse $\mathcal{A}^\dagger$ nicht mehr explizit angegeben werden kann. Zudem ist aufgrund der Nullstellen der CTF der formal exakte Rekonstruktionskern eine unbeschränkte Funktion. Sowohl aus theoretischer als auch aus numerischer Hinsicht müssen die Singularitäten vermieden werden. Im Ergebnis erhält man eine Approximation an einen Rekonstruktionskern, der eine schwächere Form der Regularisierung erfüllt.

3.2.1 Rekonstruktionsformel und -algorithmus

Das allgemeine Hilfsproblem zur Bestimmung eines Rekonstruktionskerns für $\mathcal{A}$ lautet

$$\overline{\mathcal{A}}(\mathcal{A}^* \Psi_x^\gamma - \delta_x^\gamma) = 0. \quad (3.13)$$

Aufgrund der in Lemma 2.8 gezeigten Vertauschungsrelation für $\mathcal{A}^*$ ist nach Satz 1.37 bei einem Ansatz der Form $\delta_x^\gamma = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^1 \eta^\gamma$ ein Rekonstruktionskern gegeben durch $\Psi_x^\gamma = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^2 \Phi^\gamma$, $x = (s, z)$, falls die Funktion Φ^γ Lösung von

$$\overline{\mathcal{A}}(\mathcal{A}^* \Phi^\gamma - \eta^\gamma) \quad (3.14)$$

ist. In diesem Fall hat die Rekonstruktionsformel für $\mathcal{A}^\gamma$ gemäß

$$f^\gamma = \mathcal{A}^\gamma g = \mathcal{P}^*(g *_v \Phi^\gamma) \quad (3.15)$$

dieselbe Struktur wie (3.5). Diese Analogie zwischen $\mathcal{P}^\gamma$ und $\mathcal{A}^\gamma$ erlaubt es, die Normabschätzung für die approximative Inverse des vollständigen Modells direkt aus Lemma 3.6 zu übernehmen.

3.8 Lemma

Es gelte $\mathcal{F}_v h \in L^\infty(\mathcal{T})$ für $h = \Phi^\gamma$ und $h = \Lambda_b^{-1/2} \Phi^\gamma$. Dann folgt

$$\|\mathcal{A}^\gamma\| \leq (2\pi)^{3/2} \sup_{(s, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_v \Phi^\gamma(s, \theta, \beta)|.$$

3.2.2 Bestimmung eines Rekonstruktionskerns

Wendet man den Projektionssatz auf die Bestimmungsgleichung (3.14) der erzeugenden Funktion $\Phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$ des Rekonstruktionskerns an, so ergibt sich analog zum Beweis von Lemma 2.7 die Bedingung

$$(2\pi)^{1/2} |\beta|^{-1} \chi_{[0, R]} \varrho_\mu \sin(\alpha_\mu) \mathcal{F}_v \Phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta) = \widehat{\eta}^\gamma(\sigma, \beta), \quad |\nu| < R,$$

wobei das Argument $|\nu| = |(\sigma, \beta)|$ der Funktionen $\chi_{[0,R]}$, ϱ_μ und α_μ zur Verbesserung der Lesbarkeit weggelassen wurde. Ein solcher Minimierer ist offenbar gegeben durch

$$\mathcal{F}_v \Phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \chi_{[0,R]} \varrho_\mu^{-1} \sin(\alpha_\mu)^{-1} \widehat{\eta^\gamma}(\sigma, \beta). \quad (3.16)$$

Dieser Ausdruck definiert keine wesentlich beschränkte Funktion, und auch die Voraussetzung $\Phi^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$ ist nicht erfüllt, so dass sich die Regularisierungseigenschaft des resultierenden Verfahrens nicht nachweisen lässt. Um dieses Problem zu umgehen, wird gemäß

$$\sin^\epsilon(\alpha) = \begin{cases} \epsilon^{-1} \operatorname{sign}(\sin \alpha) & , \quad |\sin \alpha| \leq \epsilon \\ (\sin \alpha)^{-1} & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.17)$$

eine abgeschnittene Version des reziproken Sinus definiert, die stetig ist bis auf die Nullstellen des Sinus, an denen sie das Vorzeichen wechselt. Für das Produkt mit der Sinusfunktion gilt offenbar

$$r^\epsilon(\alpha) = \sin(\alpha) \sin^\epsilon(\alpha) = \begin{cases} \epsilon^{-1} |\sin \alpha| & , \quad |\sin \alpha| \leq \epsilon \\ 1 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \in [0, 1].$$

Nun lässt sich eine im Frequenzraum beschränkte Funktion $\Phi^{\gamma,\epsilon}$ definieren durch

$$\mathcal{F}_v \Phi^{\gamma,\epsilon}(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \chi_{[0,R]}(|\nu|) \varrho_\mu(|\nu|)^{-1} \sin^\epsilon(\alpha_\mu(|\nu|)) \widehat{\eta^\gamma}(\sigma, \beta). \quad (3.18)$$

Obwohl dies kein Minimierer der Residuumsnorm ist, kann $\Phi^{\gamma,\epsilon}$ als Approximation an einen Erzeuger eines Rekonstruktionskerns angesehen werden. Wie gut diese Approximation ist, wird im folgenden Lemma näher untersucht.

3.9 Satz

Seien $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$, $g = \mathcal{A}f$ und η^γ eine der Funktionen η_j^γ aus Satz 3.7. Dann gilt für $f^\gamma = f * \eta^\gamma$ und $\mathcal{A}^{\gamma,\epsilon} g = \mathcal{P}^*(g *_v \Phi^{\gamma,\epsilon})$ die Abschätzung

$$\|f^\gamma - \mathcal{A}^{\gamma,\epsilon} g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \|\widehat{f} \widehat{\eta^\gamma}\|_{L^2(M^\epsilon)}$$

mit

$$M^\epsilon = (\mathbb{R}^3 \setminus B_R) \cup S^\epsilon.$$

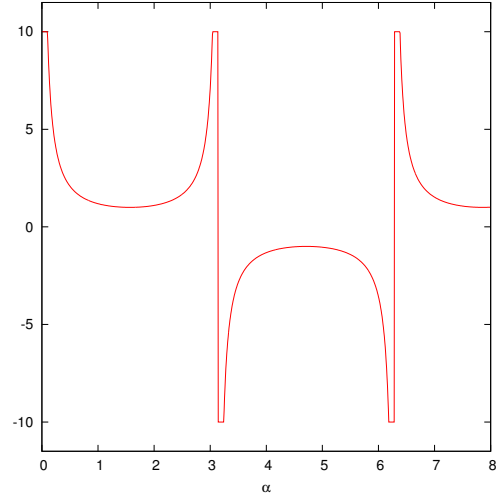


Abbildung 3.1 – Graph der Funktion $\alpha \mapsto \sin^\epsilon(\alpha)$ für $\epsilon = 0.1$.

Dabei ist S^ϵ das Gebiet, auf dem der reziproke Sinus abgeschnitten ist, und R die Konstante aus (2.34).

Beweis: Mit dem Projektionssatz (2.41) für $\mathcal{P}^*$ und den Darstellungen von $\mathcal{C}$ und $\mathcal{F}_v\Phi^{\gamma,\epsilon}$ folgt die Gleichung

$$\begin{aligned}\|f^\gamma - \mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 &= \|(2\pi)^{3/2}\widehat{f}\widehat{\eta^\gamma} - (\mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}g)^\widehat{}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \\ &= (2\pi)^3 \int_{\mathbb{R}^3} |\widehat{f}(\xi)\widehat{\eta^\gamma}(\xi)|^2 \{1 - \chi_{[0,R]}(|\xi|) r^\epsilon(|\xi|)\} d\xi.\end{aligned}$$

Die Funktion $\chi_{[0,R]}$ verschwindet definitionsgemäß außerhalb der Kugel B_R . Desweiteren ist innerhalb von B_R der Ausdruck $1 - r^\epsilon$ genau dort gleich Null, wo keine Abschneidung des reziproken Sinus stattfindet. Somit reduziert sich der Integrationsbereich in obiger Gleichung auf die Menge M^ϵ . Da zudem stets $|1 - \chi_{[0,R]} r^\epsilon| \leq 1$ gilt, folgt die Behauptung. $\square$

3.10 Korollar

Im Grenzfall $\gamma \rightarrow 0$ gilt

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \|f^\gamma - \mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}g\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq \|\widehat{f}\|_{L^2(M^\epsilon)}^2.$$

Beweis: Aus der punktweisen Konvergenz $\widehat{\eta^\gamma}(\xi) \rightarrow (2\pi)^{-3/2}$ für $\gamma \rightarrow 0$ und der Tatsache, dass $|\widehat{f}\widehat{\eta^\gamma}|^2$ eine integrierbare Majorante ist, folgt die Aussage mit Hilfe des Satzes über die majorisierte Konvergenz [Yosida, Abschnitt 0.3]. $\square$

Der Operator $\mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}$ erfüllt eine schwächere Form der Regularisierungseigenschaft. Bei der üblichen Abschätzung des Rekonstruktionsfehlers mit der Dreiecksungleichung ergibt sich

$$\|f - \mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}g^\delta\| \leq \|f - f^\gamma\| + \|f^\gamma - \mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}g\| + \|\mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}(g - g^\delta)\|,$$

wobei der mittlere zusätzliche Term in Satz 3.9 abgeschätzt wird. Eine Normabschätzung des rechten Summanden liefert das folgende Lemma.

3.11 Lemma

Es gilt die Ungleichung

$$\|\mathcal{A}^{\gamma,\epsilon}\| \leq 2\pi\epsilon^{-1} \sup_{\substack{(\sigma,\theta,\beta) \in \mathcal{T} \\ |\nu| < R}} |\beta|^{1/2} \varrho_\mu(|\nu|)^{-1} \widehat{\eta^\gamma}(\sigma, \beta)$$

mit $\nu = (\sigma, \beta)$.

Beweis: Analog zu Lemma 3.8 gilt die Abschätzung

$$\|\mathcal{A}^{\gamma, \epsilon}\| \leq (2\pi)^{3/2} \sup_{(\sigma, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} |\beta|^{-1/2} |\mathcal{F}_v \Phi^{\gamma, \epsilon}(\sigma, \theta, \beta)|.$$

Aus der Darstellung (3.18) und mit $|\sin^\epsilon| \leq \epsilon^{-1}$ folgt die Behauptung. $\square$

Insgesamt kann nun nicht mehr davon ausgegangen werden, dass eine Konvergenz der Form

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{A}^{\gamma(\delta), \epsilon} g^\delta = f$$

vorliegt, selbst wenn der Parameter ϵ ebenfalls abhängig von δ gewählt wird. Der Fehlerterm, der auch im Grenzfalle nicht verschwindet, entspricht nach Korollar 3.10 der Fourier-Transformierten der Lösung an denjenigen Stellen, an welchen der reziproke Sinus abgeschnitten wird. In den numerischen Rekonstruktionen macht sich dieses Verhalten in Form von ringförmigen Artefakten bemerkbar (siehe z. B. Abbildung 4.16). Zudem zeigt sich in den numerischen Beispielen, dass eine passende Wahl des Parameters ϵ wichtig ist für die Qualität der Ergebnisse. Vor allem die Fehlerverstärkung nimmt bei einem zu kleinen Wert signifikant zu. Andererseits deuten die Resultate in Abschnitt 4.2.2 darauf hin, dass keine Anpassung an das Fehlerniveau notwendig ist, so dass eine adäquate Wahl von ϵ fixiert werden kann.

3.3 Rekonstruktion von Features

Ähnlich wie am Ende von Abschnitt 1.3.2 wird nun das Problem betrachtet, eine „analytisierte Version“ $\mathcal{L}f$ der unbekannten Funktion f aus den Daten $g = \mathcal{A}f$ direkt zu berechnen. Dazu sei $\mathcal{L} : \mathcal{X} \supset \mathcal{D}(\mathcal{L}) \rightarrow \mathcal{X}$ mit $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{R}^3)$ ein dicht definierter Bildanalyseoperator, der sich im Frequenzraum formal als Multiplikation

$$(\mathcal{L}f)^\wedge = u \hat{f} \tag{3.19}$$

mit einer reellwertigen, lokal beschränkten und höchstens polynomiell wachsenden Funktion u schreiben lässt. Wie zuvor im 2d-Fall wird $\mathcal{L}$ durch die Festlegung

$$\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid u \cdot \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^3)\} \tag{3.20}$$

des Definitionsbereichs zu einem selbstadjungierten Operator, der folgende Vertauschungsrelation erfüllt:

3.12 Lemma

Der Operator $\mathcal{L}$ kommutiert mit den Translationsoperatoren $\mathcal{T}_s^0$ und $\mathcal{T}_z^1$ aus Satz 2.5 f).

Beweis: Gemäß der Rechenregel für Translationen in Satz A.2 f) ist $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ invariant unter Translationsoperatoren. Da zudem Multiplikationen im Frequenzraum offenbar kommutieren, ist die Behauptung gezeigt. $\square$

Aufgrund dieser Vertauschungsrelationen lassen sich die Ergebnisse, die für den Fall $\mathcal{L} = \text{id}_\chi$ hergeleitet wurden, unmittelbar auf die Feature-Rekonstruktion übertragen. Ist wie zuvor $\delta_x^\gamma = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^1 \eta^\gamma$ ein Mollifier vom Faltungstyp, wobei zusätzlich $\eta^\gamma \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$ gelte, so ergibt sich sofort, dass $\psi_x^{\mathcal{L},\gamma} = \mathcal{T}_s^0 \mathcal{T}_z^2 \Phi^{\mathcal{L},\gamma}$, $x = (s, z)$, ein Rekonstruktionskern zur Approximation von $\mathcal{L}\mathcal{A}^\dagger$ ist, falls

$$\overline{\mathcal{A}}(\mathcal{A}^* \Phi^{\mathcal{L},\gamma} - \mathcal{L}\eta^\gamma) = 0 \quad (3.21)$$

erfüllt ist. Somit erhält man die Formel zur Feature-Rekonstruktion, indem man in (3.15) die Funktion Φ^γ durch $\Phi^{\mathcal{L},\gamma}$ ersetzt, d. h.

$$\mathcal{A}^{\mathcal{L},\gamma} g = \mathcal{P}^*(g *_v \Phi^{\mathcal{L},\gamma}). \quad (3.22)$$

Auch die Berechnung des Rekonstruktionskerns gestaltet sich einfach, denn aus der Ersetzung von η^γ durch $\mathcal{L}\eta^\gamma$ in der Normalgleichung (3.14) ergibt sich im Frequenzraum die Darstellung

$$\mathcal{F}_v \Phi^{\mathcal{L},\gamma}(\sigma, \theta, \beta) = u(\sigma, \beta) \mathcal{F}_v \Phi^\gamma(\sigma, \theta, \beta) \quad (3.23)$$

mit der Lösung Φ^γ von (3.14), dem Hilfsproblem ohne Analyseoperator.

Die wichtigsten Beispiele solcher Analyseoperatoren, nämlich Faltungs- und Differentialoperatoren, wurden bereits in Abschnitt 1.3.2 kurz vorgestellt. Unter Anpassung an die 3d-Situation ergibt sich

$$\mathcal{L}f = k * f \implies u = (2\pi)^{3/2} \widehat{k} \quad (3.24)$$

für einen Faltungsoperator mit Kern k und

$$\mathcal{L}f = p(-i\nabla)f \implies u = p \quad (3.25)$$

für reelle Polynome von $-i\nabla$. Da in der Praxis die Daten diskret vorliegen, kann es numerisch von Vorteil sein, statt der exakten Ableitungen Differenzenquotienten zu verwenden. Beispielsweise besitzt die mit $(-i)$ multiplizierte zentrale Differenz für die Ableitung in Richtung v ,

$$\mathcal{L}f(x) = -i(2h)^{-1}(f(x + hv) - f(x - hv))$$

im Frequenzraum den Repräsentanten

$$u(\xi) = (2ih)^{-1}(e^{ih\langle \xi, v \rangle} - e^{-ih\langle \xi, v \rangle}) = h^{-1} \sin(h\langle \xi, v \rangle).$$

Auf analoge Art und Weise lassen sich beliebige Differenzenformeln auch für höhere Ableitungen oder Formeln höherer Ordnung im Frequenzraum darstellen.

Kapitel 4

Numerische Ergebnisse

4.1 Fraktionelle Ableitung

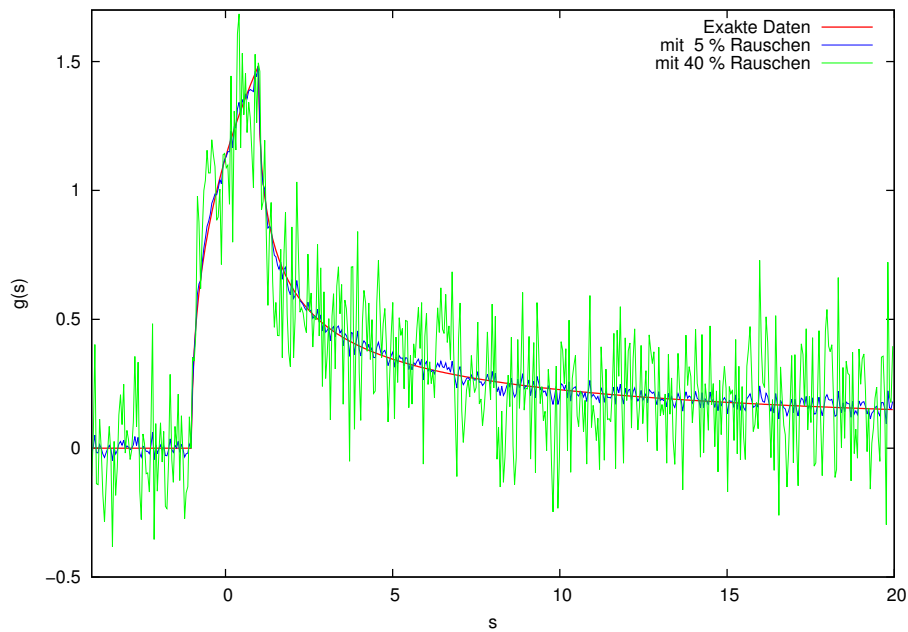


Abbildung 4.1 – Transformierte $g = \mathcal{A}_\beta \chi_{[-1,1]}$ für $\beta = 0.4$ als exakte, schwach gestörte und stark gestörte Version.

Als erstes einfaches Beispiel wird die approximative Inverse zur Berechnung der fraktionellen Ableitung einer univariaten Funktion betrachtet. Das zu lösende Problem ist die Bestimmung von f aus Daten $g = \mathcal{A}_\beta f$ mit

$$\mathcal{A}_\beta f(s) = \Gamma(\beta)^{-1} \int_{-\infty}^s \frac{f(t)}{(s-t)^{1-\beta}} dt, \quad s \in \mathbb{R},$$

vgl. Beispiel 1.2. Als numerisches Phantom dient die charakteristische Funktion $f = \chi_{[-1,1]}$ des Intervalls $[-1, 1]$, deren Fourier-Transformierte gegeben ist durch

$\widehat{f}(\tau) = (2/\pi)^{1/2} \operatorname{sinc}(\tau)$. Nach (1.7) liegt f in $\mathcal{D}(\mathcal{A}_\beta)$, falls das Integral

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} |\tau|^{-2\beta} |\widehat{f}(\tau)|^2 d\tau &= \frac{2}{\pi} \int_{\mathbb{R}} |\tau|^{-2\beta} |\operatorname{sinc}(\tau)|^2 d\tau \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{|\tau|<1} |\tau|^{-2\beta} \underbrace{|\operatorname{sinc}(\tau)|^2}_{\leq 1} d\tau + \frac{2}{\pi} \int_{|\tau|>1} |\tau|^{-2\beta-2} \underbrace{|\sin(\tau)|^2}_{\leq 1} d\tau \\ &\leq \frac{2}{\pi} \int_{|\tau|<1} |\tau|^{-2\beta} d\tau + \frac{2}{\pi} \int_{|\tau|>1} |\tau|^{-2\beta-2} d\tau. \end{aligned}$$

konvergiert. Beim zweiten Integralterm ist dies der Fall für alle $\beta > 0$, während der erste Term formal

$$\int_{|\tau|<1} |\tau|^{-2\beta} d\tau = 2 \cdot \begin{cases} (1-2\beta)^{-1} [\tau^{1-2\beta}]_0^1 & , \quad 1-2\beta \neq 0 \\ [\ln(\tau)]_0^1 & , \quad 1-2\beta = 0 \end{cases}$$

ergibt und somit für $\beta < 1/2$ endlich ist.

Die transformierte Funktion $g(s) = \mathcal{A}_\beta f(s)$ kann analytisch berechnet werden:

- $s < -1$: $\mathcal{A}_\beta f(s) = 0$
- $-1 \leq s \leq 1$:

$$\begin{aligned} \Gamma(\beta) \mathcal{A}_\beta f(s) &= \int_{-1}^s (s-t)^{\beta-1} dt \\ &= \int_0^{s+1} t^{\beta-1} dt \\ &= \beta^{-1} (s+1)^\beta \end{aligned}$$

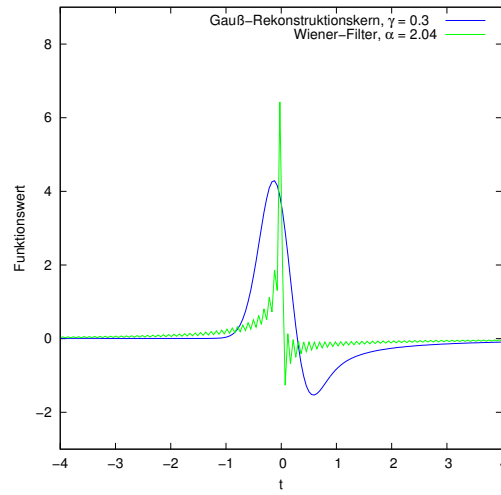
- $s > 1$:

$$\begin{aligned} \Gamma(\beta) \mathcal{A}_\beta f(s) &= \int_{-1}^1 (s-t)^{\beta-1} dt \\ &= \int_{s-1}^{s+1} t^{\beta-1} dt \\ &= \beta^{-1} ((s+1)^\beta - (s-1)^\beta) \end{aligned}$$

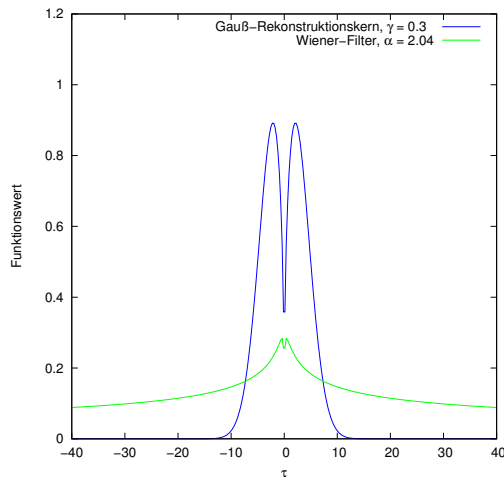
Die drei Fälle lassen sich zur geschlossenen Darstellung

$$g(s) = \frac{1}{\beta \Gamma(\beta)} (\max\{s+1, 0\}^\beta - \max\{s-1, 0\}^\beta), \quad s \in \mathbb{R} \quad (4.1)$$

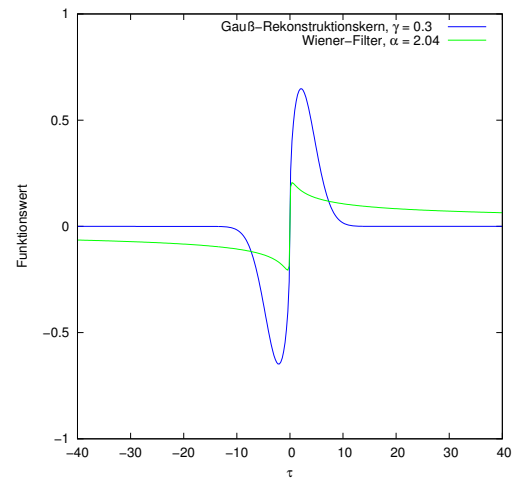
für die Datenfunktion zusammenfassen.



(a) Ortsraum



(b) Frequenzraum: Realteil



(c) Frequenzraum: Imaginärteil

Abbildung 4.2 – Funktionsgraphen des AI-Rekonstruktionskerns ($\gamma = 0.3$) und des Wiener-Filters ($\alpha = 2.04$)

Zum Test des numerischen Verfahrens werden sowohl exakte Daten verwendet als auch Daten, die durch 5% bzw. 40% additives weißes Rauschen gestört sind, siehe Abbildung 4.1. Um die Ergebnisse einordnen zu können, wird neben dem AI-Verfahren eine Tikhonov-Regularisierung verwendet, die in [HMW09, Abschnitt 4.1] dargestellt ist. Die Wahl des Verfahrensparameters α erfolgt hierbei, wie in jener Arbeit vorgeschlagen, gemäß

$$\alpha = \epsilon^{2\beta/(p+\beta)}, \quad p = 2\beta.$$

Sowohl die approximative Inverse als auch die Tikhonov-Regularisierung können als Multiplikation der Fourier-Transformierten $\widehat{g}$ der Daten mit einer Funktion aufgefasst werden. Nach der Berechnung in Beispiel 1.38 ist dieser Faktor im ersten Fall gegeben durch

$$(2\pi)^{1/2} \widehat{\phi}_\gamma(\sigma) = (2\pi)^{1/2} (i\sigma)^\beta \widehat{e}_\gamma(\sigma).$$

Bei den folgenden Resultaten wurde der Gauß-Mollifier

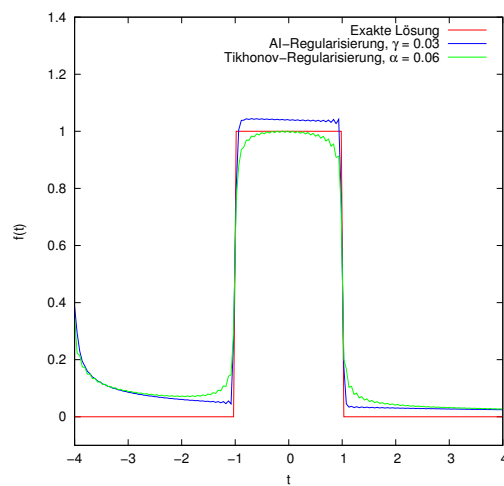
$$\widehat{e}_\gamma(\sigma) = (2\pi)^{-1/2} \exp\left(-\frac{(\gamma\sigma)^2}{2}\right)$$

eingesetzt. Im zweiten Fall des Tikhonov-Verfahrens ist der multiplikative Faktor gegeben durch den Wiener-Filter [HMW09]

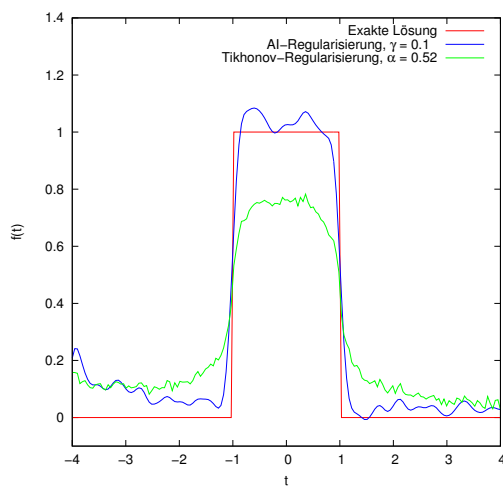
$$w(s; \alpha, \beta) = \frac{(i\sigma)^\beta}{1 + \alpha\sigma^{2\beta}}.$$

In den Abbildungen 4.2(a)–4.2(c) sind diese Funktionen illustriert. An seinem Graph im Frequenzraum zeigt sich, dass der Wiener-Filter die hohen Frequenzen wesentlich langsamer dämpft als der Gauß-Rekonstruktionskern, bei dem signifikant mehr Gewicht auf den niedrigen Frequenzen liegt. Beide Funktionen besitzen den Wert 0 an der Stelle $\tau = 0$ und damit verschwindenden Mittelwert. Folglich ist damit zu rechnen, dass der Mittelwert des Phantoms nicht korrekt rekonstruiert werden kann. Da die Nullfrequenz laut (1.8) in den Daten ohnehin singulär und damit als Information nicht verwendbar ist, hängt es von der Verteilung der Sampling-Punkte um den Ursprung herum ab, in welche Richtung und wie stark der rekonstruierte Mittelwert vom tatsächlichen Wert abweicht.

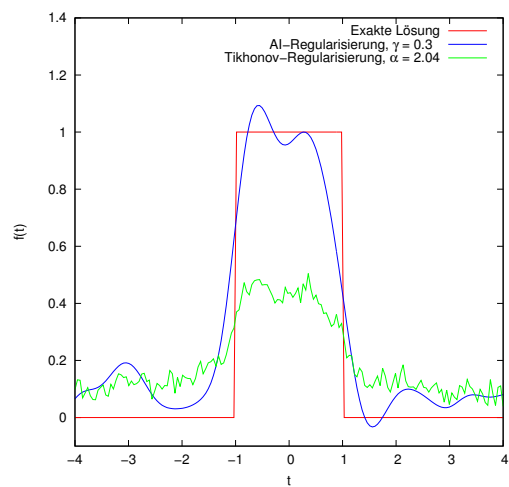
Die Ergebnisse der Rekonstruktionsverfahren sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Bei exakten Daten kann in beiden Verfahren der Regularisierungsparameter sehr klein gewählt werden ($\gamma = 0.03$, $\alpha = 0.06$), da lediglich numerische Instabilitäten vermieden werden müssen. Abbildung 4.3(a) zeigt, dass die Tikhonov-Regularisierung zwar den Funktionswert 1 besser approximiert, die Rekonstruktion jedoch zum Rand des Intervalls $[-1, 1]$ hin zu früh abfällt und damit den Verlauf des exakten Graphen weniger gut nachbildet als das AI-Verfahren. In beiden Rekonstruktionen mit gestörten



(a) Rekonstruktionen mit exakten Daten



(b) Rekonstruktionen mit schwach gestörten Daten



(c) Rekonstruktionen mit stark gestörten Daten

Abbildung 4.3 – Vergleich der Rekonstruktionsergebnisse von approximativer Inverser und Tikhonov-Regularisierung mit exakten und gestörten Daten

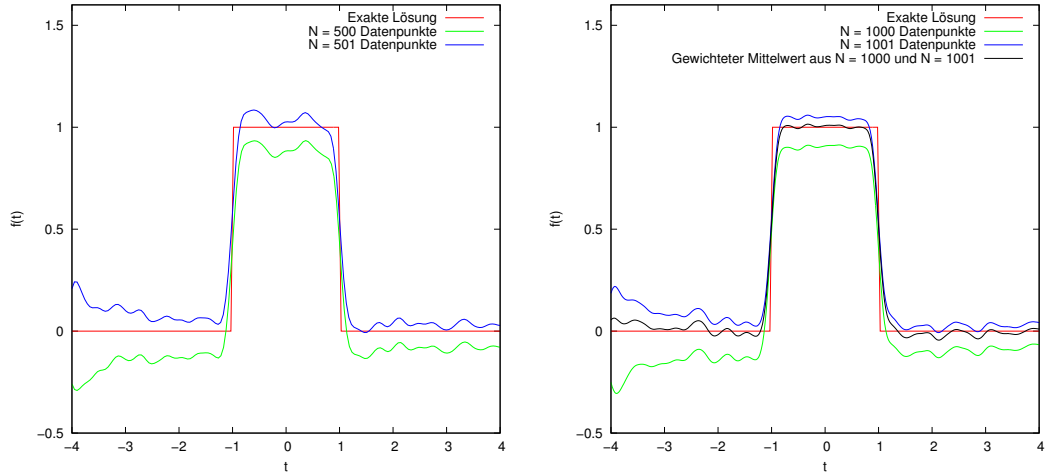


Abbildung 4.4 – Einfluss der Verteilung der Datenpunkte auf den Mittelwert. Bei gerader Anzahl N an Punkten ist die Frequenz $\tau = 0$ enthalten, bei ungerader Anzahl nicht. Für die Berechnungen wurden schwach gestörte Daten und der Gauß-Mollifier verwendet.

Daten zeigt sich hingegen, dass die AI-Methode sowohl im Approximations- als auch im Fehlerdämpfungsverhalten überlegen ist. Gerade bei stark gestörten Daten hat sich auch in anderen Anwendungen gezeigt, dass der Gauß-Mollifier besonders gut zur Rekonstruktion geeignet ist [Lou10, GKW11].

Inwiefern die Ergebnisse durch die Wahl der Sampling-Punkte beeinflusst werden, zeigt Abbildung 4.4 anhand von Rekonstruktionen mit schwach gestörten Daten. Ist die Frequenz $\tau = 0$ in den Daten enthalten, was hier für gerade Anzahlen N der Fall ist, so liegt der rekonstruierte Mittelwert unterhalb des tatsächlichen Wertes. Bei ungerader Anzahl an Punkten und damit nicht vorhandener Nullfrequenz liegt die rekonstruierte Funktion stets über der exakten Lösung. Zudem zeigt sich durch Erhöhung der Punktdichte keine Annäherung an die exakten Funktionswerte, lediglich die Form der approximativen Lösung wird verbessert. Die beste Rekonstruktion ergibt sich durch Mittelung zweier Rekonstruktionen, von denen eine mit geradem N und eine mit ungeradem N berechnet wurde.

4.2 ET: Simulierte Daten

Die in Kapitel 3 hergeleiteten Algorithmen werden nun an konkreten Beispielen getestet. Im ersten Teil werden ausgiebige numerische Tests mit simulierten Messdaten durchgeführt. Durch die Vergleichbarkeit mit der exakten Lösung bietet sich hier die Möglichkeit, einzelne Aspekte des Vorwärtsmodells und verschiedene Verfahrensparameter getrennt voneinander zu untersuchen. Zur Auswertung der Daten in diesem

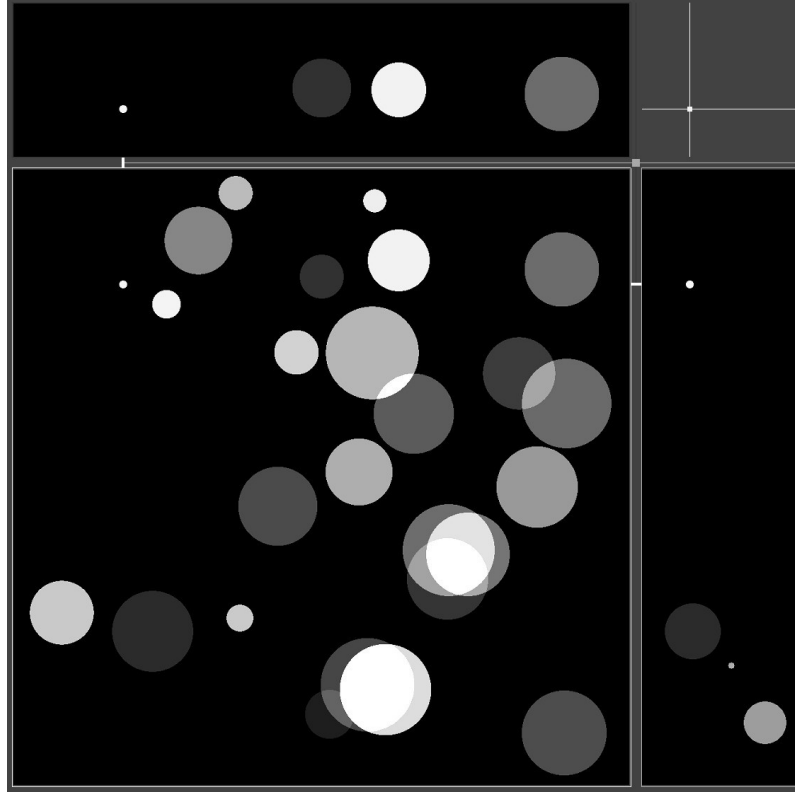


Abbildung 4.5 – XYZ-Ansicht des numerischen Phantoms (4.2).

und im folgenden Abschnitt wurde die Software IMOD [KMM96] verwendet. Basis für die Rekonstruktionen mit simulierten Daten ist das numerische *Phantom*

$$f = \sum_{j=1}^N f_j \chi_{B_j}, \quad (4.2)$$

eine gewichtete Summe charakteristischer Funktionen von Kugeln, deren Radien und Mittelpunkte zufällig gewählt sind. Sie liegen innerhalb eines Quaders, der aus $1024 \times 1024 \times 256$ Voxeln mit einer Kantenlänge von jeweils $8 \mu\text{m}$ besteht. Die Gewichte f_j sind ebenfalls zufällige Werte zwischen 1 und 10. In Abbildung 4.5 ist eine XYZ-Ansicht des Phantoms, d. h. eine Zusammenstellung von Schnitten senkrecht zu den Koordinatenachsen, dargestellt. Hierbei zeigt das große Bild einen Schnitt senkrecht zur z -Achse, das obere einen y -Schnitt und das rechte einen x -Schnitt. Die Positionen der Schnitte innerhalb des Volumens sind durch die weißen Markierungen am Rand des großen Teilbildes bzw. durch das Fadenkreuz in der rechten oberen Ecke angedeutet.

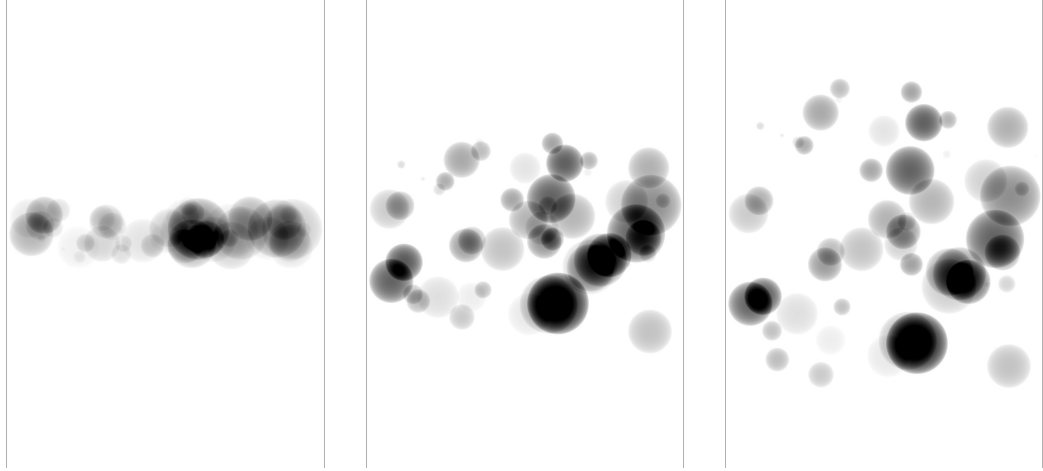


Abbildung 4.6 – Simulierte exakte Messdaten für variierenden Drehwinkel ϑ . Links: $\vartheta = -90^\circ$. Mitte: $\vartheta = -46^\circ$. Rechts: $\vartheta = 0^\circ$.

Dieses Phantom entspricht der dilatierten Phasenkontrastfunktion f_{re} in Satz 2.1, der gesuchten Größe innerhalb des Vorwärtsmodells mit konstantem Amplitudenkontrastverhältnis. Es sei an dieser Stelle betont, dass für die Erzeugung der simulierten Daten die mathematischen Modelle aus Abschnitt 2.7 verwendet werden, d. h. die Auswirkungen der Approximationen, die zu diesen Modellen führen, sind nicht Gegenstand der Untersuchungen in dieser Arbeit. Zudem hat sich im Verlaufe der numerischen Berechnungen in [KL11] gezeigt, dass sich keine messbaren Unterschiede ergeben, wenn statt der Röntgen-Transformation $\mathcal{P}$ der Propagationsoperator aus [NW01, Theorem 3.1] verwendet wird. Zur Validität der Born-Approximation in der Elektronenmikroskopie gibt es bislang kaum quantitative Analysen [Nat04]. Als gesichert gilt jedoch die qualitative Aussage, dass biologische Präparate aufgrund der geringen Ordnungszahlen der beinhaltenen Elemente bei hinreichend dünnen Proben keine Mehrfachstreuungseffekte aufweisen, während metallische Proben in den Materialwissenschaften generell Mehrfachstreuung sind.

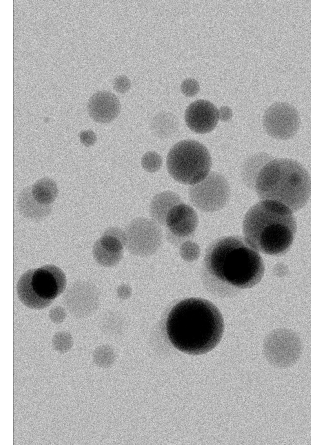


Abbildung 4.7 – Gestörte Daten, $\vartheta = 0^\circ$.

4.2.1 Vereinfachtes Modell ohne Faltung

Der erste, exakte Datensatz (s. Abbildung 4.6) besteht aus $n = 90$ Einzelbildern

$$g_j = 1 - m^2 \mathcal{P}f(\cdot, \theta_j, \cdot),$$

$$\theta_j = (\sin(\vartheta_j), \cos(\vartheta_j)), \quad \vartheta_j = -\frac{\pi}{2} + j\frac{\pi}{n}, \quad j = 0, \dots, n-1,$$

die mit Hilfe der Formel

$$\mathcal{P}\chi_{B_\varrho}(s, \theta, b) = \begin{cases} \sqrt{\varrho^2 - (s^2 + |b|^2)} & , \quad s^2 + |b|^2 < \varrho^2 \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases}$$

für die Röntgen-Transformation einer Kugel mit Radius ϱ und der Translationsinvarianz von $\mathcal{P}$ analytisch berechnet werden. Aufgrund der Tatsache, dass die gestörten Daten mit Hilfe der Intensität $I = 1 - m^2 g$ (siehe Satz 2.1) erzeugt werden, entsprechen die exakten Daten hier ebenfalls der Intensität, damit die Bilder optisch vergleichbar sind. Der Einheitsvektor θ durchläuft den gesamten Winkelbereich der oberen Halbsphäre von -90° in 2° -Schritten bis $+88^\circ$. In Abbildung 4.6 sind drei Einzelbilder zu sehen, die den Drehwinkeln -90° , -46° und 0° entsprechen. Darüber hinaus wird ein Datensatz erstellt, der aus den exakten Daten durch Hinzufügen von weißem Rauschen und Poisson-Rauschen hervorgeht. Der so entstehende Gesamt-Datenfehler beträgt etwa 50% des Signals.

Zur Rekonstruktion werden die drei Mollifier aus Satz 3.7 verwendet. Als Abkürzungen werden die folgenden Namen verwendet:

C-Mollifier für (3.7) als Produkt charakteristischer Funktionen,

B-Mollifier für (3.8) aufgrund der bandbeschränkenden Wirkung und

G-Mollifier für (3.9) mit der Gauss'schen Glockenfunktion als Erzeugenden.

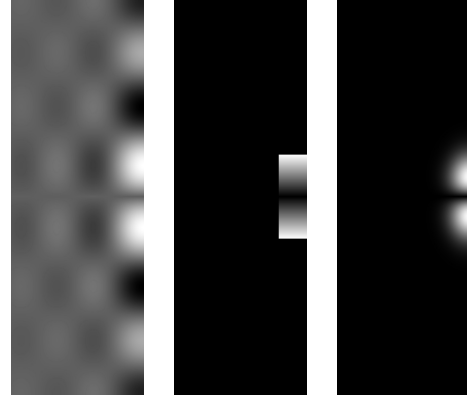


Abbildung 4.8 – Rekonstruktionskerne im Frequenzraum. Dargestellt ist nur die Halbebene $\sigma \leq 0$, da sich die positive Halbebene durch horizontale Spiegelung ergibt.

Links: C-Mollifier, $\gamma = 3 \cdot 10^{-5}$. Mitte: B-Mollifier, $\gamma = 1.2 \cdot 10^{-5}$. Rechts: G-Mollifier, $\gamma = 1.8 \cdot 10^{-5}$.

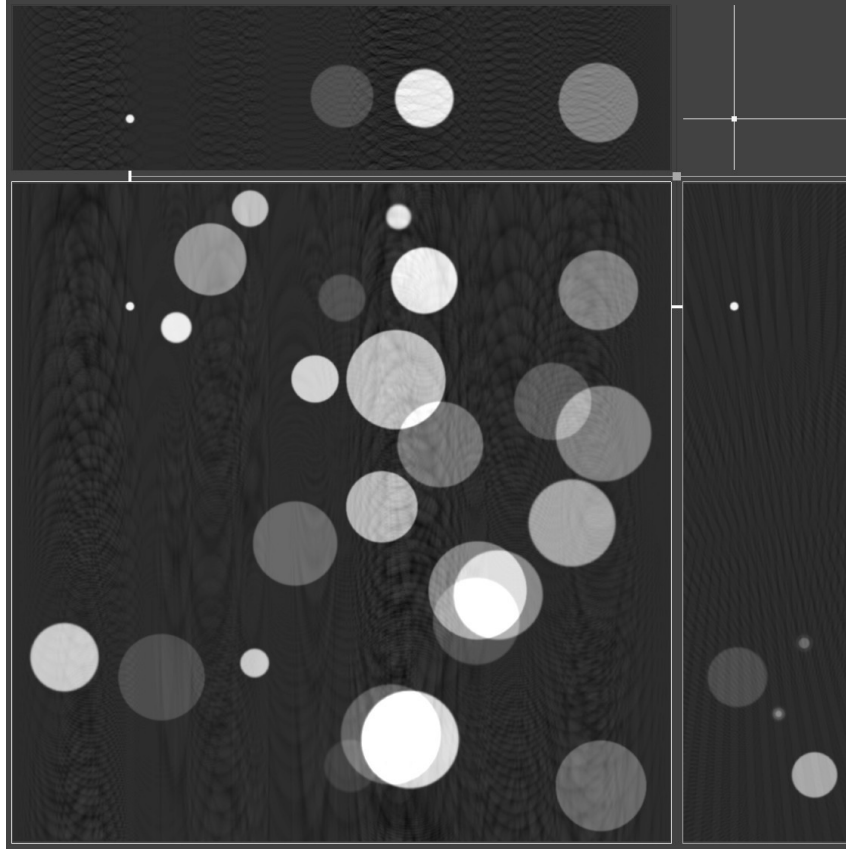


Abbildung 4.9 – XYZ-Ansicht der Rekonstruktion mit exakten Daten und G-Mollifier, $\gamma = 6 \cdot 10^{-6}$.

Die entsprechenden Rekonstruktionskerne für das Modell ohne Faltung werden erzeugt durch die Funktionen

$$\mathcal{F}_v \phi_j^\gamma(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \widehat{\eta_j^\gamma}(\sigma, \beta), \quad j = 1, 2, 3. \quad (4.3)$$

Abbildung 4.9 zeigt eine XYZ-Ansicht der Rekonstruktion des Phantoms aus exakten Daten mit Hilfe des G-Mollifiers. Sämtliche Details sind gut zu erkennen, es treten lediglich Artefakte (strahlenförmig im x -Schnitt) auf, die von der relativ geringen Anzahl der Projektionen, d. h. der groben Diskretisierung der Halbsphäre $\mathbb{S}_+^1$, herrühren.

Die Rekonstruktionen mit den beiden übrigen Mollifiern sind für exakte Daten optisch kaum von der abgebildeten zu unterscheiden, bei Verwendung von gestörten Daten zeigen sich hingegen deutliche Unterschiede. Wie in Abbildung 4.10 erkennbar, ist lediglich in der Rekonstruktion mit G-Mollifier das Rauschen effektiv gedämpft,

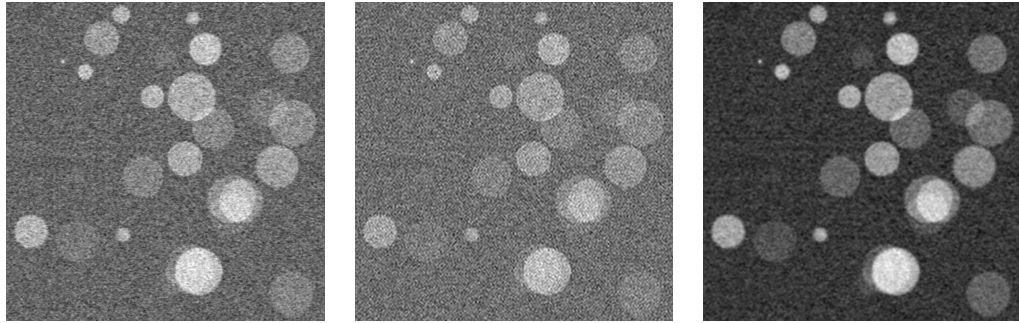


Abbildung 4.10 – z -Schnitt von Rekonstruktionen mit gestörten Daten. Links: C-Mollifier, $\gamma = 3 \cdot 10^{-5}$. Mitte: B-Mollifier, $\gamma = 1.2 \cdot 10^{-5}$. Rechts: G-Mollifier, $\gamma = 1.8 \cdot 10^{-5}$.

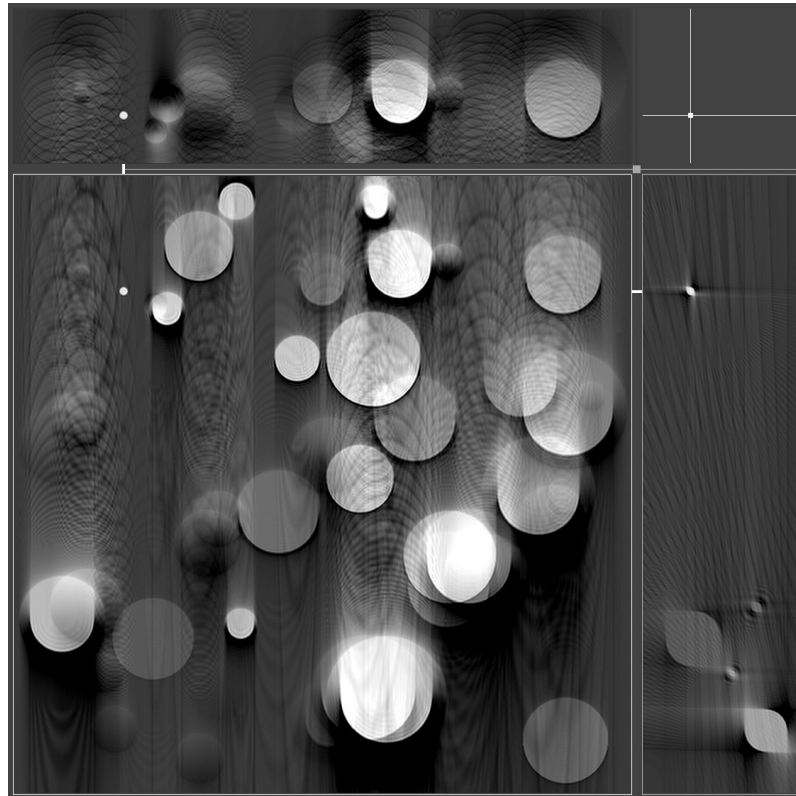


Abbildung 4.11 – XYZ-Ansicht einer Rekonstruktion mit lediglich der Hälfte des exakten Datensatzes ($-90^\circ \leq \vartheta \leq 0^\circ$).

während gleichzeitig relevante Details erhalten bleiben. Im linken und mittleren Bild sind bereits kleine Kugeln oder Objekte mit geringem Kontrast kaum vom Hintergrundrauschen zu unterscheiden. Dieses Ergebnis bestätigt die Resultate in [Lou10], die ebenfalls die besondere Eignung der Gaußfunktion zur Regularisierung bei stark gestörten Daten unterstreichen.

In vielen praktischen Anwendungen, zu denen auch die Elektronen-Tomographie zählt, stehen nicht die Messungen aus Richtungen aus der gesamten Halbsphäre $\theta \in \mathbb{S}_+^1$ zur Verfügung, sondern lediglich aus einem Teil, z. B.

$$\mathbb{S}_*^1 = \{\theta = (\sin(\vartheta), \cos(\vartheta)) \mid -\vartheta_0 \leq \theta \leq \vartheta_0\}. \quad (4.4)$$

In diesem Fall spricht man von einem *Limited-Angle-Problem*, das für die Radon-Transformation bereits 1986 eingehend untersucht wurde [Lou86]. Prinzipiell kann die Winkelbeschränkung in den Modelloperator integriert werden, doch bei dessen Inversion ergeben sich numerische Schwierigkeiten, da seine Singulärwerte wesentlich schneller fallen als beim Problem mit vollständigen Daten und infolgedessen die Fehlerverstärkung zunimmt [Lou86, Theorem 4.4]. Sowohl die Berechnung eines speziellen Limited-Angle-Rekonstruktionskerns [Die99] als auch die Fortsetzung der Daten in den fehlenden Bereich [Lou80] führen lediglich zu leichten Kontrastverbesserungen, nicht jedoch zur Minderung der Artefakte, die in Abbildung 4.11 vor allem im x -Schnitt (rechtes Teilbild) zu sehen sind. Wie es auch theoretisch zu erwarten ist [Qui93], können Dichtesprünge nur an jenen Stellen rekonstruiert werden, zu denen es eine *tangentiale Richtung in den Daten* gibt. Aus diesem Grund ist in diesem Beispiel nur die Hälfte der Berandung der Kreisscheiben exakt rekonstruiert.

Zuletzt wird das Prinzip der Feature-Rekonstruktion am Beispiel des Operators $\mathcal{L} = -\Delta$ demonstriert. Wie zu Beginn von Abschnitt 3.3 gefordert, lässt sich dieser Operator als Funktion $\mathcal{L} = p(-i\nabla)$ mit dem reellen Polynom $p(\xi) = |\xi|^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2$ schreiben. Somit gilt im Frequenzraum formal die Darstellung

$$(\mathcal{L}f)^\wedge(\xi) = (\mathcal{L}^*f)^\wedge(\xi) = |\xi|^2 \hat{f}(\xi),$$

und der Definitionsbereich ist gegeben durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid |\xi|^2 \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^3)\}.$$

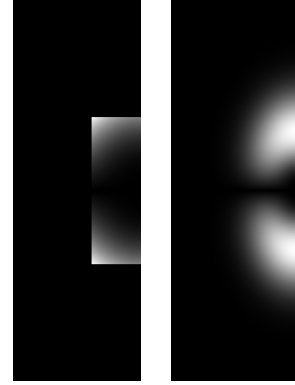


Abbildung 4.12 – Feature-Rekonstruktionskerne im Frequenzraum. Links: B-Mollifier, $\gamma = 6 \cdot 10^{-6}$. Rechts: G-Mollifier, $\gamma = 10^{-5}$.

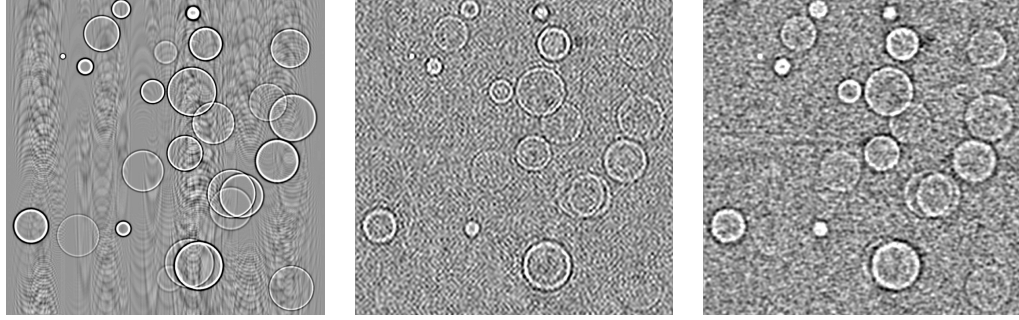


Abbildung 4.13 – z -Schnitt von $\mathcal{L}$ -Rekonstruktionen. Links: exakte Daten, G-Mollifier, $\gamma = 10^{-5}$. Mitte: gestörte Daten, B-Mollifier, $\gamma = 2 \cdot 10^{-5}$. Rechts: gestörte Daten, G-Mollifier, $\gamma = 3 \cdot 10^{-5}$.

Sowohl F- als auch G-Mollifier sind Elemente von $\mathcal{D}(\mathcal{L})$, wie sich an deren Frequenzraumdarstellung leicht ablesen lässt. Für den C-Mollifier gilt dies nicht, da seine Fourier-Transformierte nicht schnell genug fällt.

Um nun einen Feature-Rekonstruktionskern zu bestimmen, ist aufgrund der Vertauschungsrelation aus Lemma 3.12 das Problem

$$\mathcal{P}(\mathcal{P}^* \phi_j^{\mathcal{L}, \gamma} - \mathcal{L} \eta_j^\gamma) = 0, \quad j = 2, 3$$

zu lösen, d. h. in Gleichung (4.3) wird η_j^γ durch $\mathcal{L} \eta_j^\gamma$ ersetzt. Mit der Frequenzraumdarstellung von $\mathcal{L}$ ergibt sich somit

$$\mathcal{F}_v \phi_j^{\mathcal{L}, \gamma}(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} (\sigma^2 + |\beta|^2) |\beta| \widehat{\eta_j^\gamma}(\sigma, \beta). \quad (4.5)$$

In Abbildung 4.12 sind diese Funktionen illustriert. Die Regularisierungseigenschaft kann ähnlich wie im klassischen Fall $\mathcal{L} = \text{id}$ gezeigt werden. Der Beweis des folgenden Satzes ist in Anhang C ausgeführt.

4.1 Satz

Die $\mathcal{L}$ -approximative Inverse, definiert mit Hilfe der $\mathcal{L}$ -Rekonstruktionskerne, die von den Funktionen $\phi_j^{\mathcal{L}, \gamma}$ erzeugt werden, ist im Falle $\mathcal{L} = -\Delta$ für die Parameterwahl

$$\gamma(\delta) = \mathcal{O}(\delta^q), \quad 0 < q < \frac{2}{5}$$

ein Regularisierungsverfahren.

Aufgrund der zusätzlichen „aufrauenden“ Wirkung des Laplace-Operators muss erwartungsgemäß der Regularisierungsparameter größer gewählt werden als bei der herkömmlichen Rekonstruktion. In Abbildung 4.13 ist erkennbar, dass sowohl F- als

auch G-Mollifier zur Feature-Rekonstruktion mit $\mathcal{L} = -\Delta$ geeignet sind, wobei wiederum der G-Mollifier Fehler besser dämpft und die entsprechende Rekonstruktion zur weiteren Verwendung, beispielsweise in der Kantenerkennung, eher geeignet ist.

4.2.2 Vollständiges ET-Modell

Im Folgenden wird nun zur Erzeugung der Daten das volle Vorwärtsmodell

$$g_j = 1 - m^2 \mathcal{CP}f(\cdot, \theta_j, \cdot)$$

auf dasselbe numerische Phantom f angewandt. Wie im ersten Fall werden ein exakter und ein stark verrauschter Datensatz erzeugt, von denen jeweils die zentrale Projektion ($\vartheta = 0^\circ$) in Abbildung 4.15 zu sehen ist. Im Vergleich zu den Daten ohne Faltung in den Abbildungen 4.6 und 4.7 kann eine sichtbare Verwischung der Ränder beobachtet werden, die von einem signifikanten Einfluss des Faltungsoperators zeugt.

Zur Bestimmung der Rekonstruktionskerne werden hier die erzeugenden Funktionen $\phi_j^{\gamma, \epsilon}$ ($j = 1, 2, 3$) mit

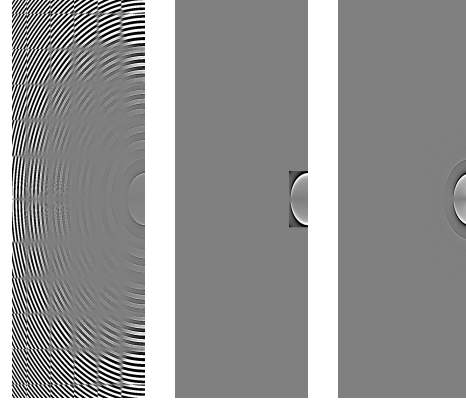


Abbildung 4.14 – Rekonstruktionskerne mit CTF-Inversion im Frequenzraum (Halbebene $\sigma \leq 0$). Links: C-Mollifier, $\gamma = 4.5 \cdot 10^{-5}$. Mitte: B-Mollifier, $\gamma = 1.8 \cdot 10^{-5}$. Rechts: G-Mollifier, $\gamma = 2.7 \cdot 10^{-5}$.

$$\mathcal{F}_v \Phi_j^{\gamma, \epsilon}(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} |\beta| \chi_{[0, R]}(|\nu|) \varrho_\mu(|\nu|)^{-1} \sin^\epsilon(\alpha_\mu(|\nu|)) \widehat{\eta_j^\gamma}(\sigma, \beta) \quad (4.6)$$

verwendet (vgl. Abschnitt 3.2.2), die in Abbildung 4.14 dargestellt sind. Sofern nicht anders angegeben, wird für den Abschneideparameter ϵ der Wert 0.05 gewählt.

Die Rekonstruktionen mit exakten Daten ergeben eine ähnliche Situation wie zuvor ohne CTF: zwischen den verschiedenen Mollifiern gibt es kaum feststellbare Unterschiede in den Ergebnissen. In allen drei Fällen sind sämtliche Details gut zu erkennen, und die Artefakte durch die grobe Diskretisierung des Winkelbereichs sind ebenfalls zu sehen. Hinzu kommen ringförmige Artefakte, die von der näherungsweisen Inversion der Faltung herrühren. Exemplarisch ist in Abbildung 4.16 ein Ausschnitt der Rekonstruktion mit B-Mollifier dargestellt. Verwendet man gestörte Daten, so zeigt sich ein noch größerer Regularisierungsbedarf im Vergleich zum vereinfachten Modell ohne CTF. Bereits anhand des Erscheinungsbilds des Rekonstruktionskerns zum C-Mollifier (Abbildung 4.14, linkes Bild) wird deutlich, dass hier die hohen Frequenzen extrem verstärkt werden und die zugehörige Rekonstruktion consequently völlig unbrauchbar ist. Dieses Verhalten ist damit zu erklären, dass der

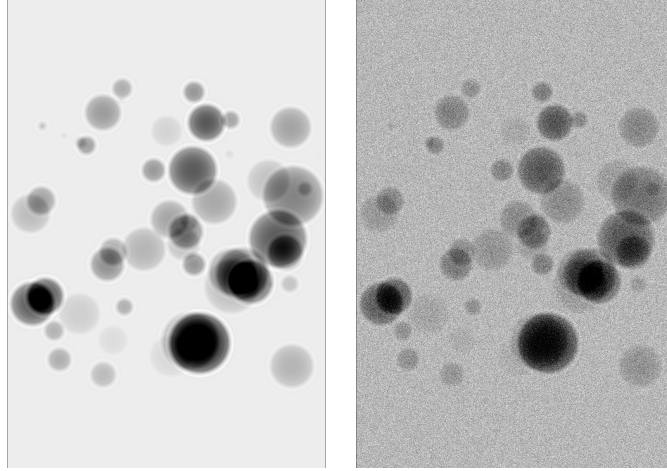


Abbildung 4.15 – Simulierte Messdaten mit CTF. Links: exakte Daten. Rechts: gestörte Daten.

exponentiell wachsende Faktor e^{z_e} im Term ϱ_μ^{-1} in (3.18) erst weit außerhalb des relevanten Frequenzbereichs durch die charakteristische Funktion $\chi_{[0,R]}$ abgeschnitten wird. Der dämpfende Faktor $\widehat{\eta}_1^\gamma(\sigma, \beta)$ fällt hingegen nicht schnell genug, um dieses Anwachsen der hohen Frequenzen zu verhindern. Bei den beiden übrigen Mollifiern stellt dies kein Problem dar (vgl. Abbildung 4.14). Dennoch ergeben sich deutliche Unterschiede im Regularisierungsverhalten: wiederum ist der G-Mollifier durch die stärker glättende Wirkung dem B-Mollifier überlegen, (vgl. Abbildung 4.17).

Bei der Inversion der Faltung kommt nicht nur γ , sondern auch dem Abschneideparameter ϵ im reziproken Sinus (3.17) eine regularisierende Funktion zu, d. h. bei der Wahl eines Wertes muss zwischen Approximation und Fehlerdämpfung vermittelt werden. Verwendet man einen zu großen Wert (Abbildung 4.18, linkes Bild), d. h.

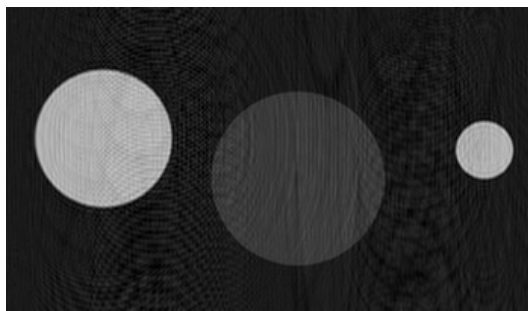


Abbildung 4.16 – z -Schnitt der Rekonstruktion mit exakten Daten und B-Mollifier, $\gamma = 4 \cdot 10^{-6}$ (Detailausschnitt).

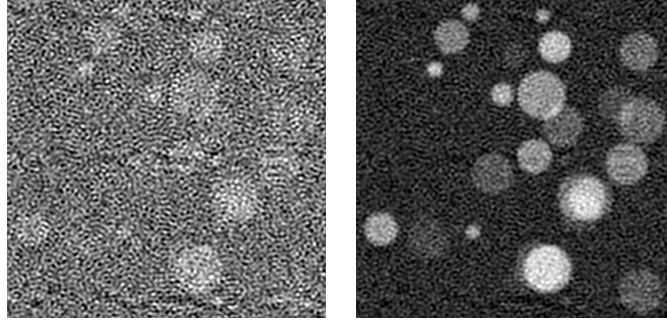


Abbildung 4.17 – z -Schnitt von Rekonstruktionen mit CTF-Inversion bei gestörten Daten. Links: B-Mollifier, $\gamma = 1.8 \cdot 10^{-5}$. Rechts: G-Mollifier, $\gamma = 2.7 \cdot 10^{-5}$.

schneidet man die Polstellen zu „früh“ ab, so wird die Faltung nicht effektiv invertiert, und es bleiben CTF-Effekte in der Lösung zurück. Die Wahl eines zu kleinen Wertes führt andererseits zu einer inadäquaten Fehlerdämpfung, da zu großes Gewicht auf wenige Frequenzbereiche gelegt wird (Abbildung 4.18, rechtes Bild). Der Wert $\epsilon = 0.05$, der in den zuvor dargestellten Rekonstruktionen verwendet wurde, hat sich hier als guter Kompromiss herausgestellt.

Eine weitere Größe mit potentielltem Einfluss auf die Qualität von Rekonstruktionen ist das Amplitudenkontrastverhältnis (ACR) μ , welches als Modellparameter in die CTF (2.33) eingeht. Da es lediglich in einer konstanten Verschiebung des CTF-Profiles resultiert und bis auf einen konstanten Faktor keine Veränderung der CTF-Amplitude bewirkt, ist eine adäquate Parameterwahl wichtig für die Approximation, nicht jedoch für die Fehlerdämpfung. In Abbildung 4.19 sind daher approximative Lösungen mit exakten Daten illustriert. Mit $\mu = 0$, d. h. bei verschwindendem Ima-

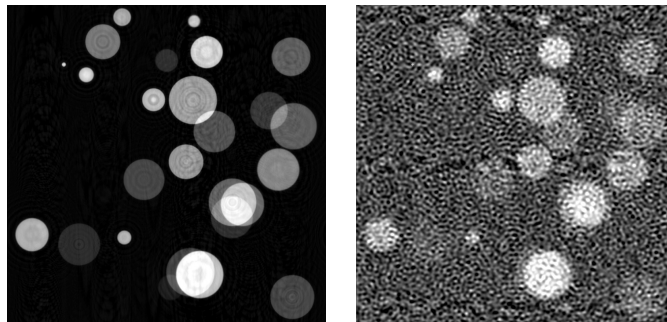


Abbildung 4.18 – z -Schnitt von Rekonstruktionen mit G-Mollifier. Links: exakte Daten, $\epsilon = 0.5$, $\gamma = 6 \cdot 10^{-6}$. Rechts: gestörte Daten, $\epsilon = 0.01$, $\gamma = 2.7 \cdot 10^{-5}$.

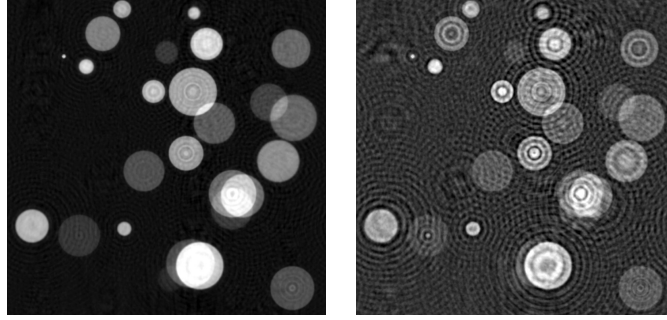


Abbildung 4.19 – z -Schnitt von Rekonstruktionen aus exakten Daten mit „falschem“ ACR und G-Mollifier, $\gamma = 6 \cdot 10^{-6}$. Links: $\mu = 0$. Rechts: $\mu = 1$. Die Daten wurden mit $\mu = 0.2$ berechnet.

ginärteil der komplexen Kontrastfunktion (reines „Phasenobjekt“) ergibt sich ein etwas überglattes Bild mit leichten Artefakten, während die Wahl $\mu = 1$ (Phasen- und Amplitudenkontrast gleich gewichtet) starke ringförmige Artefakte produziert. Bei der Berechnung der Daten wurde der Wert $\mu = 0.2$ verwendet.

Abschließend wird auch innerhalb dieses Modells die Feature-Rekonstruktion anhand des Operators $\mathcal{L} = -\Delta$ mit dem G-Mollifier getestet. Wie zuvor wird ein $\mathcal{L}$ -Rekonstruktionskern berechnet, indem zur Funktion (4.6) wiederum der Faktor $p(\xi) = |\xi|^2$ multipliziert wird. Auf eine explizite Darstellung der entstehenden Funktion wird hier verzichtet. Abbildung 4.20 zeigt deutlich, dass eine approximative Berechnung von $-\Delta f$ auch im Modell mit CTF und mit gestörten Daten gut funktioniert.

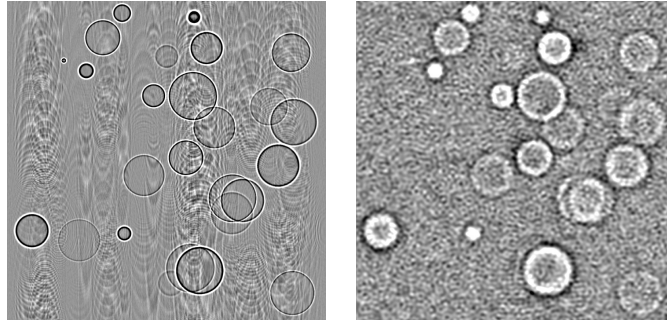


Abbildung 4.20 – z -Schnitt von Feature-Rekonstruktionen mit G-Mollifier. Links: exakte Daten, $\gamma = 10^{-5}$. Rechts: gestörte Daten, $\gamma = 4.5 \cdot 10^{-5}$.

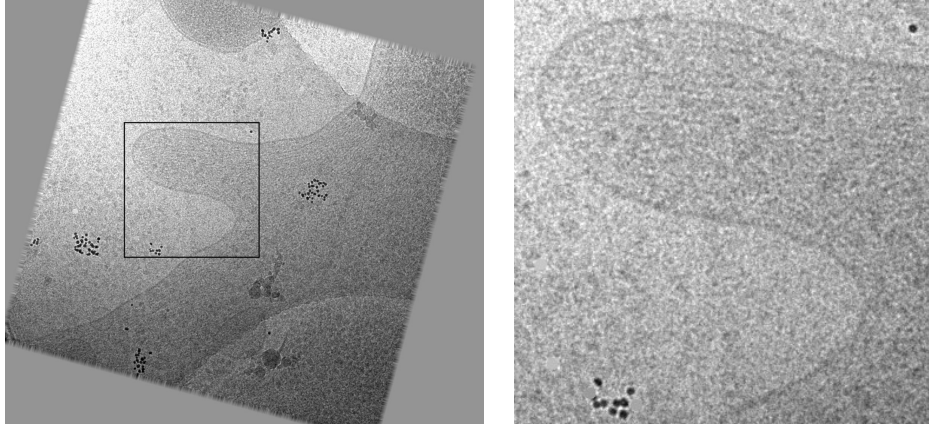


Abbildung 4.21 – Einzelbild $\vartheta = 1^\circ$ aus dem Filopod-Datensatz. Links: ganzes Bild. Rechts: umrahmter Detailausschnitt.

4.3 ET: Reale Messdaten

In diesem zweiten Teil werden reale Messdaten als Eingabe für das Verfahren der approximativen Inversen verwendet. Es handelt sich um cryo-elektronenmikroskopische Aufnahmen einer *Dictyostelium*-Zelle, die am Max-Planck-Institut in Martinsried entstanden sind [M⁺07]. Das Hauptaugenmerk der zitierten Arbeit liegt auf der Bestimmung der Orientierung von *Aktin-Filamenten* innerhalb der Zelle, speziell in einer Region, in der sich ein sog. Scheinfüßchen (*Filopodium*, s. Abbildung 4.21 rechts) bildet. Der Durchmesser eines Filaments beträgt lediglich 6 Nanometer, so dass eine hohe Auflösung benötigt wird, um Objekte voneinander trennen zu können und Orientierungen eindeutig festzulegen. Der gesamte Datensatz besteht aus 61 Einzelbildern einer Größe von 2048×2048 Pixeln, wobei jedes Pixel des realen Detektors eine Seitenlänge von $30\mu\text{m}$ besitzt. Unter Berücksichtigung eines Vergrößerungsfaktors von $m = 36527$ ergibt sich folglich eine theoretisch erreichbare Auflösung von 0.8 nm, die jedoch aufgrund des Datenfehlers nicht realisiert werden kann. Abbildung 4.21 belegt, dass zum einen der Kontrast im Vergleich zum Hintergrund gering ist, und dass zum anderen ein relativ starkes Rauschen in den Bildern vorliegt. Desweiteren ist der Winkelbereich eingeschränkt auf den Bereich $-55^\circ \leq \vartheta \leq 65^\circ$ bei äquidistanter Zerlegung, genauer gesagt entspricht das j -te Bild dem Drehwinkel $\vartheta_j = -55^\circ + j \cdot 2^\circ$. Die Kombination dieser Umstände macht die Rekonstruktion zu einer großen Herausforderung.

Abbildung 4.22 zeigt, dass es trotzdem gelingt, mit Hilfe der approximativen Inversen eine detailreiche Rekonstruktion zu erhalten, bei der das Bildrauschen effektiv gedämpft ist. Die Berandung der Zelle ist sehr gut zu erkennen, und ebenso heben sich die Aktin-Filamente sowie die kreisförmigen Organelle deutlich vom Hin-

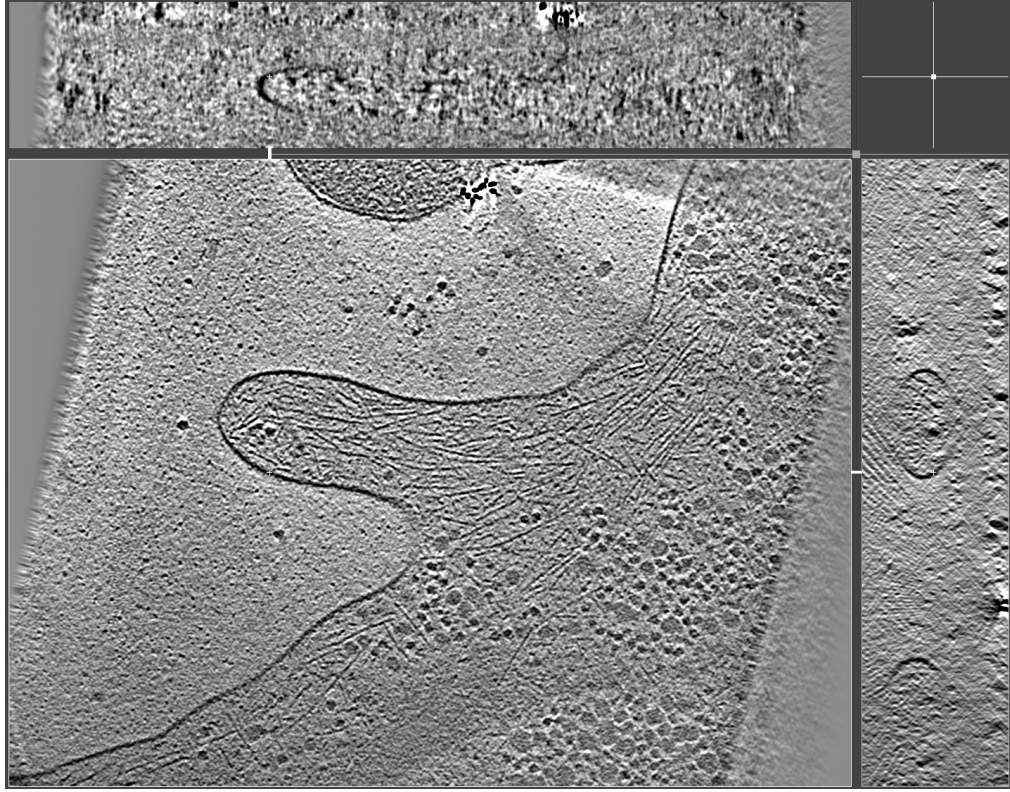


Abbildung 4.22 – XYZ-Ansicht einer Rekonstruktion mit G-Mollifier, $\gamma = 6 \cdot 10^{-5}$. Die Positionen der Schnitte innerhalb des Volumens sind mit weißen Markierungen am großen Teilbild bzw. mit dem Fadenkreuz in der rechten oberen Ecke angedeutet.

tergrund ab. Der Kontrast im z -Schnitt (großes Teilbild) ist ausreichend, um die einzelnen Objekte voneinander trennen zu können. Am x -Schnitt (rechtes Teilbild) zeigen sich hingegen die Limited-Angle-Effekte: Die obere und untere Berandung des Filopodiums (oben/unten im y -Schnitt, links/rechts im x -Schnitt) ist nicht sichtbar in der Rekonstruktion, da der Elektronenstrahl aufgrund des beschränkten Drehwinkels niemals tangential zu diesen Dichtesprüngen ist. Um das AI-Verfahren in Relation zu etablierten Methoden zu setzen, wird die obige approximative Lösung verglichen mit zwei weiteren Rekonstruktionen, die mit der IMOD-Software unter Verwendung desselben Datensatzes berechnet wurden. IMOD unterstützt zum einen *weighted backprojection* (WBP) [Rad06], eine direkte Methode, und zum anderen SIRT, ein iteratives Verfahren [KS01, Abschnitt 7.3]. Bei ersterem handelt es sich um eine Variante der gefilterten Rückprojektion, bei der die Filterung wie im Falle der hier vorgestellten AI-Methode im Frequenzraum vorgenommen wird.

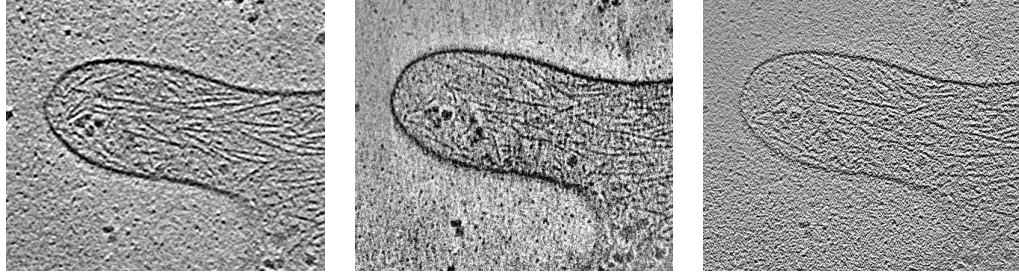


Abbildung 4.23 – z -Schnitt von Rekonstruktionen (Detailausschnitt). Links: AI-Methode, G-Mollifier, $\gamma = 6 \cdot 10^{-5}$. Mitte: SIRT, 4 Iterationen. Rechts: WBP.

Das SIRT-Verfahren ist eine Abwandlung der algebraischen Rekonstruktionstechnik (ART) [KS01, Abschnitt 7.2], bei der nicht jede Projektion einzeln zum Update verwendet wird, sondern die Updates aller Projektionen gemittelt werden. Beide Methoden gelten innerhalb der biologischen Wissenschaften als Standardverfahren und können daher als Referenz angesehen werden. In Abbildung 4.23 zeigt sich, dass AI und SIRT vergleichbar gute Ergebnisse liefern, während WBP signifikant schlechtere Bilder ergibt. Der visuelle Eindruck, den die Rekonstruktionen mit AI bzw. SIRT vermitteln, sind dabei recht unterschiedlich. Das AI-Bild wirkt glatter und weniger verrauscht, während bei SIRT der Kontrast möglicherweise etwas besser ist. Bezüglich des Detailreichtums sind beide als gleichwertig einzuschätzen. Berücksichtigt man als zusätzliches Bewertungskriterium die Berechnungszeit, so lässt sich bei der hier verwendeten Auflösung von $2048 \times 2048 \times 600$ Voxeln feststellen, dass die Berechnung einer WBP-Rekonstruktion mit IMOD 8 Minuten dauert, während eine einzige SIRT-Iteration bereits 48 Minuten in Anspruch nimmt. Da zudem das AI-Verfahren bis auf die Berechnung des Kerns identisch ist mit WBP, gilt dort bei geschwindigkeitsoptimierter Implementierung dieselbe Aussage, dass im Vergleich zu SIRT eine auf 1/6 reduzierte Berechnungsdauer erreicht werden kann. Als Beispiel zur Feature-Rekonstruktion wird die Korrelation (Faltung) der Lösung mit einem Zylinder-Template betrachtet. Diese Prozedur ist die Basis des *template matchings* [Ros03], bei dem anhand der Korrelation der Lösung mit einem Template in unterschiedlichen Orientierungen automatisch entschieden wird, wo sich mit hoher Wahrscheinlichkeit ein Objekt entsprechender Form und Ausrichtung befindet. Die spezielle Wahl eines Zylinder-Templates, d. h. der charakteristischen Funktion eines Zylinders, eignet sich zur Detektion von Aktin-Filamenten, da diese nahezu zylinderförmig sind.

Der $\mathcal{L}$ -Rekonstruktionskern für $\mathcal{L}f = k * f$ ergibt sich nach (3.24) aus der ursprünglichen erzeugenden Funktion, indem die Frequenzraum-Darstellung mit $(2\pi)^{3/2} \hat{k}$ multipliziert wird. In Abbildung 4.24 sind beispielhaft 6 solcher Korrelations-Rekon-

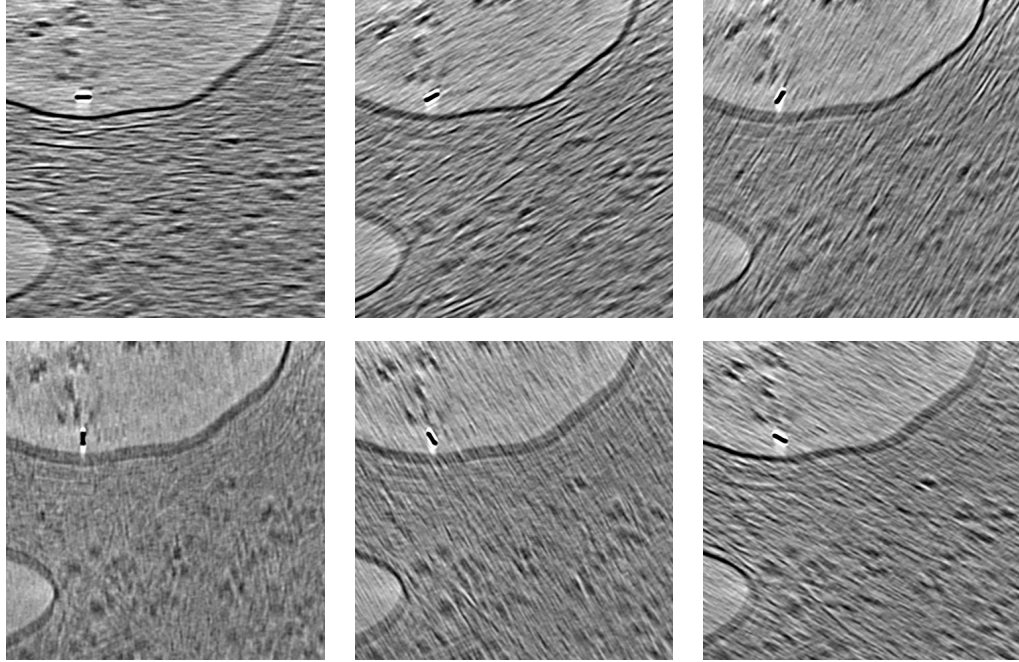


Abbildung 4.24 – Korrelations-Rekonstruktionen mit einem Zylinder-Template (Radius 6 nm, Länge 40 nm), G-Mollifier, $\gamma = 3 \cdot 10^{-5}$. Von links oben nach rechts unten: 0° , 30° , ..., 150° Rotation des Zylinders in der x - y -Ebene.

strukturen abgebildet, bei denen das Zylinder-Template in der x - y -Ebene rotiert. Hier zeigt sich, dass durch die zusätzliche regularisierende Wirkung der Faltung ein kleinerer Regularisierungsparameter gewählt werden kann. Folglich wird durch die Kombination von Rekonstruktion und Analyse in diesem Fall der „Umweg“ über die stärker zu regularisierende herkömmliche Rekonstruktion, die anschließend nachträglich durch die Analyse geglättet wird, vermieden und stattdessen ein passender Regularisierungsparameter für beide Schritte gewählt. Es ist zu erwarten, dass hierdurch deutlich detailliertere Korrelationsbilder möglich sind.

Anhang A

Notationen und Grundlagen

A.1 Notationen

In der gesamten Arbeit wird, wann immer möglich, ein festes Schema bei der Benennung der Variablen verwendet. Dabei wird unterschieden nach dem Definitionsgebiet der Variablen sowie nach ursprünglicher und Fourier-transformierter Funktion. Die folgende Tabelle listet die regelmäßig verwendeten Variablen auf.

Variable	Element von	Im Fourierraum
x, y	$\mathbb{R}^3$	ξ, η
s	$\mathbb{R}$	σ
z	$\mathbb{R}^2$	ζ
ω	$\mathcal{S}^2$	
θ	$\mathcal{S}^1$	
v, t	$\omega^\perp \subset \mathbb{R}^3$	ν, τ
b	$\theta^\perp \subset \mathbb{R}^2$	β

Tabelle A.1 – Variablenbezeichnungen mit Definitionsgebiet und Entsprechung im Fourierraum.

Für Funktionen f , die auf einer Teilmenge von $\mathbb{R}^3$ definiert sind, gilt der Übersichtlichkeit halber die Notation

$$f(x) = f(s, z) \text{ statt } f((s, z)), \quad x = (s, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (\text{A.1})$$

Ebenso wird die Kurzschreibweise

$$g(\omega, v) = g(s, \theta, b) \text{ statt } g((0, \theta), (s, b)), \quad \omega = (0, \theta) \in \mathcal{S}^2, \quad v = (s, b) \in \omega^\perp \quad (\text{A.2})$$

für eine Funktion g verwendet, die auf dem Tangentialbündel $\mathcal{T}$ definiert ist, vgl. Definition 2.3.

A.2 Grundlagen

A.2.1 Fourier-Transformationen

Zur Einführung und Untersuchung der Fourier-Transformation wird zumeist der *Schwartz-Raum* (oder Raum der *schnell fallenden Funktionen*) verwendet. Er ist definiert als

$$S(\mathbb{R}^d) = \{f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C} \mid \|f\|_{j,k} < \infty \text{ für alle } j, k \in \mathbb{N}^d\},$$

$$\|f\|_{j,k} = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |x^j \partial^k f(x)|. \quad (\text{A.3})$$

Die folgende Definition und die Aussagen des darauffolgenden Satzes beziehen sich allesamt auf schnell fallende Funktionen.

A.1 Definition (Fourier-Transformation auf $\mathbb{R}^d$)

Die Fourier-Transformation (FT) auf $\mathbb{R}^d$, ist definiert als

$$\widehat{f}(\xi) = \mathcal{F}f(\xi) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-i\langle \xi, x \rangle} dx. \quad (\text{A.4})$$

Die Dach-Notation $\widehat{f}$ oder auch beispielsweise $(\mathcal{A}f)^\widehat{}$ bezeichnet dabei immer die Fourier-Transformation auf $\mathbb{R}^d$ mit passendem d , im Gegensatz zur unten definierten FT auf Hyperebenen, für die stets eine Operatorschreibweise verwendet wird. $\square$

A.2 Satz (Eigenschaften der Fourier-Transformation [SW71])

Die folgenden Eigenschaften gelten für die FT auf $\mathbb{R}^d$:

a) Der Operator $\mathcal{F}$ ist wegen

$$\|\widehat{f}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad (\text{A.5})$$

fortsetzbar als Isometrie auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Desweiteren gilt für $1 < p \leq 2$ und den dazu konjugierten Exponenten $p' = p/(p-1)$ die Hausdorff-Young'sche Ungleichung

$$\|\widehat{f}\|_{L^{p'}(\mathbb{R}^d)} \leq c(p, d) \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}. \quad (\text{A.6})$$

Zusammen mit der elementaren Abschätzung $\|\widehat{f}\|_{L^\infty} \leq (2\pi)^{-d/2} \|f\|_{L^1}$ folgt, dass sich $\mathcal{F}$ stetig fortsetzen lässt als Operator $\mathcal{F} : L^p(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^{p'}(\mathbb{R}^d)$ für alle $p \in [1, 2]$.

b) Als L^2 -Isometrie erfüllt $\mathcal{F}$ die Identität $\mathcal{F}^* \mathcal{F} = \text{id}_{L^2(\mathbb{R}^d)}$, d. h. der inverse Operator ist gegeben durch

$$\mathcal{F}^{-1}f(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} f(\xi) e^{i\langle x, \xi \rangle} d\xi = \mathcal{F}f(-x). \quad (\text{A.7})$$

Damit ergibt sich einerseits

$$\mathcal{F}^2 f(x) = \mathcal{F}^{-2} f(x) = f(-x) \quad (\text{A.8})$$

und andererseits

$$\mathcal{F}^{-1} \overline{f} = \overline{\mathcal{F}f}. \quad (\text{A.9})$$

Aus obiger Gleichung leitet man unmittelbar die Regel

$$\int_{\mathbb{R}^d} \widehat{f}(\xi) g(\xi) \, d\xi = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \widehat{g}(x) \, dx \quad (\text{A.10})$$

zur „Verschiebung des Daches“ ab.

c) Für eine reellwertige Funktion f gilt $\mathcal{F}f(-\xi) = \overline{\mathcal{F}f(\xi)}$. Ist hingegen f gerade, d. h. $f(-x) = f(x)$, so ist $\mathcal{F}f$ reellwertig. Beide Aussagen zusammen ergeben, dass mit f auch $\mathcal{F}f$ reellwertig und gerade ist.

d) Ist f rotationssymmetrisch, so gilt diese Eigenschaft auch für $\widehat{f}$.

e) Im Zusammenhang mit der Differentiation gelten die Rechenregeln

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\partial_j f)(\xi) &= i\xi_j \mathcal{F}f(\xi) \\ \mathcal{F}(x_j f)(\xi) &= i\partial_j \mathcal{F}f(\xi). \end{aligned}$$

f) Für die Translation $\mathcal{T}^a f(x) = f(x - a)$ gilt die Vertauschungsregel

$$\mathcal{F}\mathcal{T}^a f(\xi) = e^{-i\langle \xi, a \rangle} \mathcal{F}f(\xi).$$

g) Die Dilatation $\mathcal{D}^\alpha f(x) = |\alpha|^{-d/2} f(\alpha^{-1}x)$ erfüllt die Gleichung

$$\mathcal{F}\mathcal{D}^\alpha = \mathcal{D}^{1/\alpha} \mathcal{F}.$$

Jede Hyperebene in $\mathbb{R}^d$ ist mittels Rotation isometrisch isomorph zu $\mathbb{R}^m$, wobei m die Dimension der Hyperebene ist. Diese Tatsache ermöglicht die Definition einer Fourier-Transformation auch von Funktionen auf beliebigen Hyperebenen. Die im folgenden auftretenden Funktionen seien dabei schnell fallende Funktionen auf ihrem jeweiligen Definitionsgebiet.

A.3 Definition (Fourier-Transformation auf Hyperebenen)

Sei $\mathcal{H}_m$ eine m -dimensionale Hyperebene in $\mathbb{R}^d$. Die Fourier-Transformation einer Funktion h auf $\mathcal{H}_m$ ist definiert als

$$\mathcal{F}_m h(\alpha) = (2\pi)^{-m/2} \int_{\mathcal{H}_m} h(a) e^{-i\langle \alpha, a \rangle} \, da, \quad \alpha \in \mathcal{H}_m. \quad (\text{A.11})$$

In dieser Arbeit treten vier spezielle Hyperebenen auf, zu denen jeweils Fourier-Transformationen definiert werden.

- a) Die 1d-FT entlang der ersten Koordinatenachse sei bezeichnet mit $\mathcal{F}_s$, da s stets als Variable für die erste Koordinatenrichtung verwendet wird. Sie kommt zum Einsatz sowohl für Funktionen auf $\mathbb{R}^3$ gemäß

$$\mathcal{F}_s f(\sigma, z) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} f(s, z) e^{-i\sigma s} ds, \quad \sigma \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{R}^2, \quad (\text{A.12})$$

als auch für Funktionen auf $\mathcal{T}$ (siehe Definition 2.3):

$$\mathcal{F}_s g(\sigma, \theta, b) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} g(s, \theta, b) e^{-i\sigma s} ds, \quad \sigma \in \mathbb{R}, \quad \theta \in \mathbb{S}_+^1, \quad b \in \theta^\perp. \quad (\text{A.13})$$

- b) Die 2d-FT bezüglich der letzten beiden Koordinatenrichtungen sei definiert als

$$\mathcal{F}_z f(s, \zeta) = (2\pi)^{-1} \int_{\mathbb{R}^2} f(s, z) e^{-i\langle \zeta, z \rangle} dz, \quad s \in \mathbb{R}, \quad \zeta \in \mathbb{R}^2. \quad (\text{A.14})$$

- c) Zu einem beliebigen Richtungsvektor $\omega \in \mathbb{S}^2$ ist die 2d-FT auf der Normalebene $\omega^\perp$ gegeben durch

$$\mathcal{F}_v g(\omega, \eta) = (2\pi)^{-1} \int_{\omega^\perp} g(\omega, v) e^{-i\langle \eta, v \rangle} dv, \quad \eta \in \omega^\perp. \quad (\text{A.15})$$

- d) Ist g eine Funktion auf $\mathcal{T}$ und $\theta \in \mathbb{S}_+^1$ ein Richtungsvektor in $\mathbb{R}^2$, so ist die 1d-FT auf $\theta^\perp$ gegeben durch

$$\mathcal{F}_b g(s, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\theta^\perp} g(s, \theta, b) e^{-i\langle \beta, b \rangle} db, \quad s \in \mathbb{R}, \quad \theta \in \mathbb{S}_+^1, \quad \beta \in \theta^\perp. \quad (\text{A.16})$$

Der Kurzschreibweise (A.2) für einen Vektor $v = (s, b) \in \omega^\perp = (0, \theta)^\perp$ folgend, wird die Zusammenfassung $\mathcal{F}_v$ der beiden 1d-Transformationen $\mathcal{F}_s$ und $\mathcal{F}_b$ geschrieben als

$$\mathcal{F}_v g(\sigma, \theta, \beta) = (2\pi)^{-1} \int_{\mathbb{R}} \int_{\theta^\perp} g(s, \theta, b) e^{-i\langle \beta, b \rangle} e^{-i\sigma s} db ds. \quad (\text{A.17})$$

□

Aufgrund der isometrischen Isomorphie von Hyperebenen $\mathcal{H}_m$ zu $\mathbb{R}^m$ lassen sich sämtliche Aussagen aus Satz A.2 auf die Fourier-Transformation $\mathcal{F}_m$ übertragen, indem man $\mathbb{R}^d$ durch $\mathcal{H}_m$ und d durch m ersetzt.

A.2.2 Faltungen

Wie zuvor bei der Fourier-Transformation wird die Faltung zunächst auf $\mathbb{R}^d$ eingeführt und ihre Eigenschaften untersucht, bevor die entsprechenden Operationen auf Hyperebenen eingeführt werden.

A.4 Definition

Die bilineare, kommutative und assoziative Operation „ $*$ “, definiert durch

$$f * h(x) = \int_{\mathbb{R}^d} f(y)h(x - y) dy, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad (\text{A.18})$$

wird als *Faltung* bezeichnet. $\square$

Die folgenden fundamentalen Eigenschaften der Faltung kommen in dieser Arbeit an zahlreichen Stellen zum Einsatz.

A.5 Satz (Eigenschaften der Faltung [SW71, Theorem 2.6 / Kapitel 5])

Seien $p, q, r \in [1, \infty]$ mit $p^{-1} + q^{-1} = 1 + r^{-1}$. Seien weiterhin $f \in L^p(\mathbb{R}^d)$ und $h \in L^q(\mathbb{R}^d)$. Dann ist die Faltung $f * h$ ein Element von $L^r(\mathbb{R}^d)$, und es gilt die Young'sche Ungleichung für Faltungen

$$\|f * h\|_{L^r(\mathbb{R}^d)} \leq \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \|h\|_{L^q(\mathbb{R}^d)}. \quad (\text{A.19})$$

Sind speziell $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ und $h \in L^p(\mathbb{R}^d)$, $1 \leq p \leq 2$, so ist $f * h \in L^p(\mathbb{R}^d)$, und es gilt der Faltungssatz

$$(f * h)^\wedge(\xi) = (2\pi)^{d/2} \hat{f}(\xi) \hat{h}(\xi) \quad (\text{A.20})$$

für fast alle $\xi \in \mathbb{R}^d$.

Auch die Faltung lässt sich auf einer beliebigen Hyperebene in $\mathbb{R}^d$ definieren, indem diese als Definitionsgebiet der beteiligten Funktionen interpretiert wird und Integration sowie Punktauswertung auf der gleichen Hyperebene stattfinden. Im folgenden werden Faltungen auf den speziellen Hyperebenen aus Definition A.3 eingeführt, zu deren Kennzeichnung dieselben Subskripte verwendet werden.

A.6 Definition (Faltung auf Hyperebenen)

Die Faltung bzgl. der ersten Koordinatenrichtung ist gegeben durch

$$f *_s h(s, z) = \int_{\mathbb{R}} f(\sigma, z) h(s - \sigma, z) d\sigma, \quad s \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{A.21})$$

für Funktionen auf $\mathbb{R}^3$ bzw.

$$g *_s u(s, \theta, b) = \int_{\mathbb{R}} g(\sigma, \theta, b) u(s - \sigma, \theta, b) d\sigma, \quad s \in \mathbb{R}, \quad \theta \in \mathbb{S}_+^1, \quad b \in \theta^\perp \quad (\text{A.22})$$

für Funktionen auf $\mathcal{T}$. Entsprechend ist

$$f *_z h(s, z) = \int_{\mathbb{R}^2} f(s, \zeta) h(s, z - \zeta) d\zeta, \quad s \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{A.23})$$

die Faltung bzgl. der beiden letzten Komponenten. In der Hyperebene $\omega^\perp$ mit $\omega \in \mathcal{S}^2$ ist die Faltung erklärt durch

$$g *_v u(\omega, v) = \int_{\omega^\perp} g(\omega, \nu) u(\omega, v - \nu) d\nu, \quad v \in \omega^\perp. \quad (\text{A.24})$$

Schließlich definiert

$$g *_b u(s, \theta, b) = \int_{\theta^\perp} g(s, \theta, \beta) u(s, \theta, b - \beta) d\beta, \quad s \in \mathbb{R}, \quad \theta \in \mathcal{S}_+^1, \quad b \in \theta^\perp \quad (\text{A.25})$$

die Faltung auf der Hyperebene $\theta^\perp$. Wie zuvor in (A.17) bei der FT steht die Kurzschreibweise

$$g *_v u(s, \theta, b) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\theta^\perp} g(\sigma, \theta, \beta) u(s - \sigma, \theta, b - \beta) d\beta d\sigma \quad (\text{A.26})$$

für die Faltung auf $\omega^\perp$ mit der speziellen Wahl $\omega = (0, \theta)$. $\square$

Die Aussagen in Satz A.5 lassen sich analog zur FT auf Hyperebenen übertragen, indem man den entsprechenden Stellen $\mathbb{R}^d$ durch die Hyperebene und d durch ihre Dimension ersetzt.

A.2.3 Zwei Lemmata zur Röntgen-Transformation

Viele Aussagen im Zusammenhang mit der RT lassen sich für schnell fallende Funktionen leicht herleiten und durch einen stetigen Grenzübergang auf größere Funktionenklassen übertragen. Zur Betrachtung der RT als unbeschränkten Operator ist es wichtig, die Voraussetzungen solcher Aussagen möglichst schwach zu halten, d. h. möglichst große Funktionenklassen einzuschließen. Die folgenden Resultate sind daher in einer möglichst allgemeinen Form formuliert und aufgrund der oben eingeführten Notation für 2d und 3d getrennt dargestellt.

A.7 Lemma (Projektionssatz [Sol76])

Sei $\theta \in \mathcal{S}^1$ beliebig und $f \in L^1(\mathbb{R}^2)$. Dann gilt

$$\mathcal{F}_b \mathcal{P}_2 f(\theta, \beta) = (2\pi)^{1/2} \widehat{f}(\beta) \quad (\text{A.27})$$

für fast alle $\beta \in \theta^\perp$. Ist $\omega \in \mathcal{S}^2$ und $f \in L^1(\mathbb{R}^3)$, so folgt

$$\mathcal{F}_v \mathcal{P}_3 f(\omega, \nu) = (2\pi)^{1/2} \widehat{f}(\nu) \quad (\text{A.28})$$

für fast alle $\nu \in \omega^\perp$. Hierbei ist $\mathcal{P}_2$ die RT aus Definition 1.39 und $\mathcal{P}_3$ die analog definierte 3d-RT in (2.22).

Das folgende Lemma liefert eine nützliche Transformationsformel zwischen den Integralen über das Tangentialbündel $\mathcal{T}^2$ und über den dazu gehörigen Euklidischen Raum $\mathbb{R}^2$. Die allgemeine Fassung findet sich im zitierten Artikel.

A.8 Lemma ([Sol76, Lemma 2.1])

Sei g nichtnegativ und messbar auf $\mathbb{R}^2$. Dann gilt

$$\int_{S_+^1} \int_{\theta^\perp} |b| g(b) \, db \, d\theta = \int_{\mathbb{R}^2} g(x) \, dx.$$

Die gleiche Aussage folgt unmittelbar für $g \in L^1(\mathbb{R}^2)$.

A.2.4 Minkowski-Ungleichung für Integrale

Ein mächtiges Hilfsmittel aus der Integrationstheorie ist die *Minkowski-Ungleichung*, welche für allgemeine Maßräume formuliert werden kann. Sie stellt sich als sehr nützlich für die Abschätzung der Norm von Integraloperatoren heraus.

A.9 Satz (Minkowski-Ungleichung [HLP52, Theorem 202])

Seien (S_1, μ_1) und (S_2, μ_2) Maßräume und $\Phi : S_1 \times S_2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine messbare Funktion. Dann gilt für $1 \leq p \leq \infty$ die Ungleichung

$$\left[\int_{S_2} \left| \int_{S_1} \Phi(x, y) \, d\mu_1(x) \right|^p \, d\mu_2(y) \right]^{1/p} \leq \int_{S_1} \left[\int_{S_2} |\Phi(x, y)|^p \, d\mu_2(y) \right]^{1/p} \, d\mu_1(x),$$

wobei im Fall $p = \infty$ die auftretenden p -Normen durch ∞ -Normen ersetzt werden.

Anhang B

Ergänzungen zu Kapitel 2

B.1 Wellenoptik: Berechnung der PSF

Sei eine Wellenfunktion u_0 in der Linsenebene gegeben. Der Übersichtlichkeit halber wird die Abhängigkeit vom Richtungsargument ω nicht explizit angeschrieben. Die Hilfsfunktion j sei definiert durch

$$j(\beta; v) = \exp\left(\frac{i\beta}{2} |v|^2\right), \quad \beta \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.1})$$

Man zeigt leicht, dass folgende Eigenschaften gelten:

$$|j| \equiv 1, \quad (\text{B.2})$$

$$j(\beta_1; \cdot) \cdot j(\beta_2; \cdot) = j(\beta_1 + \beta_2; \cdot), \quad (\text{B.3})$$

$$j(\beta; \alpha \cdot) = j(\alpha^2 \beta; \cdot), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad (\text{B.4})$$

$$j(\beta; v - t) = j(\beta; v) j(\beta; t) e^{-i\beta \langle v, t \rangle}. \quad (\text{B.5})$$

Der Fresnel-Propagator (2.11) lässt sich unter Verwendung von Eigenschaft (B.5) umschreiben zu

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\lambda u(v) &= \frac{1}{2\pi i} \frac{\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} \int_{\omega^\perp} u(t) j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v - t\right) dt \\ &= -\frac{i\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \frac{1}{2\pi} \int_{\omega^\perp} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; t\right) u(t) e^{-i\frac{\kappa}{\lambda} \langle v, t \rangle} dt \\ &= -\frac{i\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \mathcal{F}_v\left(j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \cdot\right) u\right)\left(\frac{\kappa}{\lambda} v\right). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Die ersten beiden Schritte in Abschnitt 2.2 werden zusammengefasst zur Multiplikation mit der Linsenfunktion und anschließender Beugung. So erhält man die Welle

$$u_2 = \mathcal{B}_{\lambda_B} \left(\overline{j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \cdot\right)} u_0 \right)$$

in der Blendenebene. Aufgrund der Darstellung (B.6) ergibt sich mit Eigenschaft (B.2)

$$\begin{aligned} u_2(v) &= -\frac{i\kappa}{\lambda_B} e^{i\kappa\lambda_B} j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; v\right) \mathcal{F}_v\left(j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \cdot\right) \overline{j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \cdot\right)} u_0\right)\left(\frac{\kappa}{\lambda_B} v\right) \\ &= -\frac{i\kappa}{\lambda_B} e^{i\kappa\lambda_B} j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; v\right) \mathcal{F}_v u_0\left(\frac{\kappa}{\lambda_B} v\right). \end{aligned}$$

Die beiden restlichen Schritte lassen sich zusammenfassen zur Multiplikation mit der charakteristischen Funktion der Blende und erneuter Beugung, woraus sich

$$u = \mathcal{B}_\lambda(\chi_{[0,r_B]}(|\cdot|) u_2), \quad \lambda = \lambda_D - \lambda_B$$

für die Welle in der Detektorebene ergibt. Obige Gleichung lässt sich umformen zu

$$\begin{aligned} u(v) &= \mathcal{B}_\lambda(\chi_{[0,r_B]}(|\cdot|) u_2)(v) \\ &= -\frac{i\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \mathcal{F}_v\left(j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \cdot\right) \chi_{[0,r_B]}(|\cdot|) u_2\right)\left(\frac{\kappa}{\lambda} v\right) \\ &= -\frac{i\kappa}{\lambda} e^{i\kappa\lambda} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \frac{1}{2\pi} \int_{\omega^\perp} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \nu\right) \chi_{[0,r_B]}(|\nu|) u_2(\nu) e^{-i\frac{\kappa}{\lambda}\langle v, \nu \rangle} d\nu. \end{aligned}$$

Setzt man die Darstellung von u_2 ein und beachtet $\lambda_B + \lambda = \lambda_D$, so erhält man

$$\begin{aligned} u(v) &= -\frac{\kappa^2}{\lambda_B \lambda} e^{i\kappa\lambda_D} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \frac{1}{2\pi} \int_{\omega^\perp} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \nu\right) \chi_{[0,r_B]}(|\nu|) j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \nu\right) \\ &\quad \cdot \mathcal{F}_v u_0\left(\frac{\kappa}{\lambda_B} \nu\right) e^{-i\frac{\kappa}{\lambda}\langle v, \nu \rangle} d\nu. \end{aligned}$$

Daraus folgt mit der Substitution $\zeta = (\kappa/\lambda_B) \nu$, $d\zeta = (\kappa/\lambda_B)^2 d\nu$ und der Schreibweise

$$\chi_{r_B} = \chi_{[0,\kappa r_B/\lambda_B]} \tag{B.7}$$

die Umformung

$$\begin{aligned} u(v) &= -\frac{\lambda_B}{\lambda} e^{i\kappa\lambda_D} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \frac{1}{2\pi} \int_{\omega^\perp} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \frac{\lambda_B}{\kappa} \zeta\right) j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \frac{\lambda_B}{\kappa} \zeta\right) \chi_{r_B}(|\zeta|) \\ &\quad \cdot \mathcal{F}_v u_0(\zeta) e^{-i\frac{\lambda_B}{\lambda}\langle v, \zeta \rangle} d\zeta. \end{aligned}$$

Um die ersten beiden Terme im Integral zu vereinfachen, wird zunächst die Multiplikationseigenschaft (B.3) angewandt, mit der sich aus $\lambda_B + \lambda = \lambda_D$ die Identität

$$j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \cdot\right) \cdot j\left(\frac{\kappa}{\lambda_B}; \cdot\right) = j\left(\frac{\kappa\lambda_D}{\lambda_B\lambda}; \cdot\right)$$

ergibt. Aus der Eigenschaft (B.4) und dem skalierten Argument der beiden j -Terme erhält man

$$j\left(\frac{\kappa\lambda_D}{\lambda_B\lambda}; \frac{\lambda_B}{\kappa} \cdot\right) = j\left(\frac{\lambda_D\lambda_B}{\kappa\lambda}; \cdot\right).$$

Zuletzt wird die Linsen-Abbildungsgleichung

$$\frac{1}{\lambda_B} = \frac{1}{\lambda_S} + \frac{1}{\lambda_D}$$

aus der geometrischen Optik eingesetzt, aus der sich die Vereinfachung

$$j\left(\frac{\lambda_D\lambda_B}{\kappa\lambda}; \cdot\right) = j\left(\frac{\lambda_S}{\kappa}; \cdot\right)$$

ergibt. Mit der Bezeichnung $m = \lambda_D/\lambda_S = \lambda/\lambda_B$, die als Vergrößerungsfaktor der Optik aufgefasst werden kann, reduziert sich schließlich die Darstellung der Welle u zu

$$\begin{aligned} u(v) &= -m^{-1} e^{i\kappa\lambda_D} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; v\right) \frac{1}{2\pi} \int_{\omega^\perp} j\left(\frac{\lambda_S}{\kappa}; \nu\right) \chi_{r_B}(|\nu|) \mathcal{F}_v u_0(\nu) e^{i\langle -m^{-1}v, \nu \rangle} d\nu \\ &= h(v) \int_{\omega^\perp} \mathcal{F}_v p_O(\nu) \mathcal{F}_v u_0(\nu) e^{i\langle -m^{-1}v, \nu \rangle} d\nu \\ &= h(v) p_O * u_0(-m^{-1}v) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} h &= -\frac{i}{2} m^{-1/2} e^{i\kappa(\lambda_S + \lambda_D)} j\left(\frac{\kappa}{\lambda}; \cdot\right), \\ \mathcal{F}_v p_O(\nu) &= -\frac{i}{\pi} m^{-1/2} e^{-i\kappa\lambda_S} \chi_{r_B}(|\nu|) j\left(\frac{\lambda_S}{\kappa}; \nu\right). \end{aligned}$$

Der hier hergeleitete Faltungskern p_O entspricht der PSF einer perfekten Optik, d. h. einer Optik ohne Abbildungsfehler, und stimmt mit (2.16) bis auf die beiden Zusatzfaktoren überein, die für die Berücksichtigung solcher Fehler benötigt werden. Zudem wird das hier noch auftretende Minuszeichen vor $m^{-1}v$ dort weggelassen, da es lediglich eine Spiegelung bewirkt, die in der Praxis nicht auftritt.

Die Verteilung der Konstanten auf h und p_O ist so gewählt, dass der später hergeleitete Zusammenhang zwischen Datenfunktion und Intensitätsverteilung die einfache Form $g = 1 - m^2 I$ annimmt.

B.2 Streufeld am Detektor: dilatationsfreie Darstellung

Das Streufeld am Detektor lässt sich gemäß (2.27) schreiben als

$$u_s(\omega, v) = h(v)(\tilde{p} *_v \mathcal{P}f)(\omega, m^{-1}v) \quad (\text{B.8})$$

mit der PSF $\tilde{p} = p_O *_v p_S$, die sich aufgrund der Gleichungen (2.24) und (2.16) im Frequenzraum darstellen lässt als

$$\mathcal{F}_v \tilde{p}(\omega, \nu) = \chi_{r_B}(|\nu|) \tilde{q}(|\nu|) e^{i\tilde{\alpha}(|\nu|)} \quad (\text{B.9})$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{q}(s) &= \frac{\kappa^2}{2\pi} m^{1/2} a(s)^{-1} e^{-z_e(s)}, \\ \tilde{\alpha}(s) &= \lambda_S \left(a(s) - \kappa + \frac{(s)^2}{2\kappa} \right) + z_p(s). \end{aligned}$$

Die isometrische 2d-Dilatation $\mathcal{D}_v^m g(\omega, v) = m^{-1} g(\omega, m^{-1}v)$ lässt sich gemäß

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_v^m(\tilde{p} *_v g)(\omega, v) &= m^{-1} \tilde{p} *_v g(\omega, m^{-1}v) \\
&= m^{-1} \int_{\omega^\perp} \tilde{p}(\omega, m^{-1}v - t) g(\omega, t) dt \\
&= m^{-1} \int_{\omega^\perp} m^{-2} \tilde{p}(\omega, m^{-1}v - m^{-1}t) g(\omega, m^{-1}t) dt \\
&= \int_{\omega^\perp} p(\omega, v - t) \mathcal{D}_v^m g(\omega, t) dt \\
&= p *_v \mathcal{D}_v^m g(\omega, v).
\end{aligned}$$

mit der Faltung vertauschen. Hierbei ist $p(\omega, v) = m^{-2} \tilde{p}(\omega, m^{-1}v)$ die skalierte PSF, welche im Frequenzraum durch (2.28) repräsentiert wird.

Auch für die Röntgen-Transformation gilt eine solche Vertauschungsrelation:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_v^m \mathcal{P}f(\omega, v) &= m^{-1} \mathcal{P}f(\omega, m^{-1}v) \\
&= m^{-1} \int_{\mathbb{R}} f(\lambda\omega + m^{-1}v) d\lambda \\
&= m^{-2} \int_{\mathbb{R}} f(m^{-1}(\lambda\omega + v)) d\lambda \\
&= m^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} f_m(\lambda\omega + v) d\lambda \\
&= m^{-1/2} \mathcal{P}f_m(\omega, v)
\end{aligned}$$

mit der dilatierten Funktion $f_m = m^{-3/2} f(m^{-1}\cdot)$.

Anhang C

Beweis von Satz 4.1

Analog zu Satz 3.6 und mit der Darstellung (4.5) der $\mathcal{L}$ -Rekonstruktionskerne gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned}\|P_j^{\mathcal{L},\gamma}\| &\leq (2\pi)^{3/2} \|\mathcal{F}_v \Lambda_b^{-1/2} \phi_j^{\mathcal{L},\gamma}\|_{L^\infty(\mathcal{T})} \\ &= 2\pi |\beta|^{1/2} (\sigma^2 + |\beta|^2) \widehat{\eta}_j^\gamma(\sigma, \beta)\end{aligned}\tag{C.1}$$

für die Norm der $\mathcal{L}$ -approximativen Inversen zu den Mollifiern $\delta_{x,j}^\gamma$, $j = 2, 3$.

B-Mollifier: Für die Fourier-Transformierte gilt

$$\widehat{\eta}_2^\gamma(\sigma, \beta) = (2\pi)^{-3/2} \chi_{[-1/\gamma, 1/\gamma]}(\sigma) \chi_{B_{1/\gamma}}(\beta),$$

und somit ist die rechte Seite in (C.1) gegeben durch

$$\begin{aligned}\sup_{(\sigma, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} (2\pi)^{-1/2} |\beta|^{1/2} (\sigma^2 + |\beta|^2) \chi_{[-1/\gamma, 1/\gamma]}(\sigma) \chi_{B_{1/\gamma}}(\beta) \\ = (2\pi)^{-1/2} 2\gamma^{-5/2}.\end{aligned}$$

G-Mollifier: In diesem Fall ist

$$\widehat{\eta}_3^\gamma(\sigma, \beta) = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\gamma^2(\sigma^2 + |\beta|^2)}{2}\right)$$

und folglich

$$\begin{aligned}\sup_{(\sigma, \theta, \beta) \in \mathcal{T}} (2\pi)^{-1/2} |\beta|^{1/2} (\sigma^2 + |\beta|^2) \exp\left(-\frac{\gamma^2(\sigma^2 + |\beta|^2)}{2}\right) \\ = \sup_{x, y \geq 0} f(x, y)\end{aligned}$$

mit

$$f(x, y) := (x^2 + y^2) \sqrt{y} \exp\left(-\frac{\gamma^2(x^2 + y^2)}{2}\right), \quad x, y \geq 0.$$

Eine elementare Rechnung zeigt, dass die Hilfsfunktion f neben dem Ursprung, der keine Maximumstelle sein kann, einen kritischen Punkt bei $\bar{x} = 0, \bar{y} = \sqrt{5/2} \gamma^{-1}$ besitzt. Die Hesse-Matrix an diesem Punkt ist gegeben durch das Vielfache

$$H(\bar{x}, \bar{y}) = \left(-\frac{5}{(2e)^5 \gamma^2}\right)^{1/4} \cdot \mathcal{I}_2$$

der Einheitsmatrix, was sich ebenfalls durch eine einfache Rechnung ergibt. Diese Matrix ist offenbar negativ definit, so dass der kritische Punkt $(\bar{x}, \bar{y})$ eine lokale Maximumstelle ist. Da f für $x \rightarrow \infty$ oder $y \rightarrow \infty$ und für $y = 0$ verschwindet, ist $(\bar{x}, \bar{y})$ die globale Maximumstelle von f . Der entsprechende Funktionswert ist gegeben durch

$$f(\bar{x}, \bar{y}) = \left(\frac{5}{2e}\right)^{1/4} \gamma^{-5/2}.$$

Es folgt insgesamt die Normabschätzung

$$\|P_j^{\mathcal{L}, \gamma}\| \leq c_j \gamma^{-5/2}$$

mit passenden Konstanten c_j . Somit ist die Bedingung

$$\|P_j^{\mathcal{L}, \gamma(\delta)}\| = o(\delta^{-1})$$

erfüllt, wenn $q < 2/5$ gilt. □

Literaturverzeichnis

- [Alb05] ALBER, Y. I.: James orthogonality and orthogonal decompositions of Banach spaces. In: *Journal of mathematical analysis and applications* 312 (2005), Nr. 1, S. 330–342
- [AS72] ABRAMOWITZ, M. ; STEGUN, I. A.: *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. ninth Dover printing, tenth GPO printing. Dover, 1972
- [BO04] BURGER, M. ; OSHER, S.: Convergence rates of convex variational regularization. In: *Inverse problems* 20 (2004), S. 1411–21
- [BW99] BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics*. 7th (expanded). Cambridge University Press, 1999
- [Can86] CANNY, J.: A computational approach to edge detection. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 8 (1986), Nr. 6, S. 679–698
- [CK93] COLTON, D. ; KRESS, R.: *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Second. Springer, 1993
- [Col03] COLTON, D.: Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. In: *Inverse Problems* 19 (2003), Nr. 47, S. 67–110
- [Dev82] DEVANEY, A. J.: A filtered backpropagation algorithm for diffraction tomography. In: *Ultrasonic Imaging* 4 (1982), Nr. 4, S. 336–350
- [Die99] DIETZ, R.: *Die Approximative Inverse als Rekonstruktionsmethode in der Röntgen-Computertomographie*, Universität des Saarlandes, Diss., 1999
- [EHN96] ENGL, H. W. ; HANKE, M. ; NEUBAUER, A.: *Regularization of inverse problems*. Springer, 1996
- [Fen96] FENANDER, A.: Modal synthesis when modeling damping by use of fractional derivatives. In: *AIAA journal* 34 (1996), Nr. 5, S. 1051–1058
- [FÖ08] FANELLI, D. ; ÖKTEM, O.: Electron tomography: a short overview with an emphasis on the absorption potential model for the forward problem. In: *Inverse Problems* 24 (2008), Nr. 1, S. 013001

- [GKW11] GROH, A. ; KREBS, J. ; WAGNER, M.: Efficient solution of an inverse problem in cell population dynamics. In: *Inverse Problems* 27 (2011), S. 065009
- [Goo05] GOODMAN, J. W.: *Introduction to Fourier optics*. 3rd. Roberts & Company, 2005
- [Had23] HADAMARD, J.: *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations*. Bd. 37. Yale University Press, 1923
- [Her80] HERMAN, G. T.: Image reconstruction from projections. The fundamentals of computerized tomography. (1980)
- [HK94] HAWKES, P. W. ; KASPER, E.: *Principles of electron optics. Volume 3: Wave Optics*. Academic Press, 1994
- [HKPS07] HOFMANN, B. ; KALTENBACHER, B. ; POESCHL, C. ; SCHERZER, O.: A convergence rates result for Tikhonov regularization in Banach spaces with non-smooth operators. In: *Inverse Problems* 23 (2007), S. 987–1010
- [HL12] HAHN, B. ; LOUIS, A. K.: Reconstruction in the three-dimensional parallel scanning geometry with application in synchrotron-based x-ray tomography. In: *Inverse Problems* 28 (2012), S. 045013
- [HLP52] HARDY, G. H. ; LITTLEWOOD, J. E. ; PÓLYA, G.: *Inequalities*. Cambridge University Press, 1952
- [HM80] HILDRETH, E. ; MARR, D.: Theory of edge detection. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series B. Biological Sciences* 207 (1980), Nr. 1167, S. 187–217
- [HMW09] HOFMANN, B. ; MATHÉ, P. ; WEIZSÄCKER, H. von: Regularization in Hilbert space under unbounded operators and general source conditions. In: *Inverse Problems* 25 (2009), S. 115013
- [Hof99] HOFMANN, B.: *Mathematik inverser Probleme*. BG Teubner, 1999
- [Jon03] JONAS, P.: *Rekonstruktion von Phasenobjekten mit Hilfe holographischer Röntgentomographie*, Universität des Saarlandes, Diss., 2003
- [Kab11] KABALLO, W.: *Grundkurs Funktionalanalysis*. Springer, Berlin, 2011
- [KL11] KOHR, H. ; LOUIS, A. K.: Fast and high-quality reconstruction in electron tomography based on an enhanced linear forward model. In: *Inverse Problems* 27 (2011), S. 045008

- [KMM96] KREMER, J.R. ; MASTRONARDE, D.N. ; MCINTOSH, J.R.: Computer visualization of three-dimensional image data using IMOD. In: *Journal of Structural Biology* 116 (1996), Nr. 1, S. 71–76
- [KS01] KAK, A. ; SLANEY, M.: *Principles of computerized tomographic imaging*. SIAM, 2001
- [L⁺06] LAWRENCE, A. u. a.: Transform-based backprojection for volume reconstruction of large format electron microscope tilt series. In: *Journal of Structural Biology* 154 (2006), Nr. 2, S. 144–167
- [Lak10] LAKHAL, A.: A decoupling-based imaging method for inverse medium scattering for Maxwell’s equations. In: *Inverse Problems* 26 (2010), S. 015007
- [LCB⁺05] LANZAVECCHIA, S. ; CANTELE, F. ; BELLON, P. L. ; ZAMPIGHI, L. ; KREMAN, M. ; WRIGHT, E. ; ZAMPIGHI, G. A.: Conical tomography of freeze-fracture replicas: a method for the study of integral membrane proteins inserted in phospholipid bilayers. In: *Journal of Structural Biology* 149 (2005), Nr. 1, S. 87–98
- [LM90] LOUIS, A. K. ; MAASS, P.: A mollifier method for linear operator equations of the first kind. In: *Inverse Problems* 6 (1990), S. 427–440
- [Lou80] LOUIS, A. K.: Picture reconstruction from projections in restricted range. In: *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 2 (1980), Nr. 2, S. 209–220
- [Lou86] LOUIS, A. K.: Incomplete data problems in X-ray computerized tomography. I. Singular value decomposition of the limited angle transform. In: *Numerische Mathematik* 48 (1986), Nr. 3, S. 251–262
- [Lou89] LOUIS, A. K.: *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. Teubner, 1989
- [Lou08] LOUIS, A. K.: Combining Image Reconstruction and Image Analysis with an Application to Two-Dimensional Tomography. In: *SIAM Journal on Imaging Sciences* 1 (2008), S. 188
- [Lou10] LOUIS, A. K.: Diffusion reconstruction from very noisy tomographic data. In: *Inverse Problems and Imaging* 4 (2010), S. 675–683
- [Lou11] LOUIS, A. K.: Feature reconstruction in inverse problems. In: *Inverse Problems* 27 (2011), S. 065010

- [LRSS11] LOUIS, A. K. ; RIPLINGER, M. ; SPIESS, M. ; SPODAREV, E.: Inversion algorithms for the spherical Radon and cosine transform. In: *Inverse Problems* 27 (2011), S. 035015
- [LT71] LINDENSTRAUSS, J. ; TZAFRIRI, L.: On the complemented subspaces problem. In: *Israel Journal of Mathematics* 9 (1971), Nr. 2, S. 263–269
- [Lut06] LUTHER, P. K.: Sample Shrinkage and Radiation Damage of Plastic Sections. In: FRANK, J. (Hrsg.): *Electron tomography : methods for three-dimensional visualization of structures in the cell*. Springer, 2006, S. 39–60
- [M⁺07] MEDALIA, O. u. a.: Organization of actin networks in intact filopodia. In: *Current Biology* 17 (2007), Nr. 1, S. 79–84
- [MDB09] MIDGLEY, P. A. ; DUNIN-BORKOWSKI, R. E.: Electron tomography and holography in materials science. In: *Nature Materials* 8 (2009), Nr. 4, S. 271–280
- [Nas87] NASHED, MZ: Inner, outer, and generalized inverses in Banach and Hilbert spaces. In: *Numerical functional analysis and optimization* 9 (1987), Nr. 3-4, S. 261–325
- [Nat86] NATTERER, F.: *The Mathematics of Computerized Tomography*. SIAM, 1986
- [Nat04] NATTERER, F.: An error bound for the Born approximation. In: *Inverse Problems* 20 (2004), S. 447–452
- [NW01] NATTERER, F. ; WÜBBELING, F.: *Mathematical methods in image reconstruction*. SIAM, 2001
- [QBC08] QUINTO, E. T. ; BAKHOS, T. ; CHUNG, S.: A local algorithm for Slant Hole SPECT. In: *Mathematical Methods in Biomedical Imaging and Intensity-Modulated Radiation Therapy (IMRT)* (2008), S. 321–348
- [Qui93] QUINTO, E. T.: Singularities of the X-Ray Transform and Limited Data Tomography in $\mathbb{R}^2$ and $\mathbb{R}^3$. In: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 24 (1993), S. 1215–1215
- [Rad06] RADERMACHER, M.: Weighted Back-projection Methods. In: FRANK, J. (Hrsg.): *Electron Tomography - Methods for Three-Dimensional Visualization of Structures in the Cell*. 2nd edition. Springer, 2006
- [Rie03] RIEDER, A.: *Keine Probleme mit Inversen Problemen*. Vieweg, 2003

- [Ros03] ROSEMAN, A. M.: Particle finding in electron micrographs using a fast local correlation algorithm. In: *Ultramicroscopy* 94 (2003), Nr. 3, S. 225–236
- [RR06] REGIŃSKA, T. ; REGIŃSKI, K.: Approximate solution of a Cauchy problem for the Helmholtz equation. In: *Inverse Problems* 22 (2006), S. 975
- [RT09] REGIŃSKA, T. ; TAUTENHAHN, U.: Conditional stability estimates and regularization with applications to Cauchy problems for the Helmholtz equation. In: *Numerical Functional Analysis and Optimization* 30 (2009), Nr. 9-10, S. 1065–1097
- [SDCC04] SORZANO, C. O. S. ; DE LA FRAGA, L. G. ; CLACKDOYLE, R. ; CARAZO, J. M.: Normalizing projection images: a study of image normalizing procedures for single particle three-dimensional electron microscopy. In: *Ultramicroscopy* 101 (2004), Nr. 2-4, S. 129–138. – ISSN 0304–3991
- [SKM93] SAMKO, S. G. ; KILBAS, A. A. ; MARICHEV, O. I.: *Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications*. CRC, 1993
- [Sol76] SOLMON, D. C.: The X-ray transform. In: *Journal of mathematical analysis and applications* 56 (1976), S. 61–83
- [SQ05] SCHUSTER, T. ; QUINTO, E. T.: On a regularization scheme for linear operators in distribution spaces with an application to the spherical Radon transform. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* (2005), S. 1369–1387
- [SS10] SCHUSTER, T. ; SCHÖPFER, F.: Solving linear operator equations in Banach spaces non-iteratively by the method of approximate inverse. In: *Inverse Problems* 26 (2010), S. 085006
- [SSW77] SMITH, K. T. ; SOLMON, D. C. ; WAGNER, S. L.: Practical and mathematical aspects of the problem of reconstructing objects from radiographs. In: *Bulletin of the American Mathematical Society* 83 (1977), Nr. 6, S. 1227–1270
- [SW71] STEIN, E. M. ; WEISS, G. L.: *Introduction to Fourier analysis on Euclidean spaces*. Princeton University Press, 1971
- [TG99] TAUTENHAHN, U. ; GORENFLO, R.: On optimal regularization methods for fractional differentiation. In: *Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen* 18 (1999), Nr. 2, S. 449–468

- [WT03] WINKLER, H. ; TAYLOR, K. A.: Focus gradient correction applied to tilt series image data used in electron tomography. In: *Journal of structural biology* 143 (2003), Nr. 1, S. 24–32
- [XDGS07] XU, P. ; DONALDSON, L. A. ; GERGELY, Z. R. ; STAEHELIN, L. A.: Dual-axis electron tomography: a new approach for investigating the spatial organization of wood cellulose microfibrils. In: *Wood science and technology* 41 (2007), Nr. 2, S. 101–116
- [Yos95] YOSIDA, K.: *Functional analysis. Reprint of the sixth (1980) edition. Classics in Mathematics.* Springer, 1995
- [ZPSF97] ZHU, J. ; PENCZEK, P. ; SCHRODER, R. ; FRANK, J.: Three-dimensional reconstruction with contrast transfer function correction from energy-filtered cryoelectron micrographs: procedure and application to the 70S *Escherichia coli* ribosome. In: *Journal of structural biology* 118 (1997), Nr. 3, S. 197–219. – ISSN 1047–8477