Rekonstruktion von Phasenobjekten mit Hilfe holographischer Röntgentomographie

Dissertation

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

von

Peter Jonas

Saarbrücken
2003

Tag des Kolloquiums:	27. Juni 2003
Dekan:	Univ.-Prof. Dr. P. Slusallek
Berichterstatter:	Univ.-Prof. Dr. A. K. Louis
	Univ.-Prof. Dr. P Maaß

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
$\mathbb{R}^+$	Menge der positiven reellen Zahlen
$\mathbb{C}$	Menge der komplexen Zahlen
$\langle .,. \rangle_X$	Skalarprodukt im Raum X
$\|.\|_X$	Norm im Raum X
$\mathrm{supp}\{f\}$	Träger von f
$\alpha^\perp$	Orthogonalraum zu α
k	Wellenzahl der einfallenden Welle
u_i	einfallendes Feld
u_s	gestreutes Feld
I	Intensität
$f * g$	Faltung von f und g
J_n	Besselfunktion zum Index n
$H_n^{(1)}$	Hankelfunktion erster Art zum Index n
j_n	sphärische Besselfunktion zum Index n
$h_n^{(1)}$	sphärische Hankelfunktion erster Art zum Index n
Y_m^l	Kugelflächenfunktion
$R(A)$	Bild von A
A^*	adjungierter Operator zu A
$A^\dagger$	verallgemeinerte Inverse von A
P_z	Propagationsoperator zum Abstand z
$\mathcal{P}$	Röntgentransformation
$\hat{f}$, $\mathcal{F}f$	Fourier-Transformierte von f
$\tilde{S}_1$	Menge der Einfallsrichtungen
$B_\rho(a)$	Kugel um a mit Radius ρ
Π_n	Polynom homogen vom Grad n
$L_1(\Omega)$	Raum der betragintegrierbaren Funktionen über Ω
$L_2(\Omega)$	Raum der quadratintegrierbaren Funktionen über Ω
H^K	Produktraum der Form $H^K = \underbrace{L_2 \times ... \times L_2}_{K-mal}$
e_γ	Mollifier
Ψ_γ	Rekonstruktionskern
$C(\Omega)$	Raum der stetigen Funktionen auf Ω
$C^\lambda(\Omega)$	Raum der λ-mal stetig differenzierbaren Funktionen auf Ω
$C^\infty(\Omega)$	Raum der beliebig oft differenzierbaren Funktionen auf Ω
δ_x	Dirac'sche Delta-Distribution im Punkt x
$\chi_{[a,b]}$	charakteristische Funktion des Intervalls $[a,b]$
$[x]$	Ganzzahliger Anteil von x (Gauß-Klammer)
$\mathrm{sinc}\ x$	Sinc-Funktion
$\square$	Ende des Beweises

Einleitung

In vielen Anwendungsbereichen möchte man eine Probe auf eventuelle Unregelmäßigkeiten hin untersuchen. Hierbei ist man bestrebt, Methoden einzusetzen, die die Probe möglichst nicht beschädigen. Im medizinischen Bereich spricht man von 'nicht invasiven Untersuchungen', in der Materialwissenschaft von 'zerstörungsfreiem Prüfen'. Um solche Messungen durchführen zu können, ist man auf einen Informationsträger angewiesen, der indirekt Aufschluss über die interessierenden Größen gibt.

Als Informationsträger eignen sich unter anderem Ultraschall, Licht, Röntgenstrahlung oder auch anders geartete elektromagnetische Strahlung. Abhängig von dem physikalisch interessierenden Parameter, der Auflösung oder der Größe des zu untersuchenden Objektes hat jeder dieser Informationsträger sein spezielles Anwendungsfeld.
Ganz allgemein findet eine Interaktion des Informationsträgers mit dem Objekt durch Absorption, Änderung der Richtung, Variation der Polarisation oder Phase statt. Hierbei ist die Interaktion basierend auf Absorption nicht ideal, da eine gewisse Dosis verabreicht wird. Zudem ist der Kontrast, der durch Absorption hervorgerufen wird, oft sehr gering, z.B. liegt er bei der Detektion von Löchern mit einem Durchmesser von 20μm in Aluminium bei einer Röntgenenergie von 25kV bei nur 1% (siehe [14]). Auf der anderen Seite liegen die physikalischen Parameter der Phasenmodulation häufig, wie im Beispiel des Aluminiums, bis zu 1000-mal höher als bei der Absorption. Daher erzeugt eine Messung, die die Phasenmodulation feststellen kann, mitunter einen deutlich besseren Kontrast.

Die Vorteile einer phasensensitiven Messung liegen somit auf der Hand. Es können hiermit auch Materialien untersucht werden, die kaum Strahlung absorbieren. Desweiteren kann die Energie der einfallenden Strahlung in solche Bereiche verschoben werden, dass die Probe nur noch wenig absorbiert. Dies verringert die verabreichte Dosis und somit die Schädigung der Probe. Dadurch, dass bei dem Übergang zweier Materialkomponenten fast immer ein Phasensprung vorliegt, entsteht ein viel besserer Kontrast, was wiederum zur Verringerung der Dosis genutzt werden kann.

Eine Veränderung der Phasenlage der Welle drückt sich durch Interferenz aus. Indem z.B. der Abstand eines Detektors zur Probe verändert wird, entstehen verschiedene Intensitätsmuster. Es werden deshalb bei der *holographischen Methode* mehrere Messungen zu unterschiedlichen Abständen durchgeführt und hieraus die Objektfunktion bestimmt.
Um diese Interferenzen sichtbar zu machen, ist eine hohe räumliche Kohärenz nötig, wie sie z.B. bei Synchrotronanlagen realisiert ist. Aber auch eine laborfähige Version in Form von Mikrofocusröhren ist in der Entwicklung so weit fortge-

schritten, dass in naher Zukunft hiermit phasensensitive Messungen durchgeführt werden können. Die Messgeometrie unterscheidet sich allerdings von der am Synchrotron.

Da es sich bei der Phasenkontrasttomographie um eine Erweiterung der Absorptionstomographie handelt, ist auch sie 'schlecht gestellt'. Das bedeutet, ohne eine geeignete Regularisierung können keine stabilen Rekonstruktionen bestimmt werden.
Die bisherige Modellierung fußt auf einer anschaulichen Interpretation. Das Gesamtproblem wird in zwei Teilprobleme zerlegt, wobei diese Teile auf Theorien beruhen, die aus der Elektronenmikroskopie und Absorptionstomographie bekannt sind. Eine Herleitung aus physikalischen Grundgleichungen wurde bei der Modellierung bisher außer Acht gelassen.

Ziel dieser Arbeit ist es, eine konsequente Herleitung der bisherigen Modellierung aus physikalischen Grundgleichungen anzugeben und hierauf aufbauend weitere Modelle zu betrachten. Mit Hilfe dieser Herleitung lassen sich Fehlerschranken bestimmen, so dass der Gültigkeitsbereich der Modelle angegeben werden kann. Desweiteren kann eine Aussage darüber getroffen werden, wie viele und in welchen Entfernungen Messungen durchgeführt werden sollten.
Mit neueren Methoden aus dem Bereich der Tomographie wie z.B. der Approximativen Inversen oder der schnellen Rückprojektion lassen sich Verfahren entwickeln, die weniger datenfehleranfällig und mehr als doppelt so schnell sind wie die bisher gebräuchlichen.
Außerdem wird die Messgeometrie an Mikrofocusröhren analysiert und auch für diesen Fall werden Verfahren zur Rekonstruktion abgeleitet.

Im ersten Kapitel werden die drei gebräuchlichsten Messgeometrien beschrieben, die bei der Phasenkontrasttomographie zur Anwendung kommen. Hierbei spielt die sogenannte *holographische Methode* die wichtigste Rolle, da sie für die messtechnische Umsetzung am einfachsten zu realisieren ist.

Der Schwerpunkt des zweiten Kapitels liegt auf dem *Fresnel'schen Beugungsintegral*. Dieses spezielle Integral ist die Grundlage aller bisher entwickelten Rekonstruktionsalgorithmen und wird daher in diesem Kapitel eingehend analysiert. Zudem wird ein spezielles Problem, das auf dem Fresnel'schen Beugungsintegral basiert und in optischen Anwendungen auftritt, diskutiert. Hierfür werden zwei Rekonstruktionsverfahren abgeleitet und in numerischen Beispielen getestet.

Das dritte Kapitel beschäftigt sich sehr detailliert mit der holographischen Messmethode. Durch eine konsequente Herleitung des bisher verwendeten mathematischen Modells aus der Wellengleichung ergeben sich eine Reihe von weiteren Modellen, die die Wirklichkeit mehr oder weniger gut widerspiegeln. Für diese

Modelle werden sowohl Fehlerschranken in Bezug auf ihre Approximationsgüte als auch Rekonstruktionsverfahren abgeleitet. Numerische Tests an synthetischen und realen Daten geben Aufschluss über die Qualtität der Rekonstruktionen, die Rechenzeit und das Verhalten bei Datenfehlern.

Die Modellierung bezüglich Kugelwellen ist Thema des vierten Kapitels. Da die Annahme von ebenen Wellen nur an speziellen Messanlagen wie z.B. dem Synchrotron gerechtfertigt ist, muss für laborfähige Systeme, wie sie wahrscheinlich in Form von sogenannten Mikrofocusröhren bald eingesetzt werden, das Modell auf Kugelwellen erweitert werden. Eine Analyse mitsamt numerischen Tests zeigt, dass dies möglich ist.

Schließlich folgt im fünften Kapitel eine kurze Zusammenfassung aller wichtigen Resultate und ein Ausblick auf Fragestellungen, die sich an diese Arbeit anschließen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dr. A. K. Louis, der mir ein Arbeitsgebiet eröffnete, das mir großen Spaß bereitete. Außer, dass er immer wieder wertvolle Impulse für meine Arbeit setzte, ermöglichte er mir auch, an verschiedenen Tagungen teilzunehmen, so dass ich viele renomierte Autoren aus dem Gebiet der Numerik persönlich kennen lernen konnte.
Desweiteren danke ich auch meinen Kollegen aus der Arbeitsgruppe, vor allem Herrn Dipl.-Math. Volker Gebhard. Die Diskussionen mit ihm führten oft zu sehr nützlichen Ansätzen.
Für die Bereitstellung des Datenmaterials vom ESRF danke ich Herrn Lukas Helfen.
Schließlich danke ich meinen Eltern sowie meiner lieben Annette für ihre Geduld und ihren Zuspruch.

Kapitel 1

Bisherige Modelle und Verfahren

Seit rund hundert Jahren wird die konventionelle Radiographie in der Medizin und bei der zerstörungsfreien Prüfung eingesetzt. In vielen Bereichen ist sie als Diagnose- und Analyseverfahren nicht mehr wegzudenken.
Die traditionelle Radiographie basiert auf der Eigenschaft, dass unterschiedliche Komponenten eines Objektes Röntgenstrahlung verschieden stark absorbieren. Der Kontrast eines Details hängt zum einen von der Detailgröße und zum anderen von dem Unterschied des Absorptionsverhaltens der Details und des Umfelds ab. Das bedeutet, je größer das Detail bzw. der Unterschied im Absorptionsverhalten, desto besser erscheint das Detail in der Rekonstruktion.
Guter Kontrast wird z.B. im medizinischen Bereich bei der Visualisierung von Knochen erreicht. Anders hingegen sieht es bei der Diagnose von Weichteilen aus. Hier ist der Unterschied im Absorptionsvermögen im Vergleich zu dem umgebenden Gewebe oft zu gering, um noch in verwertbare Informationen umgesetzt zu werden. Bei der Visualisierung von Gefäßen behilft man sich durch die Verwendung von Kontrastmitteln, die in die Gefäße eingebracht werden. Allerdings bedeutet dies natürlich einen viel höheren Aufwand. Außerdem hat diese Methode den Nachteil, dass die Informationen stark verrauscht sind.

Die phasenempfindliche Radiographie beruht darauf, dass außer der Amplitude, was der klassischen Radiographie entspricht, auch die Phase der einfallenden Welle moduliert wird. Dies hat zur Folge, dass Anteile des einfallenden Wellenfeldes unter kleinstem Winkel aus der Ausbreitungsrichtung der Strahlung weggebeugt werden. Um diese Beugungseffekte sichtbar zu machen, ist aber eine hohe räumliche Kohärenz nötig, die zur Zeit nur an speziellen Messanlagen wie der Synchrotronanlage in Grenoble verwirklicht ist. Allerdings ist die Entwicklung von Mikrofocusröhren, die auch sehr gute Kohärenzeigenschaften besitzen, so weit fortgeschritten, dass phasenempfindliche Untersuchungen in naher Zukunft auch in kleineren Laboren durchgeführt werden können.
Dadurch, dass bei der phasenempfindlichen Radiographie außer der Absorption auch die Phaseninformation zugänglich ist, ergeben sich zum Teil ganz neue An-

wendungsgebiete. Materialien wie Schäume, Fasern, Komposite und andere kaum absorbierende Stoffe sind so detektierbar, siehe [11, 15, 35]. Da bei dem Übergang von zwei Medien fast immer ein Phasensprung vorliegt, enthalten die Rekonstruktionen einen sehr guten Kontrast. Vor allem bei biologischen Objekten, die nur ein schwaches Absorptionsvermögen im Vergleich zur Umgebung besitzen, wie z.B. bei der Untersuchung von Weichteilen ist dies ein großer Vorteil. Somit sind bei der Rekonstruktion von Gefäßen keine Kontrastmittel mehr nötig. Auch in der Mammographie werden bessere und für den Menschen verträglichere Untersuchungsmethoden mit Hilfe von phasenempfindlicher Radiographie entwickelt, siehe [28].
Aufgrund des guten Kontrastes ist es auch möglich, die Strahlendosis zu senken, Faktoren von 10 bis 100 sind je nach Anwendungsgebiet realisierbar. Außerdem wird bei der Modulation der Phase keine Energie im Objekt umgesetzt, das bedeutet, dass bei medizinischen Untersuchungen die Schädigung des Gewebes weitaus geringer ausfällt.

Alle bisherigen Ansätze zur phasenempfindlichen Tomographie lassen sich auf Grund ihrer verschiedenen experimentellen Messanordnungen in drei Gebiete unterteilen. Dies sind: Interferometrische Techniken, Schlieren-Technik und holographische Methode.
Hierbei spielt die holographische Methode, auf Grund ihrer sehr einfachen experimentellen Realisierbarkeit, die wichtigste Rolle. Fast alle bisher entwickelten Rekonstruktionsverfahren beruhen auf dieser Messmethode. Auch in dieser Arbeit werden wir uns auf diesen Ansatz konzentrieren, wobei aber ein Teil der Ergebnisse aus dem zweiten Kapitel auch auf die beiden anderen Messanordnungen anwendbar ist.
In den nachfolgenden Abschnitten werden nun die verschiedenen Messgeometrien näher beschrieben.

1.1 Interferometrische Techniken

Der einfallende Röntgenstrahl wird in zwei Teilstrahlen zerlegt. Einer der beiden Strahlen wird durch das Objekt geleitet, der andere dient als Referenzstrahl und wird am Objekt vorbeigeführt. Hinter dem Objekt werden nun beide Strahlen wieder vereinigt, und es ergibt sich ein Interferenzbild. Die Gestalt dieses Bildes hängt von der Phasenverschiebung der beiden Strahlen ab [8].
Um systematische Fehler, die sich aus den experimentellen Apparaten ergeben, zu kompensieren, wird ein Phasenschieber in die Anordnung eingefügt. Dieser Phasenschieber kann durch Rotation in seiner effektiven Dicke variiert werden und verursacht dadurch eine zusätzliche, variable Phasenverschiebung zwischen Referenzstrahl und Objektstrahl.

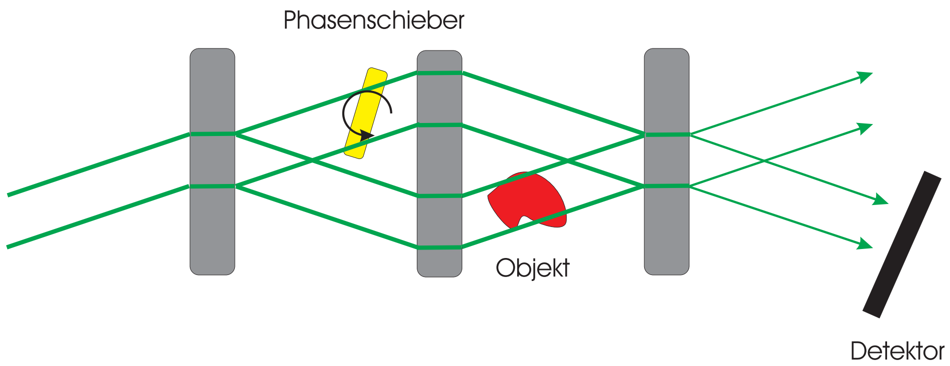

Abbildung 1.1: Anordnung bei Interferometrischer Messung

Die Rekonstruktion eines Phasenbildes gestaltet sich relativ einfach. Es werden eine Reihe von Bildern zu verschiedenen Phasenschüben aufgenommen. Aus diesen Bildern lässt sich dann unmittelbar das Phasenbild erzeugen. Durch die Variation der Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung lassen sich Phasenbilder zu verschiedenen Richtungen berechnen. Mit Hilfe von tomographischen Verfahren wie z.B. gefilterter Rückprojektion, ist eine 3D-Rekonstruktion möglich, siehe [37].
Die Anzahl der aufzunehmenden Bilder ist bei dieser Methode sehr hoch und außerdem wird eine hohe Intensität der einfallenden Strahlung benötigt, siehe [6]. Der experimentelle Aufbau ist äußerst aufwendig.

1.2 Schlieren-Technik

Die Schlieren-Technik geht auf ein Verfahren aus der klassischen Optik zurück [23].
Bei dieser Methode werden kleinste Winkelabweichungen des Strahls gemessen. Eine Änderung der Phase im Objekt lenkt den einfallenden Strahl lokal durch Brechung um einen kleinen Winkel ab. Ein einfacher Zusammenhang liefert die Formel

$$\Delta\alpha = -\frac{1}{k}\frac{\partial\varphi}{\partial x}.$$

Hier ist $\Delta\alpha$ der Ablenkwinkel, k die Wellenzahl und φ die Phasenfunktion des Objektes.
Um die Abweichungen von der Einfallsrichtung des Röntgenstrahls zu messen, wird das Objekt zwischen zwei Kristalle positioniert. Hierbei fungiert der erste Kristall als Kollimator der zweite als Analysator. Durch die Drehung des Analysators, der nur eine bestimmte Einfallsrichtung passieren lässt, können nun die Anteile zu den einzelnen Winkel abgetastet werden.
Obwohl der Messaufbau bei der Schlieren-Technik um einiges einfacher ist als bei

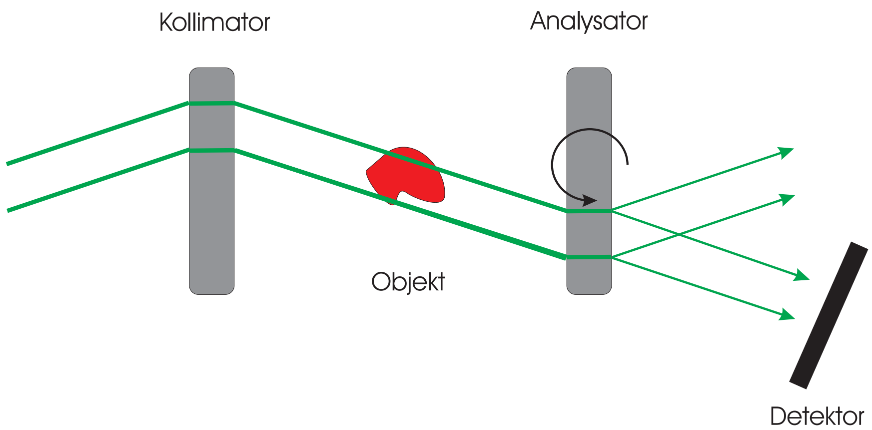

Abbildung 1.2: Messaufbau bei Schlieren-Technik

interferometrischen Methoden, ist er dennoch immer noch sehr aufwendig.
Probleme ergeben sich bei der Schlieren-Technik in der Interpretation der Bilder. Weil die Winkeländerungen des Röntgenstrahls in der Beugungsebene verschieden sind zu denen in der Ebene senkrecht dazu, ergeben sich in den Aufnahmen geometrische Verzerrungen, und die Bilder können hauptsächlich nur qualitativ ausgewertet werden [14]. Aus diesem Grund ist bisher mit dieser Methode noch keine Volumenrekonstruktion durchgeführt worden.
Die Bezeichnung Schlieren-Technik wird in der Literatur nicht einheitlich verwendet. Sie läuft auch unter den Namen: 'refraction contrast' [42], 'phase dispersive imaging' [27], 'phase contrast imaging' [17] und 'diffraction enhanced imaging' [16].

1.3 Holographische Methode

Der vielversprechenste Ansatz, im Hinblick auf industrielle Anwendung, ist die holographische Methode. Der Messaufbau ist hier bedeutend einfacher als bei den beiden vorigen Geometrien.
Das Objekt wird mit einer ebenen, monochromatischen, räumlich kohärenten Röntgenstrahlung beleuchtet. Da das Objekt eine Veränderung des Wellenfeldes verursacht, ergeben sich, je nach Abstand des Detektors vom Objekt, unterschiedliche Interferenzbilder. Aus den Interferenzbildern, die jeweils zu verschiedenen Abständen des Detektors und zu unterschiedlichen Einfallsrichtungen der Röntgenstrahlung aufgezeichnet werden, lässt sich das Objekt bestimmen.
Der instrumentelle Aufbau ist bei der holographischen Methode bis auf den größeren Objekt-Detektor-Abstand, es werden Abstände von 0.01m bis 1m verwendet, ähnlich der klassischen Röntgentomographie. Lediglich die einfallende Strahlung muss eine starke Kohärenzbedingung erfüllen.

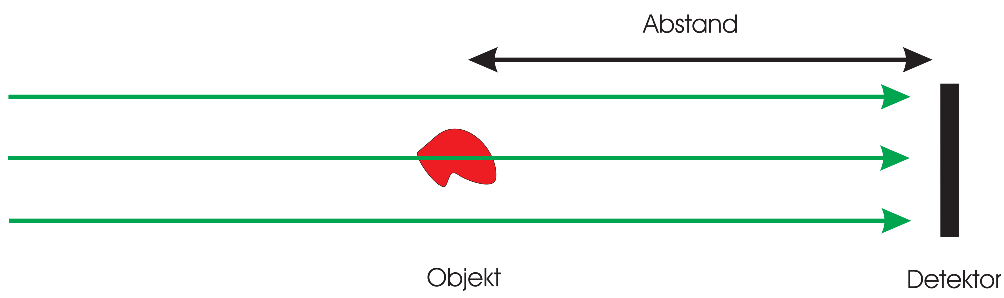

Abbildung 1.3: Messaufbau bei der holographischen Methode

Ein großer Vorteil dieser Methode ist, dass im Strahlengang weniger optische Geräte benötigt werden und somit auch weniger Störgrößen vorhanden sind. Die Qualität der Aufnahmen ist deshalb besser.

Während die Phaseninformation bei interferometrischen Methoden und bei der Schlieren-Technik unmittelbar zugänglich ist, muss bei der holographischen Methode ein größerer Aufwand betrieben werden. In der Literatur sind schon eine Reihe verschiedener Rekonstruktionsverfahren für diese Messgeometrie bekannt. Die bisherigen Verfahren lassen sich in vier verschiedene Ansätze unterteilen. Alle diese Ansätze verwenden ein vereinfachtes Vorwärtsmodell, das auf zwei Teilschritten basiert:
In einem ersten Schritt wird die Objektfunktion zunächst entlang der Ausbreitungsrichtung der einfallenden Welle in eine virtuelle Ebene projiziert, siehe Abbildung 1.4. Danach findet an dieser Ebene Streuung statt. Das Abbild auf dem

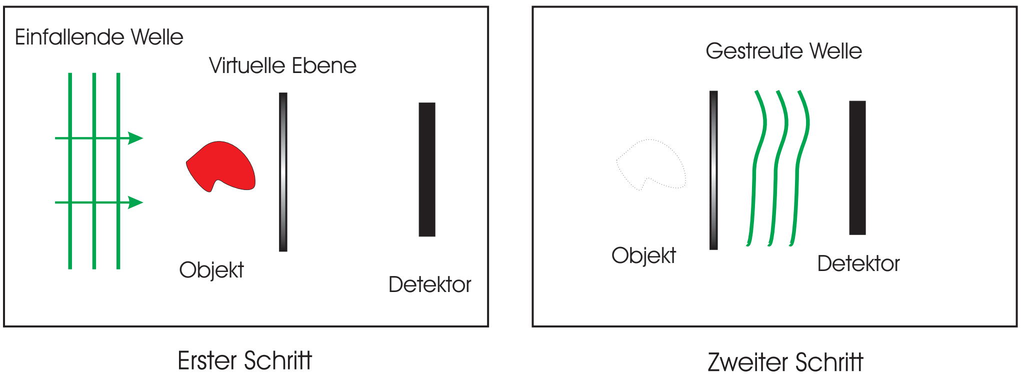

Abbildung 1.4: Vorwärtsmodell bei den bisherigen Verfahren

Detektor ist nun die Intensität der gestreuten und der einfallenden Strahlung. Somit gilt für die Intensität I der Zusammenhang

$$I = |u_i + u_s|^2,$$

wobei u_i das einfallende und u_s das gestreute Feld ist. Um das Modell zu linearisieren wird die Intensität durch

$$I \approx |u_i|^2 + u_i\overline{u_s} + \overline{u_i}u_s$$

genähert.

Die sogenannte Paraboloid-Methode von Cloetens et al [13, 14] zerlegt die Rekonstruktion entsprechend dem Vorwärtsmodell in zwei Schritte. Zunächst wird aus den Intensitätsmessungen einer einfallenden Richtung das Projektionsbild in der virtuellen Ebene bestimmt. Hierzu kommen Verfahren zum Einsatz, die sich in der Elektronenmikroskopie bewährt haben [5, 29]. Abschließend wird mit Hilfe mehrerer Einfallsrichtungen und gefilterter Rückprojektion die Objektfunktion ermittelt. Die Paraboloid-Methode wird im dritten Kapitel als Spezialfall eines anderen Verfahrens wieder auftreten.

Kohn [30] verwendet genau dieselbe Aufteilung wie Cloetens et al, benutzt aber zusätzlich eine Reihe weiterer Näherungen. Dadurch wird die Berechnung des virtuellen Projektionsbildes sehr vereinfacht. Allerdings ist dieses Verfahren auf Grund der vielen Näherungen nur auf einen kleinen Anwendungsbereich, im Besonderen auf kleine Objekte, beschränkt. Die räumliche Rekonstruktion geschieht auch hier mit gefilterter Rückprojektion.

Die Gruppe von Wilkins benutzt zur Rekonstruktion die 'transport of intensity equation' (TIE) [4, 22, 41]. Diese Gleichung stellt einen Zusammenhang zwischen der Änderung des Intensitätsprofils bei variierendem Detektorabstand und der Phaseninformation des Wellenfeldes her. Bezeichnen wir mit z den Abstand Objekt-Detektor und mit ϕ die Funktion der Phase, dann gilt

$$k\frac{\partial I}{\partial z}(x) = -\nabla(I\nabla\phi)(x).$$

Der ∇-Operator wirkt auf dem Detektor und die Koordinate x befindet sich auch in der Detektorebene. Die Inversion setzt sich wieder aus zwei Teilschritten zusammen. Im ersten Schritt wird mit der TIE das Phasenprofil in der virtuellen Projektionsebene berechnet und schließlich das Objekt mit gefilterter Rückprojektion bestimmt. Vor allem die Differentiation der Intensität I nach dem Abstand z gestaltet sich bei dieser Methode als numerisch problematisch. Da Phasenobjekte, ähnlich zum normalen Rauschen, starke Oszillationen in der Messung verursachen, ist die Differentiation nur schwer zu regularisieren. Das Verfahren ist deshalb sehr anfällig gegen Datenfehler, siehe [14].

Einen anderen Weg beschreitet Bronnikov [9, 10]. Mit Hilfe mehrerer Näherungen nutzt er einen Zusammenhang der 3D-Radontransformation der Objektfunktion mit der 2D-Radontransformation der Daten. Eine Unterteilung des Rekonstruktionsverfahrens in zwei Schritte ist nicht nötig. Der Algorithmus ist direkt als gefilterte Rückprojektion darstellbar. Auch hier ist das Anwendungsgebiet auf Grund der vielen Approximationen eingeschränkt. Bronnikov geht bei seinem

Verfahren davon aus, dass es sich bei dem untersuchten Objekt um ein reines Phasenobjekt handelt, es also keine Absorption aufweist. Um dennoch absorbierende Medien zu untersuchen, schlägt er eine Messung sehr nahe am Objekt vor, mit deren Hilfe das Absorptionsvermögen der Probe gemessen werden soll. Die Daten für die Rekonstruktion der Phase werden nun modifiziert und sein Verfahren ist anwendbar. Diese Herangehensweise ist allerdings für größere Objekte problematisch.

1.4 Wichtige Fragestellungen

Die bisherigen Resultate auf dem Gebiet der Phasenkontrasttomographie zeigen deutlich, dass phasensensitive Messungen nicht nur eine Ergänzung zur konventionellen Radiographie darstellen, sondern ganz neue Anwendungsbereiche erschließen.
Was die Messgeometrie betrifft, so zeichnete sich in den letzten 3 Jahren ein Trend in Richtung der holographischen Methode ab. Dies ist auf Grund der sehr einfachen Messanordnung verständlich. Interferometrische Methoden und die Schlieren-Technik werden für die räumliche Rekonstruktion eines Objektes wohl in Zukunft nur eine untergeordnete Rolle spielen.
Alle vorgestellten Rekonstruktionsverfahren zur holographischen Messmethode verwenden das vereinfachte Vorwärtsmodell. Bisher ist noch nicht geklärt, wie gut das einfache Modell die Wirklichkeit widerspiegelt und wie groß die zu erwartenden Fehler sind.
Weiter wäre es wichtig zu wissen, wie viele Abstandsmessungen durchgeführt werden müssen, damit die Objektfunktion eindeutig bestimmt ist. Außerdem sind die Verfahren in Bezug auf Schnelligkeit und ihre Regularisierungseigenschaften, also Verhaltens bei Datenfehlern, noch nicht optimiert.
Nichtlineare Algorithmen, die auch den quadratischen Anteil der gestreuten Welle in der Intensität berücksichtigen, gibt es fast keine. Zwar beschreibt Cloetens in [14] ein eingefrorenes Newton-Verfahren, doch Tests mit realen und künstlichen Daten lieferten bisher keine überzeugenden Ergebnisse.
Schließlich soll Phasenkontrasttomographie mit Hilfe von Mikrofocusröhren auch in normalen Laboratorien angewendet werden. In diesem Fall ist die Annahme einer einfallenden ebenen Welle aber nicht mehr zutreffend, und stattdessen müssen zur Modellierung Kugelwellen verwendet werden.
Allen diesen noch offenen Fragestellungen werden wir in den folgenden Kapiteln nachgehen.

Kapitel 2

Rekonstruktion von Phasengittern

Alle Messmethoden, die im ersten Kapitel vorgestellt worden sind, verwenden bei der Modellierung des gestreuten Feldes das sogenannte Fresnel'sche-Beugungsintegral. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns deshalb eingehend mit diesem Integraloperator. Allerdings beschränken wir uns zunächst nur auf einen einfachen Fall. Im dritten Kapitel, in dem wir uns der Rekonstruktion von räumlichen Objekten zuwenden, werden wir das Modell entsprechend erweitern.
Im Speziellen analysieren wir in diesem Kapitel das Rekonstruktionsproblem eines Phasengitters. Unter einem Phasengitter verstehen wir ein Objekt, dessen Träger in einer Hyperebene liegt. Es stellt sich heraus, dass der Nachweis der Eindeutigkeit in diesem Fall schwierig ist. Nur mit starken Voraussetzungen ist es möglich, die Injektivität des Operators zu zeigen.
Außerdem wird ein Gauß-Newton Verfahren zur Rekonstruktion eines Phasengitters vorgestellt.

2.1 Das Fresnel'sche-Beugungsintegral

Bei der Untersuchung von kleinen Objekten wurde bereits von Th. Young (1773-1829) und A. J. Fresnel (1788-1827) festgestellt, dass sich die Intensitäten zweier Lichtquellen nicht, wie in der klassischen Optik angenommen, als Summe der beiden Einzelintensitäten ergeben, sondern auch Interferenzerscheinungen zeigen.
Als Erklärung kann hier das Wellenmodell mit dem Huygenschen Prinzip herangezogen werden, siehe [8]. Dieses besagt, dass jeder Punkt eines Objektes als Ausgangspunkt einer neuen Welle betrachtet werden kann. Im zweidimensionalen Fall bedeutet dies, dass sich die Welle kreisförmig von den jeweils betrachteten Punkten ausbreitet. Das gesamte Wellenfeld ergibt sich als Überlagerung aller Wellen, die von den Punkten des Objektes ausgehen. Oft ist dieser Ansatz für die explizite Berechnung des Wellenfeldes zu aufwendig, und es werden daher

Näherungen verwendet.
Bei der sogenannten Fraunhofer Näherung werden die Kreise von gleichem Schwingungszustand jeweils durch Tangenten an die entsprechenden Kreise genähert. Dies bedeutet, dass von einer Ausbreitung in Form ebener Wellen ausgegangen wird. Die Berechnung des Wellenfeldes wird hier sehr einfach, weil in diesem Fall das Wellenfeld gerade die Fouriertransformation des Objektes ist. Gültig ist diese grobe Näherung nur, wenn das Wellenfeld in sehr großer Entfernung vom Objekt bestimmt werden soll.
Eine weitere Näherung ist die Fresnel-Approximation. Hier werden die Kreise durch Parabeln substituiert. Der Gültigkeitsbereich dieser Näherung ist um einiges größer, und das ist auch der Grund, warum diese Näherung in vielen Anwendungen verwendet wird.
Kommen wir nun zur Definition des Fresnel'schen Beugungsintegrals, siehe [8, 21].

Definition 2.1.1 *Der Operator P_z definiert durch*

$$P_zT(s) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k}{2z}(s-t)^2} T(t)dt & \text{für } z \neq 0 \\ -i\frac{k}{2}T(s) & \text{für } z = 0 \end{cases}$$

heißt Propagationsoperator *oder auch* Fresnel'sches-Beugungsintegral *zum Abstand z.*
Der Wert $k \in \mathbb{R}^+$ entspricht der Wellenzahl und die Funktion $T : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ nennen wir Funktion des Phasengitters.

Da es sich bei dem Propagationsoperator um einen Operator vom Faltungstyp handelt, bietet sich die Anwendung des Faltungssatzes an. In der Tat wird dieser Zusammenhang in vielen bisherigen Methoden massiv ausgenutzt. So verwendet die interferometrische Methode und die Schlieren-Technik den Faltungssatz in Kombination mit schneller Fouriertransformation, um das Wellenfeld in der Objektebene zu bestimmen.
Wir benutzen die N-dimensionale Fouriertransformtion in der Form

$$\mathcal{F}_N f(\xi) = \hat{f}(\xi) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} f(x) e^{i\langle x,\xi\rangle} dx.$$

Bei der eindimensionalen Fouriertransformation lassen wir den Index der Einfachheit halber weg, also $\mathcal{F}f = \hat{f} = \mathcal{F}_1 f$.
Die Berechnung der Fouriertransformierten des Kernes von dem Operator P_z gestaltet sich als nicht so einfach. Zwar erkennen wir sofort, dass der Kern eine ähnliche Struktur wie die Gauß-Kurve, deren Fouriertransformation bekannt ist, hat, aber einfache Anwendung der Rechenregeln der Fouriertransformation (siehe z.B. [31] bezüglich der Rechenregeln) liefert das richtige Ergebnis nur bis auf ein Vorzeichen. Dies liegt daran, dass bei der Anwendung der Rechenregeln eine Wurzel auszuwerten ist, die sowohl eine positive wie auch eine negative Lösung haben kann.
In der Standardliteratur ist eine exakte Herleitung der Fouriertransformierten des Kernes nicht zu finden. Wir führen die Berechnung daher selbst aus.

Lemma 2.1.2 *Die Fouriertransformierte der Kernfunktion*

$$K(s) = -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}}\; e^{i\frac{k}{2z}s^2}$$

ist für $z \neq 0$ *gegeben durch*

$$\mathcal{F}K(\xi) = \begin{cases} -\frac{ik}{2\sqrt{2\pi}}\; e^{-i\frac{z\xi^2}{2k}} & \textit{für } z > 0 \\ \frac{ik}{2\sqrt{2\pi}}\; e^{-i\frac{z\xi^2}{2k}} & \textit{für } z < 0 \end{cases}.$$

Beweis: Ziel ist es, die Fouriertransformierte des Kernes auf die Fouriertransformierte der Gauß-Kurve zurückzuführen. Hierzu verwenden wir den Cauchy'schen Integralsatz.
Wir betrachten zunächst den Fall $z > 0$.
Nach der Definition der Fouriertransformation ist

$$\begin{aligned} \mathcal{F}K(\xi) &= (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} K(s)e^{-is\xi}ds \\ &= -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{4\pi\sqrt{z}}\int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k}{2z}s^2}e^{-is\xi}ds. \end{aligned}$$

Wir substituieren $s = \sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y$ und erhalten mit $L = \{\frac{1}{\sqrt{i}}t \;|t \in \mathbb{R}\}$ die Darstellung

$$\mathcal{F}K(\xi) = -\frac{ik}{4\pi}\int_L e^{-\frac{y^2}{2}}e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi}dy.$$

Nun betrachten wir den geschlossenen Weg $\gamma = \gamma_1 \circ \gamma_2^{-1} \circ \gamma_3^{-1} \circ \gamma_4$, wobei $\gamma_1 =$

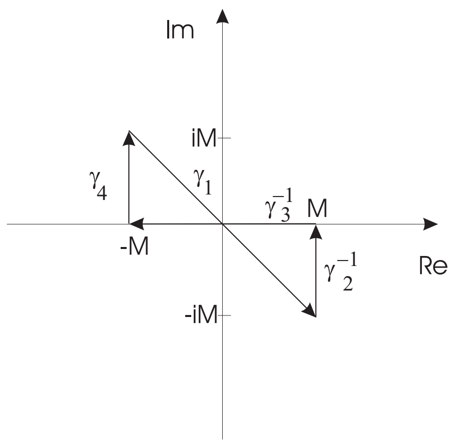

Abbildung 2.1: Integrationsweg

$\{t \in L|\mathrm{Re}(t) \in [-M, M]\}$, $\gamma_2 = \{M - it|t \in [0, M]\}$, $\gamma_3 = \{t|t \in [-M, M]\}$ und

$\gamma_4 = \{-M + it | t \in [0, M]\}$.
Die Anwendung des Cauchy'chen Integralsatzes liefert

$$\int_\gamma e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy = 0.$$

Jetzt benötigen wir noch

$$\lim_{M\to\infty} \int_{\gamma_2} e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy = 0$$

bzw.

$$\lim_{M\to\infty} \int_{\gamma_4} e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy = 0.$$

Es ist

$$\begin{aligned}
\left| \int_{\gamma_2} e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy \right| &\leq \int_{t\in[0,M]} \left| e^{-\frac{(M-it)^2}{2}} e^{-\frac{i-1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{z}{k}}(M-it)\xi} \right| dt \\
&\leq \int_{t\in[0,M]} \left| e^{-\frac{M^2}{2}+iMt+\frac{t^2}{2}} e^{\frac{M-iM}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{z}{k}}\xi} e^{\frac{-it-t}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{z}{k}}\xi} \right| dt \\
&\leq \frac{\int_{t\in[0,M]} e^{+\frac{t^2}{2}} e^{\frac{-t}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{z}{k}}\xi} dt}{e^{\frac{M^2}{2}} e^{-\frac{M}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{z}{k}}\xi}} \\
&\overset{\text{l'Hôpital}}{\longrightarrow} 0 \text{ für } M \to \infty.
\end{aligned}$$

Analog berechnet sich

$$\lim_{M\to\infty} \int_{\gamma_4} e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy = 0.$$

Im Grenzübergang für $M \to \infty$ erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}
-\frac{ik}{4\pi} \int_L e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy &= -\frac{ik}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-i\sqrt{i}\sqrt{\frac{z}{k}}y\xi} dy \\
&= -\frac{ik}{2\sqrt{2\pi}}\ e^{-i\frac{z\xi^2}{2k}}.
\end{aligned}$$

Dies bedeutet

$$\mathcal{F}K(\xi) = -\frac{ik}{2\sqrt{2\pi}}\ e^{-i\frac{z\xi^2}{2k}}.$$

Vollkommen analog gestaltet sich der Beweis für $z < 0$.

□

Das obige Resulat hat zwei unmittelbare Folgen. Mit Hilfe des Faltungssatzes können wir sofort den inversen Operator zum Propagationsoperator angeben

$$P_z^{-1} g(t) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{i2\pi zk}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{k}{2z}(s-t)^2} g(s) dt & \text{für } z \neq 0 \\ \frac{2i}{k} T(t) & \text{für } z = 0. \end{cases}$$

Definieren wir den Propagationsoperator zwischen L_2-Räumen

$$P_z : L_2(\mathbb{R}) \to L_2(\mathbb{R}),$$

dann erhalten wir mit Hilfe der Formel von Plancherel die Identität

$$\|P_z T\|_{L_2} = \frac{k}{2}\|T\|_{L_2}.$$

Diese Gleichung zeigt, dass die Inversion des Propagationsoperators zwischen L_2-Räumen stetig ist. Die Stetigkeit ist eine wichtige Eigenschaft von gut gestellten Problemen. Allerdings handelt es sich bei der Inversion des Propagationsoperators in der Regel um ein schlecht gestelltes Problem, wie wir im Folgenden sehen werden.
Zunächst beweisen wir ein Lemma, das sich in der theoretischen Analyse des Propagationsoperators als nützlich erweisen wird.

Lemma 2.1.3 *Es gilt für $z \neq 0$*

$$P_z T(s) = -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{z}}\ e^{i\frac{k}{2z}s^2}\hat{T}_z\left(\frac{ks}{z}\right),$$

wobei

$$T_z(\eta) = e^{i\frac{k}{2z}\eta^2}T(\eta).$$

Beweis: Aus der Definition des Propagationsoperators ergibt sich

$$\begin{aligned} P_z T(s) &= -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}}\int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k}{2z}(s-t)^2}T(t)dt \\ &= -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}}\ e^{i\frac{k}{2z}s^2}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{kts}{z}}T_z(t)dt \\ &= -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{z}}\ e^{i\frac{k}{2z}s^2}\hat{T}_z\left(\frac{ks}{z}\right). \end{aligned}$$

□

Nun betrachten wir die Glattheit des Bildes von P_z.

Satz 2.1.4 *Es sei $T \in L_1(\mathbb{R})$. Dann ist*

$$P_z T \in \mathcal{C}(\mathbb{R}) \text{ für alle } z \neq 0.$$

Hat außerdem T kompakten Träger, dann gilt $P_z T \in \mathcal{C}^\infty$ für alle $z \neq 0$.

Beweis: Die erste Aussage ergibt sich unmittelbar aus dem Satz von Riemann-Lebesgue (siehe [47]) und Lemma 2.1.3.

Im Fall, dass T kompakten Träger hat, ist auch der Träger von

$$T_z(\eta) = e^{i\frac{k}{2z}\eta^2}T(\eta)$$

kompakt. Somit ist $\hat{T}_z$ komplex analytisch, also $\hat{T}_z \in \mathcal{C}^\infty$. Wegen Lemma 2.1.3 folgt nun die zweite Behauptung.

$\square$

Dieser Satz zeigt also, dass für nicht stetige Daten, was auf Grund von Datenfehlern fast immer der Fall ist, keine Lösung in $L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ existiert. Die Inversion ist in diesen Räumen nach der Definition von Hadamard somit schlecht gestellt.

2.2 Ein Problem bei Intensitätsmessungen

In dem vorigen Abschnitt konnten wir sehen, dass die Inversion des Propagationsoperators wegen der stetigen Invertierbarkeit keine großen Probleme mit sich bringt. Ganz anders sieht es allerdings aus, wenn anstatt der Funktion P_zT nur die Absolutwerte $|P_zT|$ bekannt sind. In realen Anwendungen entspricht dies der Messung der Intensität. Problemstellungen dieser Art finden wir unter anderem in [20, 21].
Die Resulate, die wir für dieses spezielle Problem erhalten, lassen sich später auf eines der nichtlinearen Modelle im dritten Kapitel übertragen.

Beschreiben wir zunächst die Messgeometrie bzw. das Vorwärtsmodell im zweidimensionalen genauer:
Eine monochromatische ebene Welle mit Wellenzahl k trifft senkrecht auf ein geradliniges Phasengitter T. Die dadurch entstehenden Beugungserscheinungen werden hinter dem Objekt auf einem Detektor im Abstand z aufgezeichnet. Die gewonnenen Messwerte entsprechen der Intensität I_z der gebeugten Strahlung und es gilt

$$I_z(s) = |P_zT(s)|^2.$$

Hierbei ist s die Koordinate auf dem Detektor.

Es fällt sofort auf, dass die Messung der Intensität bei einem einzigen Abstand z nicht ausreichen kann, um die Funktion des Phasengitters T ohne weitere Zusatzinformationen zu bestimmen. Denn bei der Funktion T handelt es sich um eine Funktion mit einem komplexwertigen Bildbereich, während die Intensität nur Werte in $\mathbb{R}^+$ annimmt. Das Problem wäre in dieser Konstellation unterbestimmt. Um ein vernünftiges Ergebnis zu erzielen, müssen somit mehrere Messabstände aufgezeichnet werden. Mit der Frage, wie viele Messabstände tatsächlich benötigt

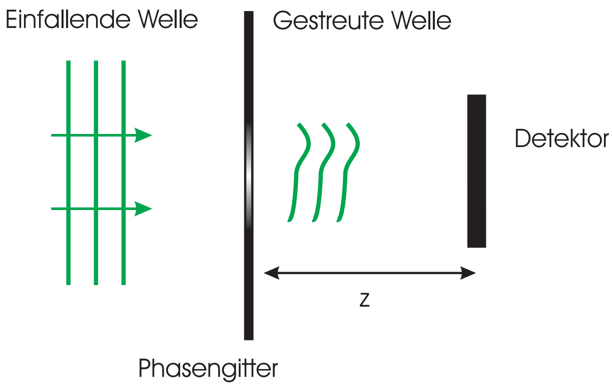

Abbildung 2.2: Messanordnung für Phasengitter

werden, beschäftigen wir uns in einem der nachfolgenden Abschnitte.
Die Fouriertransformierte der Intensität lässt sich leicht berechnen.

Lemma 2.2.1 *Für die Fouriertransformation der Intensität I_z gilt*

$$\hat{I}_z(\xi) = (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-iz\frac{\xi^2}{2k}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\; T(\eta)\overline{T\left(\eta+\frac{\xi z}{k}\right)}d\eta.$$

Beweis: Aus der Definition von I_z ergibt sich für $z \neq 0$

$$\begin{aligned}
\hat{I}_z(\xi) &= (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} e^{-is\xi}P_zT(s)\overline{P_zT(s)}ds \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^3}{8\pi z}\int_{\mathbb{R}} e^{-is\xi}\int\int e^{ik\frac{(\eta-s)^2-(\eta'-s)^2}{2z}}T(\eta)\overline{T(\eta')}d\eta d\eta' ds \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^3}{8\pi z}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} e^{ik\frac{\eta^2-\eta'^2+2(\eta'-\eta)s}{2z}-is\xi}T(\eta)\overline{T(\eta')}d\eta d\eta' ds \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^3}{4z}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} e^{ik\frac{\eta^2-\eta'^2}{2z}}\delta\left(\frac{k(\eta'-\eta)}{z}-\xi\right)T(\eta)\overline{T(\eta')}d\eta d\eta' \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} e^{ik\frac{\eta^2-\eta'^2}{2z}}\delta\left(\eta'-\eta-\frac{z\xi}{k}\right)T(\eta)\overline{T(\eta')}d\eta d\eta' \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}\int_{\mathbb{R}} e^{ik\frac{-2\xi z\eta/k-\xi^2z^2/k^2}{2z}}T(\eta)\overline{T\left(\eta+\frac{\xi z}{k}\right)}d\eta \\
&= (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-iz\frac{\xi^2}{2k}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\; T(\eta)\overline{T\left(\eta+\frac{\xi z}{k}\right)}d\eta.
\end{aligned}$$

Der Fall $z = 0$ ist trivial.

□

Mit Hilfe dieses Lemmas können wir für Phasengitter mit kompaktem Träger eine Aussage über den Träger von $\hat{I}_z$ treffen und somit eine optimale Abtastrate angeben.

Satz 2.2.2 *Hat T kompakten Träger in $[-b, b]$, dann ist I_z c-bandbeschränkt mit $c = \frac{2bk}{|z|}$. Eine Abtastrate h mit $h \leq \frac{\pi|z|}{2bk}$ ist ausreichend, um I_z eindeutig zu bestimmen.*

Beweis: Nach Lemma 2.2.1 ist

$$\hat{I}_z(\xi) = (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-iz\frac{\xi^2}{2k}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\ T(\eta)\overline{T\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)}d\eta.$$

Wegen $\operatorname{supp}\{T\} \subseteq [-b, b]$ liefert die Integration über η nur dann Beiträge, wenn

$$|\eta| < b \text{ und } \left|\eta + \frac{\xi z}{k}\right| < b.$$

Hieraus resultiert die c-Bandbeschränktheit mit $c = \frac{2bk}{|z|}$.
Die zweite Ausage ergibt sich sofort aus dem Shannon'schen Abtasttheorem.

□

2.2.1 Abbildungseigenschaften und Räume

In diesem Abschnitt betrachten wir den Operator I_z bzw. $\hat{I}_z$ zwischen L_p-Räumen und geben hierfür die formalen Ableitungen an. Wir definieren

$$\begin{array}{rccl} I_z & : & L_2(\mathbb{R}) & \rightarrow & L_1(\mathbb{R}) \\ & & T & \mapsto & I_z(T) = |P_zT|^2 \end{array}$$

und

$$\begin{array}{rccl} \hat{I}_z & : & L_1(\mathbb{R}) & \rightarrow & L_1(\mathbb{R}) \\ & & T & \mapsto & \hat{I}_z(T) = \mathcal{F}|P_zT|^2. \end{array}$$

Die Stetigkeit von I_z und $\hat{I}_z$ folgt direkt aus der Existenz der Ableitung.

Lemma 2.2.3 *Die formale Ableitung von $\hat{I}_z : L_1(\mathbb{R}) \to L_1(\mathbb{R})$ bezüglich T ist gegeben durch*

$$[\hat{I}'_z(T)h](\xi) = (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-iz\frac{\xi^2}{2k}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\ \left(T(\eta)\overline{h\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} + h(\eta)\overline{T\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)}\right) d\eta.$$

Beweis: Setzen wir der Einfachheit halber $\tilde{\xi} = \frac{z\xi}{k}$, dann ergibt sich mit Hilfe von Lemma 2.2.1

$$\begin{aligned}
&[\hat{I}_z(T)]\left(\frac{k\tilde{\xi}}{z}\right) - [\hat{I}_z(T_0)]\left(\frac{k\tilde{\xi}}{z}\right) - [\hat{I}'_z(T_0)(T-T_0)]\left(\frac{k\tilde{\xi}}{z}\right) \\
&\quad = (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-ik\frac{\tilde{\xi}^2}{2z}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{k\tilde{\xi}}{z}\eta}\ \Big[T(\eta)\overline{T\left(\eta+\tilde{\xi}\right)} - T_0(\eta)\overline{T_0\left(\eta+\tilde{\xi}\right)} \\
&\qquad -T_0(\eta)\left(\overline{T\left(\eta+\tilde{\xi}\right)} - \overline{T_0\left(\eta+\tilde{\xi}\right)}\right) - (T(\eta)-T_0(\eta))\overline{T_0\left(\eta+\tilde{\xi}\right)}\Big]\,d\eta \\
&\quad = (2\pi)^{-1/2}\frac{k^2}{4}e^{-ik\frac{\tilde{\xi}^2}{2z}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{k\tilde{\xi}}{z}\eta}\ (T(\eta)-T_0(\eta)) \\
&\qquad \cdot\left(\overline{T\left(\eta+\tilde{\xi}\right)} - \overline{T_0\left(\eta+\tilde{\xi}\right)}\right)d\eta.
\end{aligned}$$

Nach Vertauschen der Integrationsreihenfolge (Satz von Fubini) ist dann

$$\|\hat{I}_z(T) - \hat{I}_z(T_0) - \hat{I}'_z(T_0)(T-T_0)\|_{L_1} \le (2\pi)^{-1/2}\frac{k^3}{4z}\|T-T_0\|^2_{L_1}.$$

□

Durch mehrfaches Anwenden der Fouriertransformation erhalten wir eine andere Darstellung der Ableitung $\hat{I}'_z$ der Form

$$[\hat{I}'_z(T_0)h](\xi) = (2\pi)^{1/2}\mathcal{F}(\mathcal{F}^{-1}(\hat{K}\hat{T}_0)\overline{\mathcal{F}^{-1}(\hat{K}\hat{h})} + \overline{\mathcal{F}^{-1}(\hat{K}\hat{T}_0)}\mathcal{F}^{-1}(\hat{K}\hat{h}))(\xi), \quad (2.1)$$

wobei $K(s) = -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}}\ e^{i\frac{k}{2z}s^2}$ der Kern des Propagationsoperators ist.
Für die algorithmische Umsetzung ist diese Form besser geeignet, denn die auftretenden Fouriertransformationen lassen sich mit Hilfe von schneller Fouriertransformation effizient implementieren.

Lemma 2.2.4 *Die formale Ableitung von $I_z : L_2(\mathbb{R}) \to L_1(\mathbb{R})$ bezüglich T ist gegeben durch*

$$[I'_z(T_0)h](s) = (P_zT_0(s)\overline{P_zh(s)} + P_zh(s)\overline{P_zT_0(s)}).$$

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned}
&[I_z(T)](s) - [I_z(T_0)](s) - [I'_z(T_0)(T-T_0)](s) \\
&\qquad = P_zT(s)\overline{P_zT(s)} - P_zT_0(s)\overline{P_zT_0(s)} - \\
&\qquad\quad (P_zT_0(s)(\overline{P_zT(s)} - \overline{P_zT_0(s)}) + (P_zT(s) - P_zT_0(s))\overline{P_zT_0(s)}) \\
&\qquad = (P_zT(s) - P_zT_0(s))(\overline{P_zT(s)} - \overline{P_zT_0(s)}).
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich wegen $\|P_z T\|_{L_2} = \frac{k}{2}\|T\|_{L_2}$ und der Cauchy-Schwarz'schen Ungleichung

$$\|I_z(T) - I_z(T_0) - I_z'(T_0)(T - T_0)\|_{L_1} \leq \frac{k^2}{4}\|T - T_0\|_{L_2}^2.$$

$\square$

ANMERKUNG : Die beiden formalen Ableitungen aus Lemma 2.2.3 und Lemma 2.2.4 sind in sich konsistent, denn aus dem vorigen Lemma und Formel (2.1) sehen wir

$$\mathcal{F} I_z'(T) = \hat{I}_z'(T).$$

Die Rekonstruktion des Phasengitters T aus Intensitätsmessungen ist auch bei diesem Problem schlecht gestellt. Dies ist wieder eine unmittelbare Konsequenz aus Satz 2.1.4.

2.2.2 Eindeutigkeit der Lösung des inversen Problems

Wie wir bereits gesehen haben, ist es nicht möglich (ohne weitere Zusatzinformationen) die Funktion des Phasengitters aus nur einer Intensitätsmessung zu bestimmen. Deshalb wird es nun darum gehen, aus mehreren Datensätzen I_z, bei verschiedenen Abständen z, das Phasengitter T zu bestimmen.
Wir bemerken aus Lemma 2.2.1, dass wir T höchstens bis auf einen Phasenfaktor bestimmen können. Denn es ist $\hat{I}_z(T) = \hat{I}_z(e^{i\theta}T)$ für alle $\theta \in [0, 2\pi)$. Das bedeutet also, dass wir lediglich den Absolutbetrag und die relative Phasenlage von T rekonstruieren können. Diese beiden Größen sind aber zwei positive reelle Funktionen. Andererseits entspricht die Messung einer Intensität auch einer positiven reellen Funktion. Es macht also Sinn anzunehmen, dass zwei Messungen von I_z an zwei verschiedenen Werten z reichen, um T bis auf den Phasenfaktor eindeutig zu bestimmen. Diese Meinung ist in der Ingenieurliteratur oft zu finden, auch eine mathematisches Veröffentlichung behauptet eine ähnliche Aussage (siehe Theorem 1 in [46]). Dies ist aber nicht richtig, wie wir im Folgenden zeigen werden.
Um ein einfaches Gegenbeispiel für die Behauptung aus [46] zu konstruieren, überführen wir das Eindeutigkeitsproblem in ein äquivalentes Problem. Hierbei benutzen wir

$$\mathrm{sign}_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ -1 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Lemma 2.2.5 *Es sei $P_{z_0}T$ gegeben für ein $z_0 \in \mathbb{R}$, dann ist jede Wellenfunktion $P_z T$ mit $z \in \mathbb{R}/\{z_0\}$ bestimmt durch*

$$P_z T(s) = \mathrm{sign}_0(z)\mathrm{sign}_0(z_0)\mathrm{sign}_0(z - z_0)\frac{\sqrt{k}}{\sqrt{i}\sqrt{2\pi(z - z_0)}}\int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k(\eta - s)^2}{2(z - z_0)}} P_{z_0}T(\eta)d\eta.$$

Beweis: Wir betrachten zuerst den Fall $z > z_0 > 0$. Nach Lemma 2.1.2 ist

$$\begin{aligned} \mathcal{F}P_{z_0}T(\xi) &= -\frac{ik}{2}e^{-iz_0\xi^2/(2k)}\ \hat{T}(\xi) \\ \mathcal{F}P_zT(\xi) &= -\frac{ik}{2}e^{-iz\xi^2/(2k)}\ \hat{T}(\xi). \end{aligned}$$

Eliminieren von $\hat{T}(\xi)$ ergibt

$$\mathcal{F}P_zT(\xi) = e^{-i(z-z_0)\xi^2/(2k)}\ \mathcal{F}P_{z_0}T(\xi).$$

Nochmaliges Anwenden von Lemma 2.1.2 liefert die Aussage.
Analog ergeben sich die übrigen Fälle.

$\square$

Satz 2.2.6 *Es sei $T \in L_2(\mathbb{R})$ und $\Gamma(s) = e^{ik\frac{s^2}{2(z_2-z_1)}}P_{z_1}T(s)$ für alle $s \in \mathbb{R}$ und $z_1 \neq z_2$. Dann sind die beiden Aussagen:*

i) Das Phasengitter T ist bis auf einen Phasenfaktor eindeutig durch $I_{z_1}(T)$ und $I_{z_2}(T)$ bestimmt.

sowie

ii) Die Funktion Γ ist bis auf einen Phasenfaktor eindeutig durch $|\Gamma|$ und $|\hat{\Gamma}|$ bestimmt.

äquivalent.

Beweis: Aus

$$\Gamma(s) = e^{ik\frac{s^2}{2(z_2-z_1)}}P_{z_1}T(s)$$

folgt

$$|\Gamma(s)|^2 = |I_{z_1}(s)|.$$

Nach Lemma 2.2.5 ist

$$P_{z_2}T(s) = \frac{\sqrt{k}\ \mathrm{sign}_0(z_2)\mathrm{sign}_0(z_1)\mathrm{sign}_0(z_2-z_1)}{\sqrt{i}\sqrt{2\pi(z_2-z_1)}}\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{ik(\eta-s)^2}{2(z_2-z_1)}}P_{z_1}T(\eta)d\eta.$$

Indem wir im Beweis zu Lemma 2.1.3 die Funktion T durch $-i\frac{2}{k}P_{z_1}T$ ersetzen, können wir nun Lemma 2.1.3 anwenden und erhalten

$$\frac{k}{4|z_2-z_1|}\left|\hat{\Gamma}\left(\frac{k\xi}{(z_2-z_1)}\right)\right|^2 = |I_{z_2}(\xi)|.$$

Nun ist die Aussage offensichtlich.

□

Durch die äquivalente Umformulierung des Eindeutigkeitsproblems können wir jetzt auf eine ganze Reihe von Ergebnissen aus den Jahren 1974-78 zurückgreifen [18, 25, 43].
In [43] wird unter anderem die Nichteindeutigkeit von Problem ii) aus Satz 2.2.6 an einem expliziten Beispiel gezeigt. Der Autor beschreibt das Auftreten von sogenannten Zwillingslösungen. Diese Lösungen tauchen dann auf, wenn $|\Gamma|$ symmetrisch ist. Es gibt dann außer der Lösung $\Gamma(s)$ und $\hat{\Gamma}(s)$ auch die Lösung $\overline{\Gamma(-s)}$ und $\overline{\hat{\Gamma}}(s)$. Neuere Veröffentlichungen wie z.B. [45] versuchen, Zwillingslösungen zu erkennen und auf Grund von Zusatzinformationen die richtige Lösung auszuwählen.
Genau mit der Idee der Zwillingslösungen können wir die Aussage des Theorems 1 in [46] widerlegen. In der dort benutzten Notation wählen wir als Gegenbeispiel o.B.d.A. (wegen Lemma 2.2.5) die Messabstände $z_1 = 0$ und $z_2 = k/2$. Wir stellen fest, dass sowohl

$$\begin{aligned} \varphi_1(x,y) &= \begin{cases} 2(x^2+y^2) & \text{für } |x| \leq 1 \text{ und } |y| \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ \varphi_2(x,y) &= 0 \end{aligned}$$

mit $\Omega = [-1,1]^2$ dieselben Messwerte $F(x,y,z_j)$ für $j = 1,2$ ergeben (Eine Umtransformation der Menge Ω in das Quadrat $[0,1]^2$ ändert an dem Gegenbeispiel nichts).
Somit ist die Aussage des Theorems 1 aus [46] widerlegt.

Leider sind die Zwillingslösungen nicht die einzigen Mehrfachlösungen, die bei zwei Messabständen auftreten können. In [43] werden sogar Lösungen mit einer beliebig hohen, aber endlichen Mehrdeutigkeit konstruiert.
Es ist jedoch naheliegend, dass nach einer dritten Messung der Lösungsraum stark eingeschränkt wird. Unsere numerischen Tests aus Abschnitt 2.2.4 zeigen, dass mit drei Messungen das Objket bereits gut zu erkennen ist, aber von starken Oszillationen überlagert wird. Erweitern wir die Anzahl der Messabstände auf vier, so verschwinden die Oszillationen in den Rekonstruktionen.
Allerdings ist weder für diesen Fall noch für eine beliebige Anzahl Messabstände ein allgemeines theoretisches Eindeutigkeitsresultat bekannt.
Im schlechtesten Fall sollten wir Eindeutigkeit erwarten, wenn die Funktion I_z für alle $z \in \mathbb{R}$ bekannt ist. Dies ist genau die Aussage des folgenden Satzes.

Satz 2.2.7 *Gilt für zwei Objektfunktionen* $T_1 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ *und* $T_2 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ *die Gleichung*

$$I_z(T_1) = I_z(T_2) \textit{ für alle Werte } z \in \mathbb{R},$$

dann gibt es eine reelle Zahl θ, so dass

$$T_1(s) = e^{i\theta} T_2(s) \text{ für alle } s \in \mathbb{R}.$$

Beweis: Sei also

$$I_z(T_1) = I_z(T_2) \text{ für alle Werte } z \in \mathbb{R},$$

dann gilt wegen Lemma 2.2.1

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta} \left(T_1(\eta)\overline{T_1\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} - T_2(\eta)\overline{T_2\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} \right) d\eta \quad = \quad 0.$$

Anwenden der Parseval'schen Gleichung führt zu

$$\int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{\xi z}{k}\eta} \left(\hat{T}_1(\eta+\xi)\overline{\hat{T}_1\,(\eta)} - \hat{T}_2(\eta+\xi)\overline{\hat{T}_2\,(\eta)} \right) d\eta = 0.$$

Es sei o.B.d.A. $\hat{T}_1(a) \neq 0$ für ein $a \in \mathbb{R}$ (gäbe es kein solches a, dann wäre wegen der Stetigkeit von $\hat{T}_1$ die Funktion $T_1 \equiv 0$ und somit die Aussage trivial!). Multiplizieren wir beide Seiten der Gleichung mit $e^{-i\frac{\xi z}{k}a}$ und substituieren $\tilde{\eta} = \eta - a$, dann folgt

$$\int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{\xi z}{k}\tilde{\eta}} \left(\hat{T}_1(\tilde{\eta}+a+\xi)\overline{\hat{T}_1\,(\tilde{\eta}+a)} - \hat{T}_2(\tilde{\eta}+a+\xi)\overline{\hat{T}_2\,(\tilde{\eta}+a)} \right) d\tilde{\eta} = 0.$$

Integrieren wir beide Seiten bezüglich z, ergibt sich für $\xi \neq 0$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \delta(\frac{\xi}{k}\tilde{\eta}) \left(\hat{T}_1(\tilde{\eta}+a+\xi)\overline{\hat{T}_1\,(\tilde{\eta}+a)} - \hat{T}_2(\tilde{\eta}+a+\xi)\overline{\hat{T}_2\,(\tilde{\eta}+a)} \right) d\tilde{\eta} \quad &= \quad 0 \\ \left(\hat{T}_1(\xi+a)\overline{\hat{T}_1\,(a)} - \hat{T}_2(\xi+a)\overline{\hat{T}_2\,(a)} \right) \quad &= \quad 0. \qquad (2.2) \end{aligned}$$

Da T_1 und T_2 in $L_1(\mathbb{R})$ liegen, ist die Fouriertransformierte stetig. Somit gilt für $\xi = 0$, dass

$$\hat{T}_1(a)\overline{\hat{T}_1(a)} = \hat{T}_2(a)\overline{\hat{T}_2(a)},$$

also $\hat{T}_1(a) = e^{i\theta}\hat{T}_2(a)$ für ein $\theta \in \mathbb{R}$. Mittels Gleichung (2.2) folgt

$$\hat{T}_1(\xi) = e^{i\theta}\hat{T}_2(\xi) \text{ für alle } \xi \in \mathbb{R}.$$

Aus der Injektivität der Fouriertransformation resultiert schließlich die Aussage.

□

Korollar 2.2.8 *Es seien $T_1 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ und $T_2 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ zwei bandbeschränkte Funktionen und $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}$ eine Menge von Punkten, so dass $I_z(T_1) = I_z(T_2)$ für alle $z \in \mathcal{M}$. Hat $\mathcal{M}$ einen Häufungspunkt, dann gibt es eine reelle Zahl θ, so dass*

$$T_1(s) = e^{i\theta} T_2(s) \text{ für alle } s \in \mathbb{R}.$$

Beweis: Wir zeigen, dass die Funktion $I_z(T_1)$ bzw. $I_z(T_2)$ bereits durch die Messabstände aus $\mathcal{M}$ für alle $z \in \mathbb{R}$ eindeutig bestimmt sind. Danach wenden wir Satz 2.2.7 an.
Es sei T eine bandbeschränkte Funktion und $I_z(T)$ bekannt für alle $z \in \mathcal{M}$. Nach Lemma 2.2.1 gilt

$$\hat{I}_z(\xi) = (2\pi)^{-1/2} e^{-iz\frac{\xi^2}{2k}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\, T(\eta) \overline{T\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} d\eta.$$

Setzen wir zur Vereinfachung

$$W(z,\xi) = (2\pi)^{1/2} \frac{4}{k^2} e^{iz\frac{\xi^2}{2k}} \hat{I}_z(\xi)$$

dann erhalten wir

$$W(z,\xi) = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta} T(\eta) \overline{T\left(\eta + \xi\frac{z}{k}\right)} d\eta.$$

Anwenden der Parsevalschen Gleichung führt zu

$$W(z,\xi) = \int_{\mathbb{R}} e^{i\xi\frac{z}{k}\eta} \hat{T}(\eta+\xi) \overline{\hat{T}(\eta)} d\eta.$$

Da T bandbeschränkt ist, ist $W(z,\xi)$ komplex analytisch in z. Weil $\mathcal{M}$ einen Häufungspunkt hat, ist $W(z,\xi)$ und somit auch $I_z(T)$ bereits für alle z eindeutig bestimmt.
Hieraus folgt, dass

$$I_z(T_1) = I_z(T_2) \text{ für alle } z \in \mathbb{R}.$$

Nun wenden wir Satz 2.2.7 an und erhalten die Aussage.

□

2.2.3 Rekonstruktionsverfahren für Phasengitter

Da die beiden Probleme: 'Gesucht die Funktion T des Phasengitters bei Intensitätsmessungen für zwei verschiedene Messabstände' und 'Gesucht Γ bei gegebenen $|\Gamma|$ und $|\hat{\Gamma}|$' gleichwertig sind (siehe Beweis zu Satz 2.2.6), stehen eine ganze Reihe von Methoden zur Verfügung [7, 24].

Ein Algorithmus, der sich in der Praxis bewährt hat, ist das Verfahren von Gerchberg-Saxton [20]. Das Verfahren hat allerdings einige Schwachstellen. Außer dass es natürlich anfällig für Mehrfachlösungen ist, konnte die Konvergenz des Verfahrens nicht nachgewiesen werden. Die Praxis zeigt aber, dass die Methode von Gerchberg-Saxton in den meisten Fällen konvergiert, siehe [3].
Die bishergigen Methoden verwenden bei der Berechnung nur zwei Messabstände. Dies ist aber auf Grund der Zwillingslösungen zu wenig. Wir werden daher im Folgenden davon ausgehen, dass die Intensitäten für eine Menge von Messabständen $\mathcal{M} = \{z_1, .., z_K\}$ bekannt sind, also

$$I_z(T) \text{ bekannt für alle } z \in \mathcal{M}.$$

Die Grundidee des Gerchberg-Saxton-Algorithmus ist aus der Definition der Intensität $I_z = |P_zT|^2$ ein Iterationsverfahren abzuleiten. Hierzu wird die Gleichung in $P_zT = \sqrt{I_z}\frac{P_zT}{|P_zT|}$ umgeformt und T durch die Iterierten $T^{(j)}$ ersetzt, also $P_zT^{(j+1)} = \sqrt{I_z}\frac{P_zT^{(j)}}{|P_zT^{(j)}|}$.
Die Methode von Gerchberg-Saxton lässt sich ohne Probleme auf mehr als nur zwei Messabstände erweitern.
Wir bezeichnen mit I_z^{exp} die im Abstand z gemessene Intensität.

Algorithmus 2.2.9 (Erweiterter Gerchberg-Saxton-Algorithmus (EGS))

1. *Gebe einen Startwert* $T^{(0,1)}$ *vor und setze* $j = 0$ *bzw.* $l = 1$
2. *Bestimme* $T^{(j,l+1)} = P_{z_l}^{-1}\left(\sqrt{I_{z_l}^{exp}}\frac{P_{z_l}T^{(j,l)}}{|P_{z_l}T^{(j,l)}|}\right)$
3. *Ist* $l + 1 > K$*, dann setze* $T^{(j+1,1)} = T^{(j,l+1)}$ *und* $l = 1$*, ansonsten erhöhe den Index* l *um* 1 *und gehe zu Schritt 2*
4. *Erhöhe den Index* j *um* 1 *und gehe zu Schritt 2 (solange bis die gewünschte Auflösung erreicht ist)*

Anmerkung : Für den Fall, dass die Menge $\mathcal{M}$ nur zwei Werte enthält, ergibt sich die klassische Methode von Gerchberg-Saxton.

Mit Hilfe der formalen Ableitungen aus Abschnitt 2.2.1 können wir auch ein Gauß-Newton Verfahren der Form

$$\begin{aligned} I_z'(T^{(j)})h &= (I_z^{exp} - I_z(T^{(j)}) \\ T^{(j+1)} &= T^{(j)} + h \end{aligned}$$

aufstellen. Da der Operator $I_z'(T^{(j)})$ relativ leicht mit schneller Fouriertransformation auszuwerten ist, bietet sich zur Lösung des Systems ein CG-Verfahren an.

Dabei ergeben sich aber zwei Schwierigkeiten. Zum einen bildet I'_z keine $\mathbb{C}$-lineare Abbildung, was bei der Berechnung der Adjungierten zu Problemen führt, zum anderen ist das System, wie wir bereits gesehen haben, mit nur einer Messung unterbestimmt.
Dem ersten Problem begegnen wir, indem wir schlicht $\overline{h}$ als neue Variable definieren. Das zweite umgehen wir, indem wir mehrere Messungen durchführen.
Wir setzen also

$$\begin{aligned} q &= \overline{h} \\ \mathcal{M} &= \{z_1, .., z_K\}. \end{aligned}$$

Durch leichte Rechnung erhalten wir $\overline{P_z h(s)} = P_{-z} q(s)$.
Nun brauchen wir noch einige Vorbemerkungen.

Lemma 2.2.10 *Sei $T \in L_1(\mathbb{R})$, dann ist der Operator*

$$\begin{array}{rccl} A_z(T) & : & L_2(\mathbb{R}) \times L_2(\mathbb{R}) & \to & L_2(\mathbb{R}) \\ & & (h, q) & \mapsto & A_z(T)(h, q) \end{array}$$

mit

$$[A_z(T)(h, q)](s) = P_z T\,(s)\, P_{-z} q\,(s) + \overline{P_z T\,(s)} P_z h\,(s)$$

linear.

Beweis: Die Linearität des Operators $A_z(T)$ ist offensichtlich. Es ist lediglich zu zeigen, dass $A_z(T)(h, q) \in L_2(\mathbb{R})$. Aber auch das ist wegen

$$\|P_z T\|_{L_\infty} \leq \frac{k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}} \|T\|_{L_1}$$

klar.

$\square$

Satz 2.2.11 *Es gelten:*

i) Der Raum $\mathrm{H}^K := \underbrace{L_2(\mathbb{R}) \times ... \times L_2(\mathbb{R})}_{K\text{- mal}}$ *ist vermöge*

$$\langle (h_1, ..., h_K), (q_1, ..., q_K) \rangle_{\mathrm{H}^K} := \sum_{j=1}^{K} \langle h_j, q_j \rangle_{L_2}$$

ein Hilbertraum.

ii) Für $T \in L_1(\mathbb{R})$ ist die Abbildung

$$\begin{array}{rccl} \mathcal{A}(T): & \mathrm{H}^2 & \to & \mathrm{H}^K \\ & (h,q) & \mapsto & \mathcal{A}(T)(h,q) := (A_{z_1}(T)(h,q), ..., A_{z_K}(T)(h,q)) \end{array}$$

ein linearer Operator zwischen den Hilberträumen H^2 und H^K.

iii) Die adjungierten Operatoren von $A_z(T)$ bzw $\mathcal{A}(T)$ sind gegeben durch

$$[A_z^*(T)b_j](s) = \left(P_{-z}\left(b_j P_z T\right)(s), P_z\left(b_j \overline{P_z T}\right)(s)\right)$$

und

$$\mathcal{A}^*(T)(b_1, ..., b_K) = \sum_{j=1}^{K} A_{z_j}^*(T) b_j.$$

Beweis: Die Aussage i) ist offensichtlich und Behauptung ii) wird mit Hilfe von Lemma 2.2.10 nachgerechnet. Für iii) betrachten wir

$$\begin{aligned} \langle A_z(T)(h,q), b_j\rangle_{L_2} &= \int_{\mathbb{R}} \left(P_z T\,(s)\, P_{-z} q\,(s) + \overline{P_z T\,(s)} P_z h\,(s)\right) \overline{b_j(s)} ds \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{P_z\left(b_j \overline{P_z T}\right)(s)} q\,(s) + \overline{P_{-z}\left(b_j P_z T\right)(s)} h(s) ds. \end{aligned}$$

Hieraus können wir

$$[A_z^*(T)b_j](s) = \left(P_{-z}\left(b_j P_z T\right)(s), P_z\left(b_j \overline{P_z T}\right)(s)\right)$$

ablesen.
Der adjungierte Operator zu $\mathcal{A}(T)$ ergibt sich aus

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}(T)(h,q), (b_1, ..., b_K)\rangle_{H^K} &= \sum_{j=1}^{K} \langle A_{z_j}(T)(h,q), b_j\rangle_{L_2} \\ &= \sum_{j=1}^{K} \langle (h,q), A_{z_j}^*(T) b_j\rangle_{\mathrm{H}^2} \\ &= \langle (h,q), \sum_{j=1}^{K} A_{z_j}^*(T) b_j\rangle_{\mathrm{H}^2}. \end{aligned}$$

□

Setzen wir noch $b = (b_1, .., b_K)$ mit

$$b_j := I_{z_j}^{exp} - I_{z_j}(T),$$

dann läßt sich das System eines Newtonschrittes mit den neuen Bezeichnungen angeben durch

$$\mathcal{A}(T)(h,q) = b. \tag{2.3}$$

Hierauf wenden wir nun ein CG-Verfahren an.

Algorithmus 2.2.12 (CG-Verfahren)

1. *Wähle einen Startwert* $(h^{(0)}, q^{(0)})$.

2. *Berechne*
$$r^{(m)} = \mathcal{A}^*(T)(\mathcal{A}(T)(h^{(m)}, q^{(m)}) - b)$$
und setze
$$d^{(m)} = -r^{(m)}, \text{ falls } m = 0.$$

3. *Berechne*
$$(h^{(m+1)}, q^{(m+1)}) = (h^{(m)}, q^{(m)}) + \alpha_m d^{(m)} \text{ mit } \alpha_m = \frac{\|r^{(m)}\|^2}{\|\mathcal{A}(T)d^{(m)}\|^2}.$$

4. *Bestimme*
$$d^{(m+1)} = -r^{(m+1)} + \beta_m d^{(m)}, \text{ wobei } \beta_m = \frac{\|r^{(m+1)}\|^2}{\|r^{(m)}\|^2}.$$

Für die Stetigkeit des Operators $\mathcal{A}$ haben wir in Lemma 2.2.10 die Bedingung $T \in L_1(\mathbb{R})$ benötigt. Wenn wir allerdings einen Newtonschritt ausführen, so addieren wir zu T die Funktion $h \in L_2(\mathbb{R})$. Es könnte also sein, dass $(T + h) \notin L_1(\mathbb{R})$ wäre. Damit dies nicht geschieht, schränken wir den Raum der betrachteten Phasengitter auf $L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ ein.

Satz 2.2.13 *Seien* $\hat{I}_{z_j}^{exp} \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ *für alle* $j = 1, .., K$ *die exakten Daten und* $T_0 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$. *Ist* $0 \notin \mathcal{M}$ *und* $(h^{(0)}, q^{(0)}) \in (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})) \times (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R}))$, *dann gilt in Algorithmus 2.2.12*
$$(h^{(m)}, q^{(m)}) \in (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})) \times (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})) \text{ für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Beweis: Wir unterteilen den Beweis in drei Schritte

1. Wir zeigen zunächst, dass $b \in \mathrm{H}^K$. Weil $b_j = I_{z_j}^{exp} - I_{z_j}(T)$ ist, reicht es $I_z(T) \in L_2(\mathbb{R})$ für alle $T \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ nachzuweisen.
Sei also $T \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$, dann gilt
$$\begin{aligned} \|I_z(T)\|_{L_2} &= \|P_z T \overline{P_z T}\|_{L_2} \\ &\leq \|P_z T\|_{L_\infty} \|P_z T\|_{L_2} \\ &\leq \frac{k^{5/2}}{4\sqrt{2\pi z}} \|T\|_{L_1} \|T\|_{L_2}. \end{aligned}$$

Somit ist also $I_z(T) \in L_2(\mathbb{R})$ und deshalb auch $b \in \mathrm{H}^K$.
Nun zeigen wir, dass $\hat{b}_j \in L_1(\mathbb{R})$. Hierzu reicht es wieder, $\hat{I}_z(T) \in L_1(\mathbb{R})$ zu zeigen. Es ergibt sich mit Lemma 2.2.1 und dem Satz von Fubini

$$\begin{aligned}
\|\hat{I}_z(T)\|_{L_1} &= \int_{\mathbb{R}} \left| (2\pi)^{-1/2} \frac{k^2}{4} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\xi\eta}\ T(\eta) \overline{T\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} d\eta \right| d\xi \\
&\leq \int_{\mathbb{R}} (2\pi)^{-1/2} \frac{k^2}{4} \int_{\mathbb{R}} \left| T(\eta) \overline{T\left(\eta + \frac{\xi z}{k}\right)} \right| d\eta d\xi \\
&\leq (2\pi)^{-1/2} \frac{k^3}{4z} \|T\|_{L_1}^2.
\end{aligned}$$

2. Als Nächstes zeigen wir, dass $\mathcal{F}A_z(T)(h,q) \in L_1(\mathbb{R})$ für alle $h, q \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$.
Sei also $h, q \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$, dann gilt wegen Lemma 2.1.3

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{F}A_z(T)(h,g)\|_{L_1} &= \|\mathcal{F}\left(\overline{P_z T} P_z h + P_z T P_{-z} q\right)\|_{L_1} \\
&= \frac{k^2}{4} \|\mathcal{F}\left(\overline{\hat{T}_z} \hat{h}_z + \hat{T}_z \hat{q}_{-z}\right)\|_{L_1} \\
&= \frac{(2\pi)^{-1/2} k^2}{4} \|\left(\overline{T_z} * D h_z + D T_z * D q_{-z}\right)\|_{L_1} \\
&\leq \frac{(2\pi)^{-1/2} k^2}{4} (\|T\|_{L_1} \|h\|_{L_1} + \|T\|_{L_1} \|q\|_{L_1}).
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir den Operator $Df(x) = f(-x)$ verwendet. Auf Grund von Satz 2.2.11 gilt außerdem $\mathcal{A}(T_0)(h,q) \in \mathrm{H}^K$.

3. Schließlich betrachten wir noch $\mathcal{A}^*(T_0)b$ mit $b \in \mathrm{H}^K$ und $\hat{b}_j \in L_1(\mathbb{R})$ für alle $j = 1, .., K$. Wir wollen zeigen, dass $\mathcal{A}^* b \in (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})) \times (L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R}))$ liegt. Hier reicht es, $A^*_{z_j}(T) b_j$ zu betrachten. Für die zweite Komponente gilt wegen Lemma 2.1.3

$$\begin{aligned}
\|P_{z_j}\left(b_j \overline{P_{z_j} T}\right)\|_{L_1} &= \frac{k^{3/2}}{2\sqrt{z_j}} \|P_{z_j}\left(b_j\ e^{-i\frac{k}{2z_j}\ (\cdot)^2} \overline{\hat{T}_{z_j}} \left(\frac{k}{z_j} \cdot\right)\right)\|_{L_1} \\
&= \frac{k^2}{4\sqrt{2\pi}}\ \|\overline{T_{z_j}} * \hat{b}_j \left(\frac{k}{z_j} \cdot\right)\|_{L_1} \\
&\leq \frac{k z_j}{4\sqrt{2\pi}}\ \|T\|_{L_1} \|\hat{b}_j\|_{L_1}.
\end{aligned}$$

Analog verfahren wir bei der ersten Komponente. Die Zugehörigkeit von $P_{z_j}\left(b \overline{P_{z_j} T}\right) \in L_2(\mathbb{R})$ ist klar nach Satz 2.2.11.

Mit Hilfe vollständiger Induktion ergibt sich nun die Aussage.

□

Algorithmus 2.2.14 (Gauß-Newton (GN))

1. *Wähle einen Startwert* $T^{(0)}$.
2. *Löse das Gleichungssystem*

$$\mathcal{A}(T^{(\mu)})(h,q) = b$$

mit Hilfe von Algorithmus 2.2.12 iterativ.

3. *Führe einen Newtonschritt aus*

$$\begin{aligned} T^{(\mu+1)} &= T^{(\mu)} + h \\ b_j &= I_{z_j}^{exp} - I_{z_j}(T^{(\mu+1)}) \text{ für alle } j \end{aligned}$$

und gehe zurück zu Schritt 2 (solange bis die gewünschte Auflösung erreicht ist).

Eine ähnliche Methode zu unserem GN-Verfahren finden wir mit der Einschränkung auf zwei Messabstände in [7]. Zur Regularisierung wird in [7] eine Levenberg-Marquardt Methode vorgeschlagen, was einer Tikhonov-Phillips Regularisierung des linearen Teilproblems $\mathcal{A}(h,q) = b$ entspricht.
In unserer GN-Methode wird die Regularisierung durch ein frühzeitiges Abbrechen des CG-Verfahrens erreicht.

2.2.4 Numerische Tests

Es werden insgesamt 2 verschiedene Phasengitter getestet. Die beiden benutzten Phantome sind in den Abbildungen 2.3 und 2.4 dargestellt. Die synthetischen Daten werden durch numerische Integration des Fresnel-Beugungsintegals erzeugt. Hierzu ist eine sehr feine Ortsdiskretisierung nötig. Außerdem wird das Verhalten bei Datenfehlern untersucht.

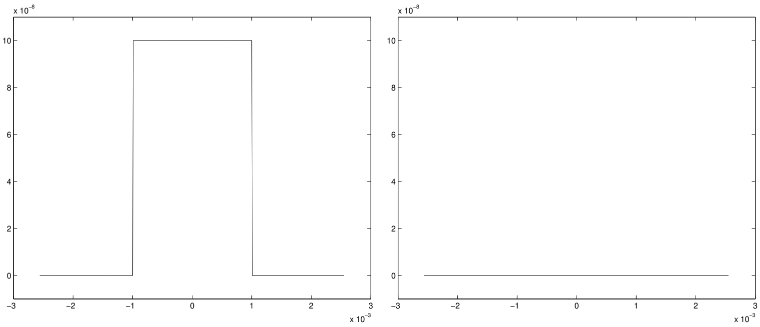

Abbildung 2.3: Orginalwerte des Phantoms A: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

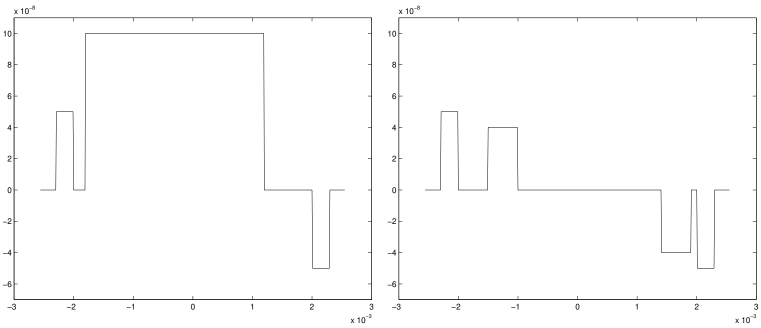

Abbildung 2.4: Orginalwerte des Phantoms B: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

Die Testparamater sind im Detail:

- Phantom A (siehe Abbildung 2.3)

Wellenlänge	$4.2 \cdot 10^{-7}$
Detektorpixelgröße	10^{-5}
Anzahl der Detektorpixel	512
Gemessene Abstände	0.1, 0.2, 0.3, 0.4

- Phantom B (siehe Abbildung 2.4)

Wellenlänge	$4.2 \cdot 10^{-7}$
Detektorpixelgröße	10^{-5}
Anzahl der Detektorpixel	512
Gemessene Abstände	0.1, 0.2, 0.3, 0.4

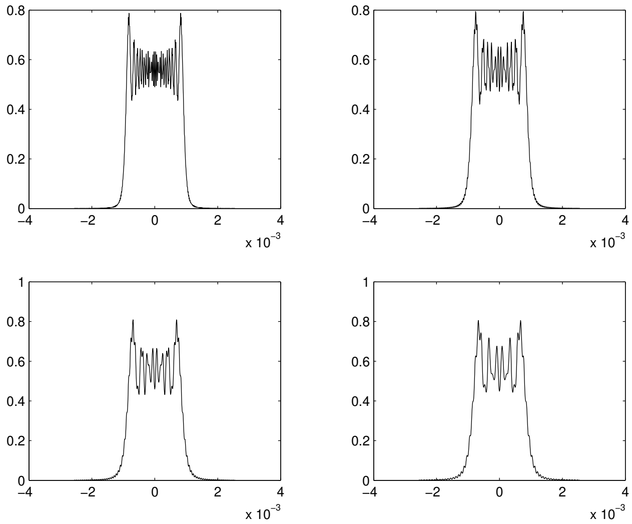

Abbildung 2.5: Daten zu Phantom A: Abstand 0.1 (links oben), Abstand 0.2 (rechts oben), Abstand 0.3 (links unten), Abstand 0.4 (rechts unten)

Die synthetischen Daten zu den beiden Phantomen sind in den Abbildungen 2.5 und 2.6 zu sehen.
Weil das Hauptanwendungsgebiet von Phasengittern im optisch sichtbaren Bereich liegt, haben wir eine Wellenlänge von 420 nm gewählt.
Da die Rekonstruktionen nur bis auf einen Phasenfaktor mit dem exakten Phasengitter übereinstimmen können (siehe Abschnitt 2.2.2), müssen wir die berechneten Phasengitter nachbehandeln. Hierzu drehen wir die Rekonstruktionen, so dass $\int T(t)dt \in \mathbb{R}^+$ ist.
Das EGS-Verfahren iterierte insgesamt 2000 Mal, während das GN-Verfahren 15 Schritte ausführte. Die Anzahl der CG-Schritte wurde an den Index der Newtoniteration gekoppelt.
Bei den numerischen Tests zeigte sich, dass mit vier unterschiedlichen Messabständen stabile Rekonstruktionen berechnet werden können. Bei nur drei Messabständen war zwar das Objekt grob zu erkennen, aber die Rekonstruktionen waren mit starken Oszillationen behaftet.
Auch gegenüber Datenfehlern im Bereich von 5% sind die beiden Verfahren stabil, siehe Abbildungen 2.10, 2.11 und 2.13.

In Abbildung 2.7 ist die Konvergenzgeschwindigkeit der Methoden EGS und GN dargestellt. Auf der Abszisse ist die Zeit, auf der Ordinate der Fehler der Rekonstruktion zum Orginal aufgetragen. Es fällt auf, dass das EGS-Verfahren bei Phantom B nicht konvergiert. Auch mit Variationen des Startwertes war eine Konvergenz des Verfahrens nicht zu erreichen.

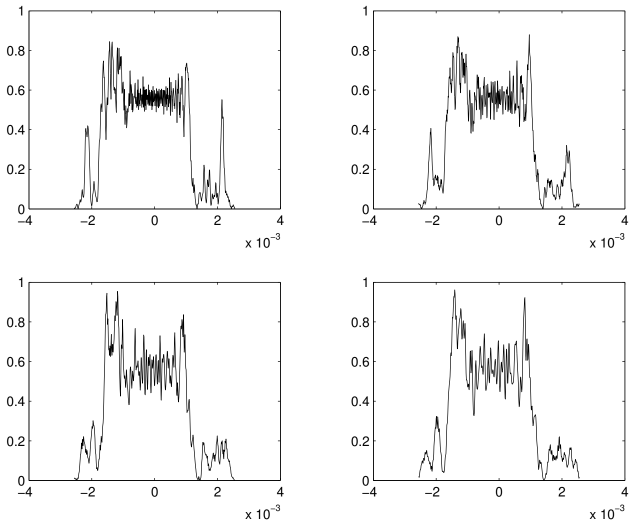

Abbildung 2.6: Daten zu Phantom B: Abstand 0.1 (links oben), Abstand 0.2 (rechts oben), Abstand 0.3 (links unten), Abstand 0.4 (rechts unten)

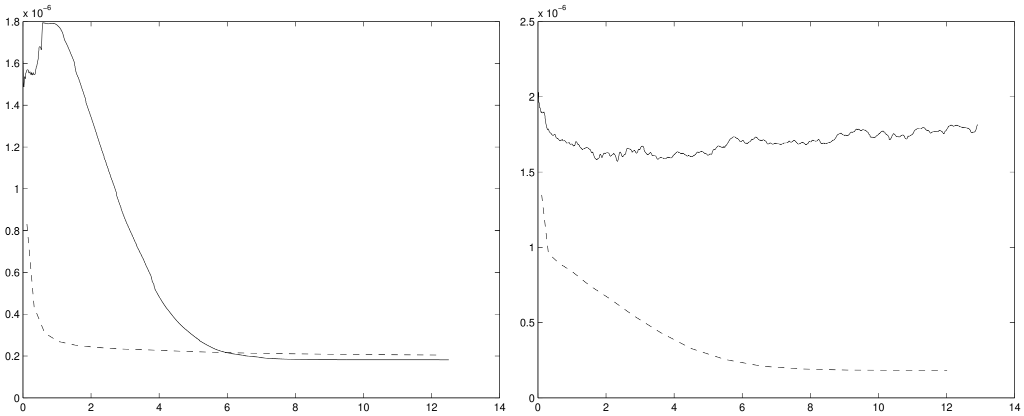

Abbildung 2.7: Konvergenzgeschwindigkeit der Algorithmen EGS (durchgezogene Linie) und GN (gestrichelte Linie) für Phantom A (links) und Phantom B (rechts) Aufgetragen ist der Rekonstruktionsfehler gegen die Rechenzeit

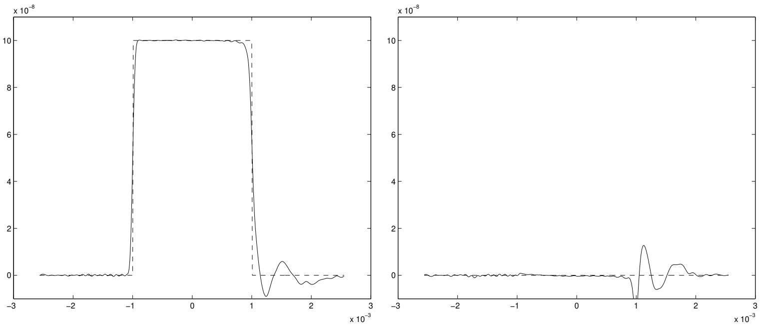

Abbildung 2.8: Rekonstruktion von Phantom A mit EGS: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

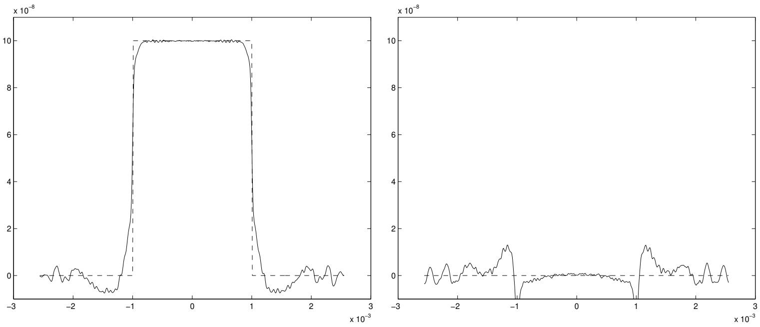

Abbildung 2.9: Rekonstruktion von Phantom A mit GN: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

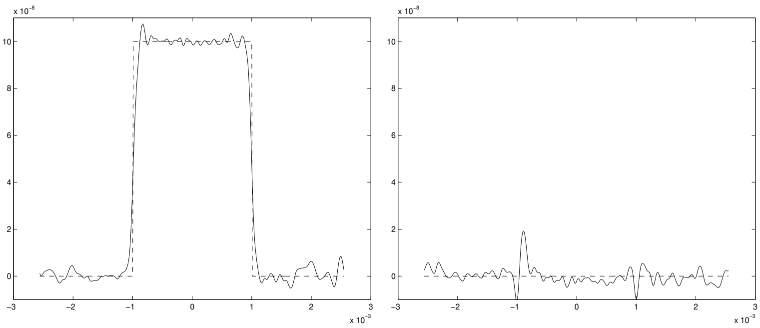

Abbildung 2.10: Rekonstruktion von Phantom A mit EGS bei 5% Datenfehler: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

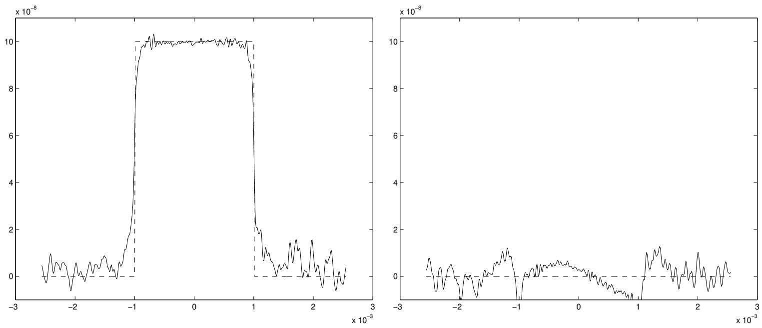

Abbildung 2.11: Rekonstruktion von Phantom A mit GN bei 5% Datenfehler: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

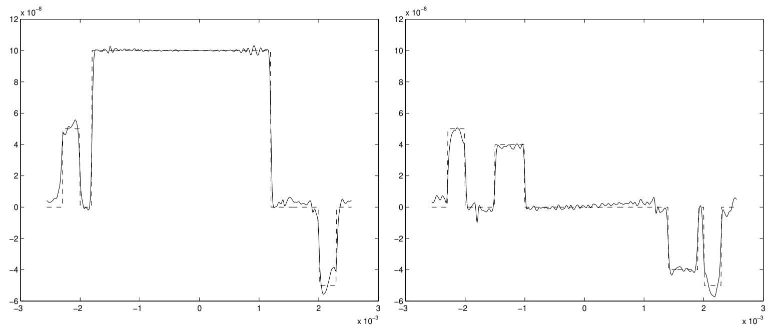

Abbildung 2.12: Rekonstruktion von Phantom B mit GN: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

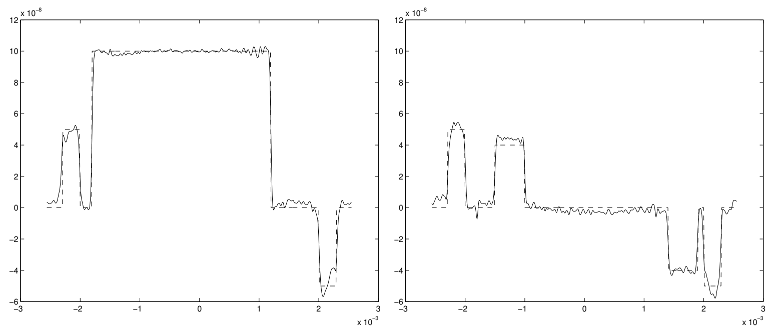

Abbildung 2.13: Rekonstruktion von Phantom B mit GN bei 5% Datenfehler: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

Kapitel 3

Räumliche Phasenobjekte bei ebenen Wellen

Wir wenden uns nun der holographischen Methode aus dem ersten Kapitel zu. Da diese für die Anwendung von besonderer Bedeutung ist, werden wir diesen Ansatz sehr genau untersuchen. Nachdem wir eine allgemeine Herleitung aus der Wellengleichung angegeben haben, werden wir hieraus eine Reihe von verschiedenen Modellen ableiten und diese in Bezug auf ihre Genauigkeit diskutieren.
Weil der zwei- und dreidimensionale Fall sehr viele Parallelen aufweisen, werden wir die Beweise zu den in diesem Kapitel getroffenen Aussagen hauptsächlich nur im zweidimensionalen explizit durchführen. Die Beweise im dreidimensionalen Fall verlaufen, sofern nicht anders bemerkt, vollkommen analog. Außerdem sind die Aussagen dieses Kapitels so allgemein formuliert, dass sie sowohl im zweidimensionalen als auch im dreidimensionalen gelten. Sollte die Dimension des Raumes bei einer Behauptung eine Rolle spielen, so wird besonders darauf hingewiesen.
Es ergeben sich für diese Problemstellung einige überraschende Ergebnisse, z.B. können wir im Gegensatz zum vorigen Kapitel mit einigen Einschränkungen die Eindeutigkeit des Rekonstruktionsproblems bei nur zwei verschiedenen Messabständen nachweisen.
Zu den betrachteten Modellen werden wir außerdem eine Reihe verschiedener Rekonstruktionsverfahren entwickeln, wobei auch die im ersten Kapitel erwähnte Paraboloid-Methode wieder auftreten wird. Zum Abschluß des Kapitels folgen einige numerische Tests sowohl mit synthetischen als auch mit real gemessenen Daten.

3.1 Herleitung aus der Wellengleichung

Wiederholen wir zunächst den Messaufbau bei der holographischen Methode:

> Ein Objekt f mit Träger in einem Gebiet Ω wird mit monochromatischem kohärentem Röntgenlicht mit der Einfallsrichtung α bestrahlt. In mehreren Abständen z_j hinter dem Objekt werden die Intensitäten $I(z_j, \cdot)$ aufgenommen. Die Richtung der einfallenden Welle wird innerhalb einer Ebene mehrfach variiert, bzw. das Objekt wird einmal um eine feste Rotationsachse gedreht.

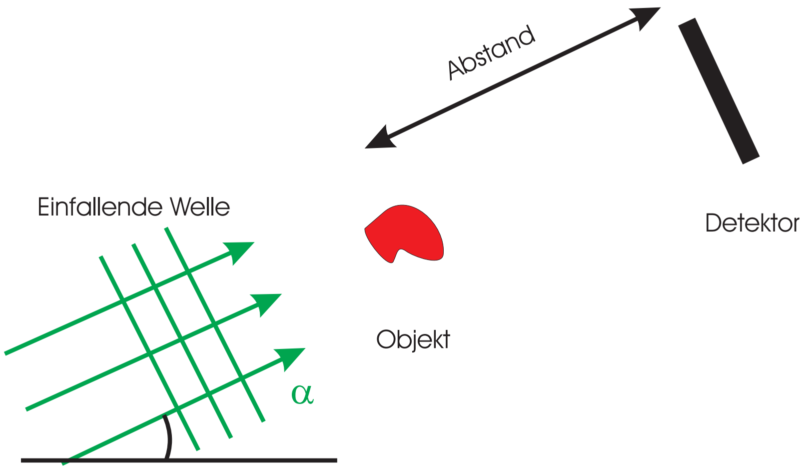

Abbildung 3.1: Messanordnung bei der holographischen Methode

Auf Grund der Welleneigenschaft der Röntgenstrahlung handelt es sich hierbei um ein Streuproblem.
Da zeitharmonische Wellen der Form

$$U^i(x,t) = e^{ikt}u(x)$$

eingestrahlt werden, wird das mathematische Modell eines solchen Streuvorgangs durch die Helmholtzgleichung

$$\Delta u + k^2(1-f)u = 0$$

beschrieben. Hierbei haben wir den Brechungsindex n durch $f = 1-n^2$ substituiert. Physikalisch gibt der Imaginärteil des Brechungsindex n die Absorption und der Realteil die Phasenverschiebung an. Da wir nur Objektfunktionen f mit sehr kleinen Funktionswerten betrachten, übertragen sich diese physikalischen Eigenschaften auch auf f, also entspricht $\mathrm{Im}(f)$ dem Absorptionsvermögen und $\mathrm{Re}(f)$ dem Maß der Phasenverschiebung.

Zerlegen wir u in $u = u_i + u_s$, wobei u_i die einfallende und u_s die gestreute Welle ist, dann können wir das Problem für ebene Wellen

$$u_i(x) = e^{ik\langle\alpha,x\rangle}$$

mit Einfallsrichtung α umschreiben in

$$\Delta u_s + k^2 u_s = k^2 f \cdot (u_i + u_s).$$

Die Lösung des Vorwärtsproblems, also die Bestimmung von u_s bei bekanntem f, lässt sich mit Hilfe der Greenschen Funktion

$$G(x,y) = \begin{cases} \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k\|x-y\|) & \text{für } N = 2 \\ \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik\|x-y\|}}{\|x-y\|} & \text{für } N = 3 \end{cases}$$

angeben durch

$$u_s(x) = -k^2 \int_\Omega G(k\|x-y\|) f(y)(u_i(y) + u_s(y))dy. \tag{3.1}$$

Der Wert N entspricht der Dimension des betrachteten Raumes. Die Funktion $H_0^{(1)}$ ist die Hankelfunktion erster Art und Ordnung 0.
Dies ist bisher der allgemeine Zugang zu Streuproblemen. Da auf dem Detektor nur Intensitäten gemessen werden können, sind die Daten durch $I = |u_i + u_s|^2$ gegeben.
Die bisherigen Anwendungen an der Synchrotronanlage in Grenoble finden zur Zeit bei folgenden Größen statt:

Objektgröße	$1\,mm$
Objektfunktion f	$\|f\| \sim 10^{-7}$
Wellenlänge λ	$10^{-10}m$
Detektorabstand z	$0.01 - 1.0\,m$
Anzahl der Messrichtungen (180°-Scan)	700-900
Pixelgröße der Detektorelemente	$0.4 - 2\,\mu m$
Anzahl der Pixel	1024^2

Für die Berechnung der unbekannten Objektfunktion f müssen wir unter anderem die Integralgleichung (3.1) lösen. Hierzu existieren zwar eine Reihe von Methoden [1, 39], aber diese sind bei den hier geforderten Auflösungen auf Grund ihrer hohen Rechenzeit und immensen Ressourcenbedarfs nicht durchführbar. Deshalb werden wir für die Rekonstruktion von f einige Approximationen durchführen.

3.2 Verschiedene Vorwärtsmodelle und Erzeugung von Phantomdaten

Zur Erzeugung von synthetischen Daten bei charakteristischen Funktionen mit kreis- bzw. kugelförmigen Träger können wir eine Reihendarstellung des Streufeldes verwenden. Im zweidimensionalen Fall ist das Streufeld in Polarkoordinaten (siehe [48])

$$u_s(r,\varphi) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} i^n a_n H_n^{(1)}(kr)e^{in\varphi} \quad \text{für } r > \rho.$$

Hierbei ist ρ der Radius des Objektes, $k_i = k\sqrt{1-f}$ die Wellenzahl im Inneren des Objektes und

$$a_n = \frac{k_i J_n(k\rho)J_n'(k_i\rho) - kJ_n'(k\rho)J_n(k_i\rho)}{kJ_n(k_i\rho)H_n^{(1)'}(k\rho) - k_i J_n'(k_i\rho)H_n^{(1)}(k\rho)}.$$

Auch im dreidimensionalen ist eine solche Darstellung bekannt. Hier treten dann Kugelflächenfunktionen und sphärische Besselfunktionen auf.
Zur genaueren Beschreibung des Messvorgangs führen wir nun eine neue Koordinatendarstellung ein. Wir setzen bei dem Messabstand z und der Einfallsrichtung α die neue Darstellung

$$x = z\alpha + s \quad \text{mit } s \in \alpha^\perp.$$

Der Wert s ist nun die Koordinate auf dem Detektor. Wir interpretieren $\alpha^\perp$ als Menge $\alpha^\perp = \{s : \langle s, \alpha\rangle = 0\}$.
Weil die Richtung der einfallenden Welle nur in einer Ebene variiert wird, definieren wir die Menge der einfallenden Richtungen als

$$\tilde{S}^1 = \begin{cases} \{x : \|x\| = 1\} & \text{für } N = 2 \\ \{x : \|x\| = 1 \text{ und } x_3 = 0\} & \text{für } N = 3. \end{cases}$$

3.2.1 Modell M1 - Die Born-Approximation

Nun werden wir das Vorwärtsmodell durch einige Approximationen vereinfachen. Die am häufigsten benutzte Näherung ist die sogenannte Born-Approximation. Hier wird in der Integralgleichung (3.1) das gestreute Feld u_s im Integranden vernachlässigt. Die Born-Approximation stellt für schwache Streuer f eine gute Näherung dar, da das gestreute Feld im Vergleich zum einfallenden Feld sehr klein ist. Wir definieren das Streufeld der Born-Approximation

$$u_{s,1}(x) = -k^2 \int_\Omega G(k\|x-y\|)f(y)u_i(y)dy. \tag{3.2}$$

Mit Hilfe dieser Näherung können wir nun das Modell M1 angeben.

> **Modell M1**: Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^\perp$ der Zusammenhang:
>
> $$u_{s,1}(z\alpha + s) = -k^2 \int_\Omega G(k\|z\alpha + s - y\|) f(y) u_i(y) dy$$
>
> und
>
> $$I_1(z, \alpha, s) = |u_i(z\alpha + s) + u_{s,1}(z\alpha + s)|^2.$$

Der Fehler, der durch diese Näherung auftritt, kann nach oben abgeschätzt werden. Zunächst beweisen wir aber zwei Hilfsaussagen.

Lemma 3.2.1 *Es seien $u, \tilde{u} \in L_\infty(\mathrm{I\!R}^N)$ mit $\|u - \tilde{u}\|_{L_\infty} \le \epsilon$, dann gilt*

$$\Big| |u_i(x) + u(x)|^2 - |u_i(x) + \tilde{u}(x)|^2 \Big| \le 2\epsilon(1 + \|u\|_{L_\infty}) + \epsilon^2.$$

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned}
&\Big| |u_i(x) + u(x)|^2 - |u_i(x) + \tilde{u}(x)|^2 \Big| \\
&\qquad = \Big| 2\mathrm{Re}\Big\{\overline{u_i(x)}(u(x) - \tilde{u}(x)\Big)\} + |u(x)|^2 - |\tilde{u}(x)|^2 \Big| \\
&\qquad \le \Big| 2\epsilon + |u(x)|^2 - |u(x) + (\tilde{u}(x) - u(x))|^2 \Big|.
\end{aligned}$$

Hieraus erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\Big| |u_i(x) + u(x)|^2 - |u_i(x) + \tilde{u}(x)|^2 \Big| \\
&\qquad \le \Big| 2\epsilon - 2\mathrm{Re}\Big\{\overline{u(x)}(\tilde{u}(x) - u(x))\Big\} - |(\tilde{u}(x) - u(x))|^2 \Big| \\
&\qquad \le 2\epsilon(1 + \|u\|_{L_\infty}) + \epsilon^2.
\end{aligned}$$

□

Wir bezeichnen die Kugel um a mit Radius ρ durch

$$B_\rho(a) = \{x : \|x - a\| \le \rho\}.$$

Um die Aussage des folgenden Lemmas übersichtlicher darzustellen, setzen wir für Funktionen f mit kompaktem Träger, $\text{supp}\{f\} \subset B_\rho(0)$, bei $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ den Wert

$$h_\infty = \begin{cases} \frac{\pi k^2}{2} \|f\|_{L_\infty} \int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|dr & \text{für } N = 2 \\ \frac{k^2}{2} \|f\|_{L_\infty} \rho^2 & \text{für } N = 3 \end{cases}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ den Wert

$$h_2 = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi} k^2}{2\sqrt{2}} \|f\|_{L_2} \left(\int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|^2 dr \right)^{1/2} & \text{für } N = 2 \\ \frac{k^2}{\sqrt{4\pi}} \|f\|_{L_2} \sqrt{\rho} & \text{für } N = 3. \end{cases}$$

Lemma 3.2.2 *Es sei der Träger supp*$\{f\} \subset B_\rho(0)$. *Dann gelten für* $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_\infty < 1$$

die Ungleichungen

$$\|u_s - u_{s,1}\|_{L_\infty} \leq \frac{h_\infty^2}{1 - h_\infty}$$

sowie

$$\|u_s\|_{L_\infty} \leq \frac{h_\infty}{1 - h_\infty}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_2 < 1$$

die Ungleichungen

$$\|u_s - u_{s,1}\|_{L_\infty} \leq \frac{h_2^2}{1 - h_2}$$

sowie

$$\|u_s\|_{L_\infty} \leq \frac{h_2}{1 - h_2}.$$

Beweis: Wir führen den Beweis für zwei Raumdimensionen durch. Die Berechnungen zum Fall $N = 3$ verlaufen vollkommen analog.
Der Fehler zwischen dem exakten Streufeld und dem Streufeld der Born-Approximation ist für $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$

$$\begin{aligned} \|u_s - u_{s,1}\|_{L_\infty} &\leq \sup_x \left| \frac{k^2}{4} \int_\Omega H_0^{(1)}(k\|x - y\|) f(y) u_s(y) dy \right| \\ &\leq \frac{\pi k^2}{2} \|f\|_{L_\infty} \|u_s\|_{L_\infty} \int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|dr \end{aligned}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$

$$\|u_s - u_{s,1}\|_{L_\infty} \leq \frac{\sqrt{\pi} k^2}{2\sqrt{2}} \|f\|_{L_2} \|u_s\|_{L_\infty} \left(\int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|^2 dr \right)^{1/2}.$$

Ist

$$\|f\|_{L_\infty} < \frac{2}{\pi k^2 \int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|dr},$$

dann folgt

$$\begin{aligned}
\|u_s\|_{L_\infty} &\leq \sup_x \left\{ \frac{k^2}{4} \int_\Omega |H_0^1(k\|x-y\|)|\, |f(y)|\, |u_i(y) + u_s(y)|dy \right\} \\
&\leq \frac{k^2}{4} \|f\|_{L_\infty} (1 + \|u_s\|_{L_\infty}) \sup_x \left\{ \int_\Omega |H_0^1(k\|x-y\|)|dy \right\} \\
&\leq \frac{k^2}{4} \|f\|_{L_\infty} (1 + \|u_s\|_{L_\infty}) 2\pi \int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|dr.
\end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir

$$\|u_s\|_{L_\infty} \leq \frac{\frac{\pi k^2}{2} \|f\|_{L_\infty} \int_0^\rho r|H_0^1(kr)|dr}{1 - \frac{\pi k^2}{2} \|f\|_{L_\infty} \int_0^\rho r|H_0^1(kr)|dr}.$$

Gilt

$$\|f\|_{L_2} < \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} k^2 \left(\int_0^\rho r|H_0^{(1)}(kr)|^2 dr \right)^{1/2}},$$

dann ist

$$\begin{aligned}
\|u_s\|_{L_\infty} &\leq \sup_x \left\{ \frac{k^2}{4} \int_\Omega |H_0^1(k\|x-y\|)|\, |f(y)|\, |u_i(y) + u_s(y)|dy \right\} \\
&\leq \frac{k^2}{4} (1 + \|u_s\|_{L_\infty}) \sup_x \left\{ \int_\Omega |H_0^1(k\|x-y\|) f(y)|dy \right\} \\
&\leq \frac{k^2}{4} (1 + \|u_s\|_{L_\infty}) \sup_x \left\{ \int_\Omega |H_0^1(k\|x-y\|)|^2 dy \int_\Omega |f(y)|^2 dy \right\}^{1/2} \\
&\leq \frac{k^2}{4} \|f\|_{L_2} (1 + \|u_s\|_{L_\infty}) \sqrt{2\pi} \left(\int_0^\rho r|H_0^1(kr)|^2 dr \right)^{1/2}
\end{aligned}$$

und es ergibt sich

$$\|u_s\|_{L_\infty} \leq \frac{\frac{\sqrt{\pi}k^2}{2\sqrt{2}} \|f\|_{L_2} (\int_0^\rho r|H_0^1(kr)|^2 dr)^{1/2}}{1 - \frac{\sqrt{\pi}k^2}{2\sqrt{2}} \|f\|_{L_2} (\int_0^\rho r|H_0^1(kr)|^2 dr)^{1/2}}.$$

□

Leider ist die obige Abschätzung sehr grob, denn in den numerischen Tests zeigte sich, dass selbst für Werte von $h_\infty, h_2 \approx 100$ die Born-Approximation das Streufeld sehr genau wiedergab.
Nehmen wir nun die beiden Aussagen der Lemmata zusammen, dann erhalten wir eine Fehlerabschätzung für das Modell M1.

Satz 3.2.3 *Es sei der Träger* $supp\{f\} \subset B_\rho(0)$. *Dann gilt für* $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_\infty < 1$$

die Abschätzung

$$\|I - I_1\|_{L_\infty} \leq \frac{h_\infty^2(2 + h_\infty^2)}{(1 - h_\infty)^2}$$

bzw für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_2 < 1$$

die Abschätzung

$$\|I - I_1\|_{L_\infty} \leq \frac{h_2^2(2 + h_2^2)}{(1 - h_2)^2}.$$

Ein wichtiges Resultat über die Born-Approxmiation ist der Propagationssatz (siehe [40]). Wir formulieren ihn hier in einer abgeschwächten From:

Satz 3.2.4 (Propagationssatz)
Es sei $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *und* $supp\{f\} \subset B_z(0)$, *dann gilt mit*

$$a(\sigma) = \sqrt{k^2 - \|\sigma\|^2}$$

und $\sigma \in \alpha^\perp$ *sowie* $\|\sigma\| \leq k$ *der Zusammenhang*

$$\mathcal{F}_{N-1}u_{s,1}(\alpha, \sigma) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \frac{-ik^2}{a(\sigma)} e^{iza(\sigma)} \mathcal{F}_N f((a(\sigma) - k)\alpha + \sigma).$$

Die Kurve, die durch die Funktion $((a(\sigma) - k)\alpha + \sigma)$ bei festem α beschrieben wird, heißt auch *Ewald-Sphäre.*

Um synthetische Daten zu erzeugen, können wir das Integral (3.2) numerisch auswerten. Allerdings ist dies wegen der großen Wellenzahl k und einer dementsprechend notwendigen feinen Diskretisierung nicht durchführbar. Auf der anderen Seite bietet sich aber der Propagationssatz zur Datengenerierung an. Da die Fouriertransformation von einfachen geometrischen Objekten, wie Rechtecken und Ellipsen, analytisch zu berechnen ist, können Phantomdaten mit dem Modell M1 und dem Propagationssatz schnell bestimmt werden.

3.2.2 Modell M2 - Born-Approximation mit linearisierter Intensität

Die nächste Abschwächung, die zum zweiten Modell führt, ist die Vernachlässigung der quadratischen Anteile $|u_{s,1}|^2$ in der Intensität I_1. Es ist

$$\begin{aligned} |u_i + u_{s,1}|^2 &= 1 + u_i\overline{u_{s,1}} + \overline{u_i}u_{s,1} + |u_{s,1}|^2 \\ &\approx 1 + u_i\overline{u_{s,1}} + \overline{u_i}u_{s,1}. \end{aligned}$$

Modell 2 (M2): Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^{\perp}$ der Zusammenhang

$$u_{s,1}(z\alpha + s) = -k^2 \int_{\Omega} G(k\|z\alpha + s - y\|) f(y) u_i(y) dy$$

und

$$I_2(z, \alpha, s) = 1 + 2 \text{ Re}\left(u_i(z\alpha + s)\overline{u_{s,1}(z\alpha + s)}\right).$$

Auch hier können wir sehr leicht eine Fehlerabschätzung angeben.

Satz 3.2.5 *Es sei* $supp\{f\} \subset B_{\rho}(0)$. *Dann gilt für* $f \in L_{\infty}(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_{\infty} < 1$$

die Abschätzung

$$\|I - I_2\|_{L_{\infty}} \leq \frac{(3 - 2h_{\infty})h_{\infty}^2}{(1 - h_{\infty})^2}$$

bzw. für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *mit*

$$h_2 < 1$$

die Abschätzung

$$\|I - I_2\|_{L_{\infty}} \leq \frac{(3 - 2h_2)h_2^2}{(1 - h_2)^2}.$$

Beweis: Es ist für $c = h_\infty$ oder $c = h_2$ mit Lemma 3.2.2:

$$\begin{aligned}
&|I(z,\alpha,s) - I_2(z,\alpha,s)| \\
&\quad \leq |u_i(z,\alpha,s) + u_s(z,\alpha,s)|^2 - \left(1 + 2\mathrm{Re}\left(\overline{u_i(z,\alpha,s)}u_{s,1}(z,\alpha,s)\right)\right) \\
&\quad = 2\mathrm{Re}\left(\overline{u_i(z,\alpha,s)}(u_s(z,\alpha,s) - u_{s,1}(z,\alpha,s))\right) + |u_s(z,\alpha,s)|^2 \\
&\quad \leq 2\frac{c^2}{1-c} + \frac{c^2}{(1-c)^2} \\
&\quad \leq \frac{(3-2c)c^2}{(1-c)^2}.
\end{aligned}$$

□

Betrachten wir die beiden Fehlerabschätzungen in Satz 3.2.3 und 3.2.5, so fällt auf, dass die Ordnung des Fehlers in beiden Modellen quadratisch in h_∞ bzw. h_2 ist. Allerdings ist der Koeffizient bei dem Modell M2 mit $(3 - 2h_{\infty\backslash 2})$ im Besonderen für kleine Werte von h_∞ bzw. h_2 größer als bei Modell M1. Die Approximation an die exakte Intensität ist also schlechter.

3.2.3 Modell M3 - Die Parabelnäherung

Das dritte Modell wird von vielen Autoren (siehe z.B. [9]) zur Erzeugung von synthetischen Daten angewendet. Es baut auf der Born-Approximation auf und nutzt die speziellen Parameter bei der Phasentomographie, unter anderem das Verhältnis des Messabstandes zur Objektgröße. Im zweidimensionalen Fall wird zunächst die Hankelfunktion durch

$$H_0^{(1)}(k\|x-y\|) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k\|x-y\|}} e^{ik\|x-y\| - 1/4 i\pi} \quad \text{für } k\|x-y\| >> 1$$

genähert. Das neue Wellenfeld ist jetzt

$$u_{s,2}(z\alpha + s) = -\frac{\sqrt{i}k^2}{4}\int_\Omega \sqrt{\frac{2}{\pi k\|z\alpha + s - y\|}} e^{ik\|z\alpha+s-y\|} f(y) u_i(y) dy.$$

Diese Darstellung hat sehr große Ähnlichkeit mit der Born-Approximation im dreidimensionalen. Aus diesem Grund gilt die folgende Näherung sowohl im zwei- wie auch im dreidimensionalen.
Wir zerlegen $y = \tilde{y} + t\alpha$ mit $\tilde{y} \in \alpha^\perp$ und, weil der Detektorabstand sehr viel größer ist als der Objektdurchmesser, approximieren die Norm $\|z\alpha + s - y\|$ im Nenner des auftretenden Bruches durch

$$\|z\alpha + s - y\| \approx z,$$

sowie die Norm $\|z\alpha + s - y\|$ in der Exponentialfunktion durch

$$\begin{aligned} \|z\alpha + s - y\| &= \sqrt{\|s-\tilde{y}\|^2 + (z-t)^2} \\ &\approx z + \frac{1}{2}\left(\frac{\|s-\tilde{y}\|^2}{z} - 2t\right). \end{aligned}$$

Mit der Identität $u_i(y) = e^{ikt}$ erhalten wir

$$u_{s,3}\left(z\alpha + s\right) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}} e^{ikz} \int_{\alpha^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} f\left(t\alpha + \tilde{y}\right) dt d\tilde{y} & \text{für } N = 2 \\ -\frac{k^2}{4\pi z} e^{ikz} \int_{\alpha^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} f\left(t\alpha + \tilde{y}\right) dt d\tilde{y} & \text{für } N = 3 \end{cases}.$$

Wir erkennen, dass sich die Berechnung des Streufeldes $u_{s,3}$ aus zwei Transformationen zusammensetzt. Bei der inneren Integration handelt es sich um die Röntgentransformation, bei der äußeren um das Fresnel'sche-Beugungsintegral. Um die Darstellung übersichtlicher zu gestalten, definieren wir die beiden Operatoren $\mathcal{P}$ und P_z, indem wir für $s \in \alpha^\perp$ die Röntgentransformation

$$\mathcal{P}f(\alpha, s) = \int_{\mathbb{R}} f(t\alpha + s) dt$$

und den Propagationsoperator

$$P_z g(\alpha, s) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{i}k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}} e^{ikz} \int_{\alpha^\perp} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} g\left(\alpha, \tilde{y}\right) d\tilde{y} & \text{für } N = 2 \\ -\frac{k^2}{4\pi z} e^{ikz} \int_{\alpha^\perp} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} g\left(\alpha, \tilde{y}\right) d\tilde{y} & \text{für } N = 3 \end{cases}.$$

setzen.
Hieraus resultiert schließlich das dritte Modell.

> **Modell 3 (M3)**: Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^\perp$ der Zusammenhang
>
> $$u_{s,3}\left(z\alpha + s\right) = P_z \mathcal{P} f\left(\alpha, s\right)$$
>
> und
>
> $$I_3(z, \alpha, s) = \left|u_i(z\alpha + s) + u_{s,3}(z\alpha + s)\right|^2.$$

Das Modell M3 hat eine sehr anschauliche Bedeutung. Die Anwendung der Röntgentransformation projiziert das Objekt f in die Ebene $z = 0$. Durch Frensel-Beugung an dieser Ebene wird nun das einfallende Wellenfeld auf den Detektor abgebildet. Dies entspricht genau dem vereinfachten Vorwärtsmodell aus dem ersten Kapitel (siehe Abbildung 1.4).
Auch hier diskutieren wir den Approximationsfehler des Modells. Wir beginnen mit einer Abschätzung für die Hankelfunktion im zweidimensionalen Fall.

Lemma 3.2.6 *Es seien $N = 2$ und der Träger $supp\{f\} \subset B_\rho(0)$. Es gilt bei $z > \rho$:*

$$\left| H_0^{(1)}(k\|x-y\|) - \sqrt{\frac{2}{\pi k\|x-y\|}} e^{ik\|x-y\|-1/4i\pi} \right| \leq \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)$$

1. *und für $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ die Fehlerschranke*

$$\|u_{s,1} - u_{s,2}\|_{L_\infty} \leq \frac{\pi k^2 \rho^2}{4} \|f\|_{L_\infty} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right)$$

2. *sowie für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ die Fehlerschranke*

$$\|u_{s,1} - u_{s,2}\|_{L_\infty} \leq \frac{\sqrt{\pi} k^2 \rho}{4} \|f\|_{L_2} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right).$$

Beweis: Nach [2] gilt

$$\left| H_0^{(1)}(k\|x-y\|) - \sqrt{\frac{2}{\pi k\|x-y\|}} e^{ik\|x-y\|-1/4i\pi} \right| \leq \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 \|x-y\|^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k\|x-y\|)^{5/2}}\right).$$

Da bei der hier gegebenen Messanordnung $\|x-y\| > z - \rho$ ist, folgt

$$\left| H_0^{(1)}(k\|x-y\|) - \sqrt{\frac{2}{\pi k\|x-y\|}} e^{ik\|x-y\|-1/4i\pi} \right| \leq \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right).$$

Insgesamt erhalten wir für $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ die Fehlerschranke

$$\|u_{s,1} - u_{s,2}\|_{L_\infty} \leq \frac{\pi k^2 \rho^2}{4} \|f\|_{L_\infty} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right)$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ die Fehlerschranke

$$\|u_{s,1} - u_{s,2}\|_{L_\infty} \leq \frac{\sqrt{\pi} k^2 \rho}{4} \|f\|_{L_2} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3 (z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right).$$

□

Setzen wir nun die charakteristischen Größen der Phasenkontrasttomographie, siehe Abschnitt 3.1, in die obige Fehlerabschätzung ein, dann sehen wir, dass der Fehler extrem klein ist. Somit kann die Näherung an die Hankelfunktion ohne Bedenken durchgeführt werden.

Messen wir nun die Differenz zwischen $u_{s,2}$ und $u_{s,3}$:

Lemma 3.2.7 *Es seien supp*$\{f\} \subset B_\rho(0)$ *und* $z > \rho$. *Dann gibt es ein Polynom* Π_2 *homogen vom Grad 2 und ein Polynom* Π_4 *homogen vom Grad 4, so dass folgende Fehlerschranken gelten:*

1. *im Fall* $N = 2$ *für* $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *die Fehlerschranke*

$$\begin{aligned} &|u_{s,2}(z\alpha + s) - u_{s,3}(z\alpha + s)| \\ &\quad \leq \frac{\sqrt{\pi}k^{3/2}\rho^2}{2\sqrt{2z}}\|f\|_{L_\infty}\left\{\frac{\rho}{2z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right. \\ &\qquad \left. +k\frac{(\|s\| + \rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}, \end{aligned}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *die Fehlerschranke*

$$\begin{aligned} &|u_{s,2}(z\alpha + s) - u_{s,3}(z\alpha + s)| \\ &\quad \leq \frac{k^{3/2}\rho}{2\sqrt{2z}}\|f\|_{L_2}\left\{\frac{\rho}{2z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right. \\ &\qquad \left. +k\frac{(\|s\| + \rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}, \end{aligned}$$

2. *im Fall* $N = 3$ *für* $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *die Fehlerschranke*

$$\begin{aligned} &|u_{s,1}(z\alpha + s) - u_{s,3}(z\alpha + s)| \\ &\quad \leq \frac{k^2\rho^3}{3z}\|f\|_{L_\infty}\left\{\frac{\rho}{z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right. \\ &\qquad \left. +k\frac{(\|s\| + \rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}, \end{aligned}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *die Fehlerschranke*

$$\begin{aligned} &|u_{s,1}(z\alpha + s) - u_{s,3}(z\alpha + s)| \\ &\quad \leq \frac{k^2\rho^{3/2}}{\sqrt{12\pi z}}\|f\|_{L_2}\left\{\frac{\rho}{z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right. \\ &\qquad \left. +k\frac{(\|s\| + \rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z}, \frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}. \end{aligned}$$

Beweis: Wir beweisen wieder nur die Aussage für $N = 2$. Der dreidimensionale Fall verläuft analog.

Betrachten wir zunächst

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\|s-\tilde{y}\|^2+(z-t)^2}}} &= \frac{1}{\sqrt{z\sqrt{1+\|s-\tilde{y}\|^2/z^2-2t/z+t^2/z^2}}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{z}}\left(1+\frac{t}{2z}+\mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\|\tilde{y}\|}{z},\frac{t}{z}\right)\right)\right).\end{aligned}$$

Hierbei ist Π_2 ein Polynom homogen vom Grad 2.
Desweiteren ist

$$\begin{aligned}\sqrt{\|s-\tilde{y}\|^2+(z-t)^2} &= z+\frac{1}{2}\left(\frac{\|s-\tilde{y}\|^2}{z}-2t\right)+\frac{\|s-\tilde{y}\|^2 t}{2z^2}+\frac{t^3}{2z^2}-\frac{t^3}{2z^2} \\ &\quad +z\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\|\tilde{y}\|}{z},\frac{t}{z}\right)\right).\end{aligned}$$

Das Polynom Π_4 ist homogen vom Grad 4.
Der Abstand zwischen den beiden Streufeldern berechnet sich zu

$$\begin{aligned}&|u_{s,2}(z\alpha+s)-u_{s,3}(z\alpha+s)| \\ &= \left|\frac{k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi}}\int_{\alpha^\perp}\int_{\mathrm{I\!R}}\left(\frac{1}{\sqrt{\|z\alpha+s-t\alpha-\tilde{y}\|}}e^{ik\|z\alpha+s-t\alpha-\tilde{y}\|+ikt}-\frac{1}{\sqrt{z}}e^{ikz+i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2}\right)\right. \\ &\qquad \left.\cdot f(t\alpha+\tilde{y})dtd\tilde{y}\right| \\ &\le \frac{k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi}}\sup\left|\frac{1}{\sqrt{\|z\alpha+s-t\alpha-\tilde{y}\|}}e^{ik\|z\alpha+s-t\alpha-\tilde{y}\|+ikt}-\frac{1}{\sqrt{z}}e^{ikz+i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2}\right| \\ &\qquad \cdot\int_{\alpha^\perp}\int_{\mathrm{I\!R}}|f(t\alpha+\tilde{y})|\,dtd\tilde{y} \\ &\le \frac{k^{3/2}}{2\sqrt{2\pi z}}\left\{\frac{\rho}{2z}+\mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)+k\frac{(\|s\|+\rho)^2\rho}{2z^2}+\right. \\ &\qquad \left. zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}\int_{\alpha^\perp}\int_{\mathrm{I\!R}}|f(t\alpha+\tilde{y})|\,dtd\tilde{y}.\end{aligned}$$

Mittels der schon mehrfach angewandten Abschätzungen für das verbleibende Integral erhalten wir die Aussagen des Lemmas.

□

Auf den ersten Blick scheint es verwunderlich, dass es nicht möglich ist, eine Abschätzung unabhängig von $\|s\|$ anzugegeben. Bedenken wir aber, dass durch die durchgeführten Näherungen Kreise durch Parabeln ersetzt werden, so ist es einsichtig, dass der Fehler von der Norm $\|s\|$ abhängen muß.

Diese Fehlerabschätzung zeigt uns außerdem, dass für Objekte einer Größe $\rho \approx 10^{-4}$ die Parabelnäherung eine gute Näherung an die Born-Approximation darstellt. Sollte allerdings der Objektradius über einen Wert von $\rho \sim 10^{-2}$ steigen, wächst die Fehlerschranke in Größenordnungen über die des gestreuten Feldes. In einem solchen Fall ist die Parabelnäherung zur Modellierung dann weniger geeignet.
Um den Abstand zwischen den beiden Intensitäten I und I_3 etwas übersichtlicher darzustellen, führen wir die Abkürzungen

$$\varepsilon_\infty(s) = \begin{cases} \frac{\pi k^2\rho^2}{4}\|f\|_{L_\infty}\left\{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3(z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right) + \\ \frac{\sqrt{\pi}k^{3/2}\rho^2}{2\sqrt{2z}}\|f\|_{L_\infty}\left(\frac{\rho}{2z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right) + \\ k\frac{(\|s\|+\rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}, & \text{für } N=2 \\ \\ \frac{k^2\rho^3}{3z}\|f\|_{L_\infty}\left\{\frac{\rho}{z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right) + \\ k\frac{(\|s\|+\rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)\right\} & \text{für } N=3 \end{cases}$$

und

$$\varepsilon_2(s) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}k^2\rho}{4}\|f\|_{L_2}\left\{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3(z-\rho)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z-\rho))^{5/2}}\right)\right) + \\ \frac{k^{3/2}\rho}{2\sqrt{2z}}\|f\|_{L_2}\left(\frac{\rho}{2z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right) + \\ k\frac{(\|s\|+\rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)\right\}, & \text{für } N=2 \\ \\ \frac{k^2\rho^{3/2}}{\sqrt{12\pi z}}\|f\|_{L_2}\left\{\frac{\rho}{z} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right) + \\ k\frac{(\|s\|+\rho)^2\rho}{2z^2} + zk\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|s\|}{z},\frac{\rho}{z}\right)\right)\right\} & \text{für } N=3 \end{cases}$$

ein.

Satz 3.2.8 *Es seien* $supp\{f\} \subset B_\rho(0)$ *und* $z > \rho$.
Für $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *mit* $h_\infty < 1$ *gilt dann*

$$\begin{aligned} &|I(z,\alpha,s) - I_3(z,\alpha,s)| \\ &\qquad \leq \frac{h_\infty^2(2+h_\infty^2)}{(1-h_\infty^2)} + \frac{2}{1-h_\infty}\varepsilon_\infty(s) + \varepsilon_\infty(s)^2 \end{aligned}$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *mit* $h_2 < 1$ *gilt*

$$\begin{aligned} &|I(z,\alpha,s) - I_3(z,\alpha,s)| \\ &\qquad \leq \frac{h_2^2(2+h_2^2)}{(1-h_2)^2} + \frac{2}{1-h_2}\varepsilon_2(s) + \varepsilon_2(s)^2. \end{aligned}$$

Beweis: Die Ausage folgt mit Hilfe der Dreiecksungleichung unmittelbar aus den Lemmata 3.2.1, 3.2.2, 3.2.6 und 3.2.7.

□

Bereits im zweiten Kapitel haben wir die Fouriertransformation des Propagationsoperators berechnet. Dieses Ergebnis können wir nun verwenden, um für das Streufeld $u_{s,3}$ einen Projektionssatz anzugeben, d.h. wir stellen einen Zusammenhang zwischen der Fouriertransformierten des Streufeldes $u_{s,3}$ und der Fouriertransformierten der Objektfunktion f her.

Satz 3.2.9 *Es seien $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ und $z > 0$, dann gilt für $\sigma \in \alpha^\perp$*

$$\mathcal{F}_{N-1} u_{s,3}(z, \alpha, \sigma) = -\frac{ik}{2}(2\pi)^{1/2} e^{ikz} e^{-i\frac{z}{2k}\|\sigma\|^2} \mathcal{F}_N f(\sigma).$$

Beweis: Aus Lemma 2.1.2 erhalten wir (im Fall $N = 3$ wenden wir Lemma 2.1.2 zweimal an)

$$\mathcal{F}_{N-1} u_{s,3}(z, \alpha, \sigma) = -\frac{ik}{2} e^{ikz} e^{-i\frac{z}{2k}\|\sigma\|^2} \mathcal{F}_{N-1} \mathcal{P} f(\alpha, \sigma).$$

Nun ergibt sich die Aussage des Satzes dirket aus dem Projektionssatz für die Röntgentransformation.

□

Aus diesem Ergebnis lässt sich der Grenzfall zur herkömmlichen Röntgentomographie leicht ersehen, denn im Fall, dass $z \to 0$, erhalten wir bis auf einen Vorfaktor den Projektionssatz der Röntgentransformation.

3.2.4 Modell M4 - Parabelnäherung mit linearisierter Intensität

Auch bei Modell M3 können wir eine lineare Näherung durchführen, indem wir die quadratischen Anteile $|u_{s,3}|^2$ vernachlässigen.

> **Modell 4 (M4)**: Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^\perp$ der Zusammenhang
>
> $$u_{s,3}\,(z\alpha + s) = P_z \mathcal{P} f(\alpha, s)$$
>
> und
>
> $$I_4(z, \alpha, s) = 1 + 2\ \mathrm{Re}\left(u_i(z\alpha + s)\overline{u_{s,3}(z\alpha + s)}\right).$$

Mit denselben Ideen wie in Satz 3.2.5 lässt sich auch für dieses Modell eine Abschätzung angeben.

Satz 3.2.10 *Es seien* $supp\{f\} \subset B_\rho(0)$ *und* $z > \rho$.
Für $f \in L_\infty(\mathbb{R}^N)$ *mit* $h_\infty < 1$ *gilt dann*

$$|I(z,\alpha,s) - I_4(z,\alpha,s)| \leq \frac{(3-2h_\infty)h_\infty^2}{(1-h_\infty)^2} + 2\varepsilon_\infty(s)$$

und für $f \in L_2(\mathbb{R}^N)$ *mit* $h_2 < 1$ *gilt*

$$|I(z,\alpha,s) - I_4(z,\alpha,s)| \leq \frac{(3-2h_2)h_2^2}{(1-h_2)^2} + 2\varepsilon_2(s).$$

3.3 Rekonstruktionsverfahren zu den angegebenen Modellen

Nachdem wir die verschiedenen Modelle auf ihre Genauigkeit hin untersucht haben, wenden wir uns nun den Methoden zur Rekonstruktion der Objektfunktion f zu. Wir starten mit der sogenannten Parabolid-Methode, die eine der Standardmethoden bei der Phasenkontrasttomographie darstellt.
Daraufhin leiten wir ein neues Verfahren mit Hilfe der Approximativen Inversen her. Zusätzlich nutzen wir einige Verbesserungen wie z.B. die schnelle Rückprojektion.
Die nichtlinearen Verfahren basieren auf dem im zweiten Kapitel vorgestellten GN-Algorithmus.
Im Folgenden werden wir mit I^{exp} immer die gemessenen Intensitäten bezeichnen, die sich entweder aus den synthetischen Daten ergeben oder im realen Experiment gemessen wurden. Weiter definieren wir noch die Funktion

$$g^{exp}(z,\alpha,s) = I^{exp}(z,\alpha,s) - 1.$$

3.3.1 Die Paraboloid-Methode und das MOR-Verfahren

Wir beginnen mit dem Modell M4, das auf Grund der vielen Approximationen am einfachsten zu behandeln ist. Die Intensität in Modell M4 ist gegeben durch

$$I_4(z,\alpha,s) = 1 + 2\mathrm{Re}\left(u_i(z\alpha+s)\overline{u_{s,3}(z\alpha+s)}\right).$$

Um die Herleitung im weiteren Verlauf übersichtlicher darzustellen, führen wir die Datenfunktion g_4 als

$$g_4(z,\alpha,s) = I_4(z,\alpha,s) - 1$$

ein. Die Fouriertransformierte von g_4 ist wegen Lemma 2.1.2

$$\mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,\sigma) = -\frac{ik}{2}e^{-i\frac{z}{2k}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma) + \frac{ik}{2}e^{i\frac{z}{2k}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)}. \quad (3.3)$$

Eine wichtige Frage ist, wie viele Messabstände nötig sind, um das Objekt eindeutig rekonstruieren zu können. Im Gegensatz zu der Problemstellung im zweiten Kapitel, bei der wir keine Eindeutigkeit mit einer endlichen Anzahl von Messabständen feststellen konnten, reichen bei dem Modell M4 bereits zwei Messabstände aus.

Satz 3.3.1 *Es seien $z_1, z_2 > 0$ verschieden und f habe kompakten Träger. Dann lässt sich die Funktion f eindeutig aus den Messwerten $g_4(z_1, \cdot, \cdot)$ und $g_4(z_2, \cdot, \cdot)$ bestimmen.*

Beweis: Wegen Formel (3.3) gilt für die beiden Messabstände z_1 und z_2

$$\frac{ik}{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{z_1}{2k}\|\sigma\|^2} & e^{i\frac{z_1}{2k}\|\sigma\|^2} \\ -e^{-i\frac{z_2}{2k}\|\sigma\|^2} & e^{i\frac{z_2}{2k}\|\sigma\|^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma) \\ \mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}g_4(z_1,\alpha,\sigma) \\ \mathcal{F}_{N-1}g_4(z_2,\alpha,\sigma) \end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

Die Determinate der Matrix ist ungleich 0 für alle σ mit

$$\sin\left(\frac{(z_1 - z_2)\|\sigma\|^2}{2k}\right) \neq 0.$$

Daher besitzt das System für diese Werte von σ genau eine Lösung.
Da die Objektfunktion f kompakten Träger hat, ist auch der Träger von $\mathcal{P}f$ kompakt. Hieraus folgt, dass $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)$ komplex analytisch in σ ist.
Weil das System (3.4) auf einer nichtleeren offenen Menge lösbar ist, wird dadurch die Funktion $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)$ eindeutig festgelegt.
Auf Grund der Injektivität von $\mathcal{F}_{N-1}$ und $\mathcal{P}$ ist schließlich f eindeutig bestimmt.

□

Wegen dieses theoretischen Resultates sind also Messungen mit zwei verschiedenen Abständen zur Bestimmung von f ausreichend, allerdings gibt der Satz keine Auskunft über die numerische Stabilität. In der Tat zeigt sich in numerischen Tests, dass eine stabile Rekonstruktion ab vier verschiedenen Messabständen möglich ist.
Betrachten wir nun den Fall von mehreren Messabständen $z_1, .., z_K$, die gleichzeitig in die Inversion eingehen. Es sei

$$A_{z_1,..,z_K}(\sigma) = \frac{ik}{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{z_1\|\sigma\|^2}{2k}} & e^{i\frac{z_1\|\sigma\|^2}{2k}} \\ \vdots & \vdots \\ -e^{-i\frac{z_K\|\sigma\|^2}{2k}} & e^{i\frac{z_K\|\sigma\|^2}{2k}} \end{pmatrix}. \tag{3.5}$$

Die Matrix A^*A ist gegeben durch

$$\left(A^*_{z_1,..,z_K}A_{z_1,..,z_K}\right)(\sigma) = \frac{k^2}{4} \begin{pmatrix} K & -\sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}} \\ -\sum_{l=1}^K e^{-i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}} & K \end{pmatrix}.$$

Die Normalgleichung für mehrere Messabstände hat folgendes Aussehen:

$$\left(A^*_{z_1,..,z_K}A_{z_1,..,z_K}\right)(\sigma)\begin{pmatrix}\frac{\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)}{\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)}\end{pmatrix} = A^*_{z_1,..,z_K}(\sigma)\begin{pmatrix}\mathcal{F}_{N-1}g_4(z_1,\alpha,\sigma)\\ \vdots \\ \mathcal{F}_{N-1}g_4(z_K,\alpha,\sigma)\end{pmatrix} \tag{3.6}$$

Die Inverse der Matrix $A^*_{z_1,..,z_K}A_{z_1,..,z_K}$ ist

$$\left(A^*_{z_1,..,z_K}A_{z_1,..,z_K}\right)^{-1}(\sigma) =$$
$$\frac{4}{k^2\left(K^2-\left|\sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right|^2\right)}\begin{pmatrix} K & \sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}} \\ \sum_{l=1}^K e^{-i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}} & K\end{pmatrix}.$$

Die Standardmethode, die Paraboloid-Methode, verwendet die Inverse $\left(A^*_{z_1,..,z_K}A_{z_1,..,z_K}\right)^{-1}$ und umgeht die Nullstellen des Nenners, indem auf $K^2 - \left|\sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right|$ ein Wert γ addiert wird. Wir erhalten:

Algorithmus 3.3.2 (Paraboloid-Methode (PA))

- *Berechne für jede Richtung* α

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{N-1}w(\alpha,\sigma) &= \frac{4}{k^2}\frac{1}{(K^2-\left|\sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right|^2+\gamma)}\left(K\ ,\ \sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right)\\ &\quad\cdot A^*_{z_1,..,z_K}\begin{pmatrix}\mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_1,\alpha,\sigma)\\ \vdots\\ \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_K,\alpha,\sigma)\end{pmatrix}\end{aligned}$$

- *Benutze für alle Richtungen* α *inverse Fouriertransformation, um* w *zu bestimmen*

- *Wende gefilterte Rückprojektion an*

$$f = \mathcal{P}^{-1}w$$

Es fällt direkt auf, dass die Paraboloid-Methode die hohen Frequnzen von $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f$, die im Besonderen anfällig gegenüber Datenfehlern sind, nicht behandelt. Einzig die Singularität in dem Quotienten der Inversen wird berücksichtigt. Es ist deshalb zu erwarten, dass die Paraboloid-Methode auf Datenfehler merklich reagiert.
Ein weiteres Problem ist die Rekonstruktion an der Stelle $\sigma = 0$. Die Matrix

$A^*_{z_1,..,z_K} A_{z_1,..,z_K}$ ist hier für beliebige Messabstände singulär. Eine direkte Rekonstruktion des Wertes $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)$ ist also nicht möglich!
Die einzige Information, die wir erhalten, ist

$$\frac{k}{2}\left(-i\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0) + i\ \mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f(\alpha,0)}\right) = \mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,0).$$

Eine Möglichkeit, die Frequenz $\sigma = 0$ zu korrigieren, ist den Phasenwinkel von $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)$ stetig in $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)$ fortzusetzen. Diese Vorgehensweise begründen wir mit der Stetigkeit von $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)$. Da der Wert

$$-\frac{k}{2}\left(i\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0) - i\ \overline{\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)}\right) = \mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,0)$$

bekannt ist, kann so die Frequenz $\sigma = 0$ angenähert werden. Wir erhalten

$$\mathrm{Re}(i\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)) = -\frac{\mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,0)}{k}$$

und andererseits kennen wir den Phasenwinkel θ

$$e^{i\theta} = \frac{\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)}{|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)|}.$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} |\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)| &= \frac{\mathrm{Re}(i\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0))}{\mathrm{Re}(ie^{i\theta})} \\ &= -\frac{\mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,0)}{k\mathrm{Re}(ie^{i\theta})}. \end{aligned}$$

Somit ist

$$\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0) = -\frac{\mathcal{F}_{N-1}g_4(z,\alpha,0)}{k\mathrm{Re}(ie^{i\theta})}e^{i\theta}.$$

Diese Methode kann aber instabil sein, zum einen falls die Fourierwerte um $\sigma = 0$ sehr klein sind (θ kann nicht zuverlässig bestimmt werden) oder der Wert $\mathrm{Re}(ie^{i\theta})$ nahe bei Null liegt.
Eine Alternative ist $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)$ zunächst auf Null zu setzen. Weil $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,0)$ gerade der Mittelwert von $\mathcal{P}f(\alpha,.)$ ist, kann nachträglich die Funktion $\mathcal{P}f$ entsprechend verschoben werden. Hierzu sind dann aber Zusatzinformationen nötig, z.B. über den Träger von f.

Jetzt werden wir das Verfahren der Approximativen Inversen anwenden, siehe [32, 33, 34]. Zunächst geben wir aber eine kurze Zusammenfassung wie die Approximative Inverse bei vektorwertigen Funktionen eingesetzt wird. Eine genauere

Abhandlung über die Approximative Inverse bei vektorwertigen Funktionen findet sich in [44].
Es sei das Problem gegeben: Gesucht (f_1, f_2) mit

$$\mathcal{B}\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 f_1 + B_2 f_2 \\ B_3 f_1 + B_4 f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Wir wollen eine Näherungslösung für f bei einer gewählten Linse e_γ bestimmen mit

$$E_\gamma \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f_1, e_\gamma\rangle \\ \langle f_2, e_\gamma\rangle \end{pmatrix}.$$

Dazu berechnen wir ψ_1, ψ_2, ψ_3 und ψ_4, so dass

$$\begin{aligned} B_1^*\psi_1 + B_3^*\psi_2 &= e_\gamma \\ B_2^*\psi_1 + B_4^*\psi_2 &= 0 \\ B_1^*\psi_3 + B_3^*\psi_4 &= 0 \\ B_2^*\psi_3 + B_4^*\psi_4 &= e_\gamma. \end{aligned}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \langle b_1, \psi_1\rangle + \langle b_2, \psi_2\rangle \\ \langle b_1, \psi_3\rangle + \langle b_2, \psi_4\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle B_1 f_1 + B_2 f_2, \psi_1\rangle + \langle B_3 f_1 + B_4 f_2, \psi_2\rangle \\ \langle B_1 f_1 + B_2 f_2, \psi_3\rangle + \langle B_3 f_1 + B_4 f_2, \psi_4\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle f_1, B_1^*\psi_1 + B_3^*\psi_2\rangle + \langle f_2, B_2^*\psi_1 + B_4^*\psi_2\rangle \\ \langle f_1, B_1^*\psi_3 + B_3^*\psi_4\rangle + \langle f_2, B_2^*\psi_3 + B_4^*\psi_4\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle f_1, e_\gamma\rangle \\ \langle f_2, e_\gamma\rangle \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Diese Methode können wir nun auf unser Rekonstruktionsproblem übertragen.
Bei mehreren Abständen haben wir das System

$$\begin{pmatrix} e^{-ikz_1} P_{z_1} & e^{ikz_1}\overline{P_{z_1}} \\ \vdots & \vdots \\ e^{-ikz_K} P_{z_K} & e^{ikz_K}\overline{P_{z_K}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}f \\ \overline{\mathcal{P}f} \end{pmatrix}(\alpha, s) = \begin{pmatrix} g_4(z_1, \alpha, s) \\ \vdots \\ g_4(z_K, \alpha, s) \end{pmatrix}$$

zu lösen. Die Normalgleichung ist

$$\begin{pmatrix} \sum_{l=1}^K \overline{P_{z_l}} P_{z_l} & \sum_{l=1}^K e^{2ikz_l}\overline{P_{z_l} P_{z_l}} \\ \sum_{l=1}^K e^{-2ikz_l} P_{z_l} P_{z_l} & \sum_{l=1}^K P_{z_l}\overline{P_{z_l}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}f \\ \overline{\mathcal{P}f} \end{pmatrix}(\alpha, s) =$$

$$\begin{pmatrix} e^{ikz_1}\overline{P_{z_1}} & \cdots & e^{ikz_K}\overline{P_{z_K}} \\ e^{-ikz_1} P_{z_1} & \cdots & e^{-ikz_K} P_{z_K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_4(z_1, \alpha, \cdot) \\ \vdots \\ g_4(z_K, \alpha, \cdot) \end{pmatrix}(s).$$

Nun sind wir in der oben geschilderten Situation und können die Approximative Inverse verwenden. Um ψ_1 und ψ_2 zu berechnen, müssen wir das System

$$\begin{pmatrix} \sum_{l=1}^{K} \overline{P_{z_l}} P_{z_l} & \sum_{l=1}^{K} e^{2ikz_l} \overline{P_{z_l} P_{z_l}} \\ \sum_{l=1}^{K} e^{-2ikz_l} P_{z_l} P_{z_l} & \sum_{l=1}^{K} P_{z_l} \overline{P_{z_l}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_\gamma \\ 0 \end{pmatrix}$$

lösen. Dieses System lässt sich nicht analytisch lösen. Auch der Versuch, die Lösung numerisch zu bestimmen, ist sehr problematisch, weil durch die hohe Wellenzahl k die Kerne der Integraloperatoren stark oszillieren. Eine sehr feine Diskretisierung wäre deshalb nötig, was aber mit heutigen Rechnerkapazitäten nicht zu bewältigen ist.
Ein Mittel, diese Schwierigkeiten zu umgehen, ist das System im Fourierraum zu betrachten. Wir schränken uns nun auf Mollifier vom Typ $e_\gamma(x,y) = e_\gamma(x-y)$ ein und erhalten mit der Notation aus Gleichung (3.5)

$$\left(A^*_{z_1,..,z_K} A_{z_1,..,z_k}\right) \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\psi_1 \\ \mathcal{F}_{N-1}\psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} e_\gamma \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Es ist dann

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\psi_1 \\ \mathcal{F}_{N-1}\psi_2 \end{pmatrix} = (A^*_{z_1,..,z_K} A_{z_1,..,z_K})^{-1} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} e_\gamma \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Wir setzen nun $\mathcal{F}_{N-1}\Psi = A_{z_1,..,z_K} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\psi_1 \\ \mathcal{F}_{N-1}\psi_2 \end{pmatrix}$ und berechnen in dem Hilbertraum $H^K = \underbrace{L_2(\alpha^\perp) \times \cdots \times L_2(\alpha^\perp)}_{K-mal}$ (Definition des Skalarproduktes wie in Satz 2.2.11) den Zusammenhang

$$\begin{aligned}
\left\langle \begin{pmatrix} g_4(z_1,\alpha,\cdot) \\ \vdots \\ g_4(z_K,\alpha,\cdot) \end{pmatrix}, \Psi \right\rangle_{H^K} &= \left\langle \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} g_4(z_1,\alpha,\cdot) \\ \vdots \\ \mathcal{F}_{N-1} g_4(z_K,\alpha,\cdot) \end{pmatrix}, A_{z_1,..,z_K} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\psi_1 \\ \mathcal{F}_{N-1}\psi_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{H^K} \\
&= \left\langle \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} \mathcal{P} f(\alpha,\cdot) \\ \mathcal{F}_{N-1} \overline{\mathcal{P} f(\alpha,\cdot)} \end{pmatrix}, A^*_{z_1,..,z_K} A_{z_1,..z_K} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1}\psi_1 \\ \mathcal{F}_{N-1}\psi_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{H^2} \\
&= \langle \mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P} f, \mathcal{F}_{N-1} e_\gamma \rangle_{L_2} = \langle \mathcal{P} f(\alpha,\cdot), e_\gamma \rangle_{L_2}.
\end{aligned}$$

Die Gleichung für Ψ hat folgende explizite Gestalt

$$\mathcal{F}_{N-1}\Psi(\sigma) = A_{z_1,..,z_K}(\sigma) (A^*_{z_1,..,z_K} A_{z_1,..,z_K})^{-1}(\sigma) \begin{pmatrix} \hat{e}_\gamma(\sigma) \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

$$= \frac{2i\hat{e}_\gamma(\sigma)}{k\left(K^2 - \left|\sum_{l=1}^{K} e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right|^2\right)} \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{z_1\|\sigma\|^2}{2k}}\left(K - \sum_{l=1}^{K} -e^{-i\frac{(z_l-z_1)\|\sigma\|^2}{k}}\right) \\ \vdots \\ e^{-i\frac{z_K\|\sigma\|^2}{2k}}\left(K - \sum_{l=1}^{K} e^{-i\frac{(z_l-z_K)\|\sigma\|^2}{k}}\right) \end{pmatrix}.$$

Genau wie bei der Paraboloid-Methode hat der Bruch an bestimmten Stellen Singularitäten. Hier können wir analog zur Paraboloid-Methode durch die Addition eines Wertes δ im Nenner die Berechnung stabilisieren. Zu beachten ist, dass wir den Wert δ nicht zum Regularisieren des Gesamtproblems (wie es in der Paraboloid-Methode geschieht) benutzen, hierzu dient bereits der Mollifier e_γ. Außerdem kann der Wert δ sehr klein gewählt werden, da e_γ ohne Datenfehler vorliegt.

Interessant ist, dass wir den Kern Ψ mit dem Filterungsschritt bei der Inversion der Röntgentransformation kombinieren können. Indem wir mit dem Kern Ψ und der Filterung ein modifiziertes Filter $\tilde{\Psi}$ definieren, erhalten wir ein Verfahren vom Typ gefilterte Rückprojektion.

Um $\tilde{\Psi}$ zu bestimmen, führen wir einen Wechsel der Integrationsvariablen in Zylinderkoordinaten durch und nutzen den Projektionssatz der Röntgentransformation.

$$
\begin{aligned}
f(x) &= (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{F}_N f(\xi) e^{i\langle x,\xi\rangle} d\xi \\
&= (2\pi)^{-N/2} \frac{1}{2} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\alpha^\perp} \|\Theta\sigma\| \mathcal{F}_N f(\sigma) e^{i\langle x,\sigma\rangle} d\sigma d\alpha \\
&= (2\pi)^{-(N+1)/2} \frac{1}{2} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\alpha^\perp} \|\Theta\sigma\| \mathcal{F}_{N-1} \mathcal{P} f(\alpha,\sigma) e^{i\langle x,\sigma\rangle} d\sigma d\alpha \\
&\approx (2\pi)^{-(N+1)/2} \frac{1}{2} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\alpha^\perp} \|\Theta\sigma\| \sum_{l=1}^{K} \mathcal{F}_{N-1} \overline{\Psi_l}(\sigma) \mathcal{F}_{N-1} g_4(z_l,\alpha,\sigma) e^{i\langle x,\sigma\rangle} d\sigma d\alpha.
\end{aligned}
$$

Hierbei haben wir den Projektionsoperator

$$
\Theta x = \begin{cases} x & \text{für } N=2 \\ (x_1, x_2, 0) & \text{für } N=3 \end{cases} \tag{3.8}
$$

verwendet.

Als neuen Kern setzen wir $\mathcal{F}_{N-1}\tilde{\Psi}(\sigma) = \|\Theta\sigma\| \mathcal{F}_{N-1}\Psi(\sigma)$.

Da die Messanordnung bei äquidistanter Winkelabtastung ein zylinderartiges Rekonstruktionsgitter nahelegt, bietet sich eine beschleunigte Version der Rückprojektion, die schnelle Rückprojektion, siehe [26], an. Hierbei werden die speziellen Invarianzen der Messgeometrie ausgenutzt.

Das Verfahren der *modifizierten Rückprojektion* ist nun:

Algorithmus 3.3.3 (MOR)
Vorberechnung:

- *Berechne den Rekonstruktionskern* $\tilde{\Psi}$

Hauptberechnung:

- *Bestimme*

$$w(\alpha, s) = \mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\sum_{l=1}^{K} \mathcal{F}_{N-1}\overline{\tilde{\Psi}_l}\ \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_l, \alpha, \cdot)\right)(s)$$

- *Wende schnelle Rückprojektion auf* w *an:*

$$f = \mathcal{P}^* w.$$

Setzen wir im MOR-Verfahren für den Mollifier die Delta-Distribution, also $e_\gamma = \delta$, dann erhalten wir genau die Paraboloid-Methode. Die Paraboloid-Methode ist somit ein Spezialfall des MOR-Verfahrens.
Die Güte, mit der der Kern Ψ und somit auch $\tilde{\Psi}$ bestimmt werden kann, hängt hauptsächlich von dem Wert des Nenners $\left(K^2 - \left|\sum_{l=1}^{K} e^{i\frac{z_l\|\sigma\|^2}{k}}\right|^2\right)$ ab (siehe Formel (3.7)). Je größer dieser Wert für eine Frequenz σ ist, desto stabiler kann der Kern an der Stelle σ berechnet werden.
Weil die Frequenz $\sigma \in \alpha^\perp$ und nur betragsmäßig in die Berechnung eingeht, können wir σ für ein fixiertes α auch durch eine Variable $\xi \in \mathbb{R}^{N-1}$ ersetzen. Nehmen wir an, dass die positiven Frequenzen von ξ im diskreten durch $\xi_m = hm$ mit Schrittweite h und

$$m = \begin{cases} m_1 & m_1 = 1, .., M \quad \text{für } N = 2 \\ (m_1, m_2) & m_1, m_2 = 1, .., M \quad \text{für } N = 3 \end{cases}$$

gegeben sind. Da im Nenner die Frequenz ξ nur im Quadrat auftaucht, sind hiermit die negativen Frequenzen mit eingeschlossen. Die Frequenz $\xi = 0$ brauchen wir nicht zu betrachten, da diese, wie wir bereits gesehen haben, nicht ohne besondere Behandlung rekonstruierbar ist.
Durch eine geschickte Wahl der Messabstände $z_1, .., z_K$ können wir den Wert des Nenners beeinflussen und somit versuchen, eine optimale Wahl im Hinblick auf die Stabilität der Berechnung von Ψ zu finden.
Wir definieren die zu maximierende Funktion G durch

$$G(z_1, .., z_K) = \min_{m=1,..,M}\left\{K^2 - \left|\sum_{l=1}^{K} e^{i\frac{z_l\|mh\|^2}{k}}\right|^2\right\}.$$

Alternativ ist auch eine Wahl

$$G(z_1,..,z_K) = \prod_{m=1}^{M} \left(K^2 - \left| \sum_{l=1}^{K} e^{i\frac{z_l \|mh\|^2}{k}} \right|^2 \right)$$

möglich.
In den numerischen Tests haben wir die zweite Version von G benutzt. Da die Berechnung von $z_1,..,z_K$ nur einmal durchgeführt werden muss, ist die Rechenzeit der verwendeten Optimierungsroutine nicht wichtig. Wir haben in unseren Tests mittels 'crude force' eine gute Konstellation berechnet.

3.3.2 Das nichtlineare Verfahren NILI I

Wenden wir uns nun dem Modell M3 zu. Da es sich hier um ein nichtlineares Problem handelt, bietet sich z.B. ein Gauß-Newton-Verfahren an. Zunächst definieren wir

$$g_3(z,\alpha,s) = I_3(z,\alpha,s) - 1. \tag{3.9}$$

Setzen wir nun die Darstellung der Funktion I_3 ein, dann sehen wir, dass sich die Datenfunktion g_3 in zwei lineare und einen quadratischen Anteil aufteilt:

$$g_3(z,\alpha,s) = e^{-ikz} P_z \mathcal{P} f(\alpha,s) + e^{ikz} \overline{P_z \mathcal{P} f(\alpha,s)} + |P_z \mathcal{P} f(\alpha,s)|^2 .$$

Der quadratische Anteil, den wir durch die Funktion Q abkürzen,

$$[Q(\mathcal{P}f)](z,\alpha,s) = |P_z \mathcal{P} f(\alpha,s)|^2 ,$$

ist identisch mit der Intensitätsfunktion aus Kapitel 2.2. Aus diesem Grund können wir die dort erzielten Ergebnisse auf Q übertragen. Viele Berechnungen dieses Abschnittes verlaufen wegen dieser Identität analog zu Kapitel 2.2. Wir werden deshalb in einigen Fällen auf die Zwischenrechnungen verzichten und stattdessen nur auf die entsprechenden Bereiche in Kapitel 2.2 verweisen.
Wir untersuchen nun die Eindeutigkeit des inversen Problems.

Satz 3.3.4 *Es seien $z_1, z_2 > 0$ verschieden und f habe kompakten Träger. Dann lässt sich die Funktion f eindeutig aus den Messwerten $g_3(z_1,\cdot,\cdot)$ und $g_3(z_2,\cdot,\cdot)$ bestimmen.*

Beweis: Wir betrachten die Fouriertransformierte von g_3 bezüglich s und erhalten durch eine analoge Rechnung wie in Lemma 2.2.1

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{N-1} g_3(z,\alpha,\sigma) \;=\;& -\frac{ik}{2} e^{-i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}} \mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma) + \frac{ik}{2} e^{i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}} \mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}(\alpha,\sigma) + \\ & \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}} e^{-i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}} \int_{\alpha^\perp} e^{-i\langle\sigma,\eta\rangle} \mathcal{P}f(\alpha,\eta) \overline{\mathcal{P}f\left(\alpha,\eta+\frac{\sigma z}{k}\right)} d\eta.\end{aligned}$$

Da der Träger $\operatorname{supp}\{\mathcal{P}f\} \subset [-a,a]^N$ für ein $a \in \mathbb{R}$ ist, gilt für alle $\|\sigma\| > 2\frac{ak}{z}$ die Gleichung

$$\mathcal{F}_{N-1}g_3(z,\alpha,\sigma) = -\frac{ik}{2}e^{-i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma) + \frac{ik}{2}e^{i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}(\alpha,\sigma).$$

Nun sind wir in einer ähnlichen Situation wie im Beweis zu Satz 3.3.1. Da $\mathcal{F}_{N-1}g_3(z,\alpha,\sigma)$ für zwei z-Werte bekannt ist, können wir $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\sigma)$ für alle $\|\sigma\| > 2\frac{ak}{z}$ bestimmen. Weil $\mathcal{P}f$ aber kompakten Träger hat und somit $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f(\alpha,\cdot)$ komplex analytisch ist, wird $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f$ hierdurch für alle α schon eindeutig bestimmt. Aus der Injektivität von $\mathcal{F}_{N-1}$ und $\mathcal{P}$ resultiert schließlich die Aussage.

□

Dieses Ergebnis wirkt sehr merkwürdig, denn die Struktur des Modells M3 ist sehr ähnlich zur Problemstellung in Kapitel 2.2. Dort war es jedoch nicht möglich die Eindeutigkeit mit einer festen Anzahl von Messabständen nachzuweisen. Bei Modell M3 reichen aber zwei verschiedene aus. Auch der komplexe Phasenfaktor, der in Satz 2.2.7 auftritt, ist bei Modell M3 überflüssig. Der Grund hierfür ist, dass bei dem Modell M3 das einfallende Feld außerhalb des Trägers von f nicht absorbiert wird, während bei dem Modell aus Kapitel 2.2 das einfallende Feld außerhalb des Trägers von T vollständig absorbiert wird. Somit steht im Modell M3 bei dem inversen Problem mehr Information zur Verfügung und die Eindeutigkeit kann mit zwei Messabständen gezeigt werden.

Die Rekonstruktion bei Modell M3 gliedert sich in zwei Teilschritte. Als erstes wird aus den Daten g_3 für jede einfallende Richtung α die Röntgentransformation $\mathcal{P}f(\alpha,.)$ bestimmt. Anschließend kommt ein Inversionsverfahren zur Röntgentransformation zum Einsatz.
Da die Richtung α im ersten Teil der Inversion nicht explizit in der Rechnung benötigt wird, lassen wir die Variable α der besseren Übersicht halber weg.
Der erste Ansatz zur numerischen Lösung des nichtlinearen Problems (3.9), der in [14] vorgestellt wurde, ist ein eingefrorenes Newton-Verfahren (Die Ableitung wird hier an der Stelle $\mathcal{P}f = 0$ ausgewertet). Dazu wird in jedem Schritt die Lösung $\mathcal{P}f^{(j+1)}$ der Gleichung

$$e^{-ikz}P_z\mathcal{P}f(s)^{(j+1)} + e^{ikz}\overline{P_z\mathcal{P}f(s)^{(j+1)}} = g^{exp}(z,s) - \left|P_z\mathcal{P}f(s)^{(j)}\right|^2$$

bestimmt. Zur Lösung der Gleichung kommt in [14] die Paraboloid-Methode zum Einsatz. Die Ergebnisse, die mit diesem Algorithmus erzielt werden, sind allerdings eher mäßig.
Bessere Resultate können wir bei einem Verfahren erwarten, das die Ableitung an der Stelle $\mathcal{P}f^{(j)}$ in jedem Newtonschritt neu berechnet. Ein mögliches Verfahren

wäre deshalb ein Gauß-Newton-Verfahren.
Betrachten wir zunächst den quadratischen Anteil

$$[Q(\mathcal{P}f)](z,s) = |P_z\mathcal{P}f(s)|^2.$$

Einen schnellen Vorwärtslöser für Q erhalten wir durch mehrfaches Anwenden der Fouriertransformation. Es ist

$$[Q(\mathcal{P}f)](z,s) = \left|\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)(s)\right|^2$$

Da wir die Gleichung (3.9) wieder im Fourierraum betrachten, benötigen wir zur Anwendung eines Gauß-Newton-Verfahrens die Ableitung von $\mathcal{F}_{N-1}Q$, die wir mit $\hat{Q}'$ abkürzen. Es ist nach einer analogen Rechnung wie in Satz 2.2.3 und Formel (2.1)

$$\begin{aligned}[\hat{Q}'(\mathcal{P}f)h](z,\sigma) = \mathcal{F}_{N-1}\Bigg(&\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{h}\right)\\ &+\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}h\right)\Bigg)(\sigma).\end{aligned}$$

Die Ableitung von $\mathcal{F}_{N-1}g_3$, wir bezeichen sie mit $\hat{g}_3'$, ist nun

$$[\hat{g}_3'(\mathcal{P}f)h](z,\sigma) = -\frac{ki}{2}e^{-i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}h(\sigma) + \frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{h}(\sigma) + [\hat{Q}'(\mathcal{P}f)h](z,\sigma).$$

Mit Hilfe dieser Ableitung wenden wir nun das Gauß-Newton-Verfahren an. Hierbei ist die Gleichung für $h = \mathcal{P}f^{(j+1)} - \mathcal{P}f^{(j)}$

$$\hat{g}_3'(\mathcal{P}f^{(j)})h = \mathcal{F}_{N-1}g^{exp} - \mathcal{F}_{N-1}g_3(\mathcal{P}f^{(j)})$$

in jedem Newtonschritt zu lösen. Mit $g_3(\mathcal{P}f^{(j)})$ bezeichnen wir die Daten, die sich im Modell M3 mit der Röntgentransformation $\mathcal{P}f^{(j)}$ ergeben.
Da der Operator $\hat{g}_3'$ relativ einfach auszuwerten ist, bietet sich zur Lösung ein CG-Verfahren an. Dabei ergeben sich zwei Schwierigkeiten. Zum einen bildet $\hat{g}'$ keine $\mathbb{C}$-lineare Abbildung, zum anderen ist das System bezüglich nur eines Messabstandes unterbestimmt.
Dem ersten Problem begegnen wir, indem wir schlicht $\overline{h}$ als neue Variable definieren. Das zweite umgehen wir, indem wir mehrere Messungen durchführen. Wir setzen also

$$\begin{aligned} q &= \overline{h} \\ \mathcal{M} &= \{z_1, ..., z_K\}. \end{aligned}$$

Nun definieren wir

$$
\begin{aligned}
[B_z(\mathcal{P}f)(h,q)](\sigma) = &-\frac{ki}{2}e^{-i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}h(\sigma) + \frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|\sigma\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}q(\sigma) + \\
&\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}q\right)\right. \\
&\left.+\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}h\right)\right)(\sigma)
\end{aligned}
$$

sowie

$$
\begin{aligned}
\mathcal{B}(\mathcal{P}f) \quad : \quad & H^2 \quad \to \quad H^K \\
& (h,q) \quad \mapsto \quad \mathcal{B}(\mathcal{P}f)(h,q) := (B_{z_1}(\mathcal{P}f)(h,q),...,B_{z_K}(\mathcal{P}f)(h,q)).
\end{aligned}
$$

Lemma 3.3.5 *Sei $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f \in L_1(\alpha^\perp)$, dann sind die Operatoren $B_z(\mathcal{P}f) : H^2 \to L_2(\alpha^\perp)$ und $\mathcal{B}(\mathcal{P}f) : H^2 \to H^K$ linear.*

Beweis: Betrachten wir zunächst die Aussage für den Operator $B_z(\mathcal{P}f)$. Die Linearität von $B_z(\mathcal{P}f)$ ist offensichtlich. Wir brauchen lediglich $B_z(\mathcal{P}f)(h,q) \in L_2$ nachzuweisen. Aber auch das ist wegen

$$
\begin{aligned}
\|B_z(\mathcal{P}f)(h,q)\|_{L_2} \quad \le \quad & \frac{k}{2}\left(\|\mathcal{F}_{N-1}h\|_{L_2} + \|\mathcal{F}_{N-1}q\|_{L_2}\right) \\
& + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}}\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1}\left(\|\mathcal{F}_{N-1}h\|_{L_2} + \|\mathcal{F}_{N-1}q\|_{L_2}\right)
\end{aligned}
$$

klar. Hieraus ergibt sich auch die Aussage für $\mathcal{B}(\mathcal{P}f)$.

$\square$

Unmittelbar erhalten wir analog zu Satz 2.2.11

$$
\mathcal{B}^*(\mathcal{P}f)(\mathcal{F}_{N-1}g(z_1,\cdot),...,\mathcal{F}_{N-1}g(z_K,\cdot)) = \sum_{j=1}^{K} B_{z_j}^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}g(z_j,\cdot)
$$

und

$$
\begin{aligned}
[B_z^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta) = &\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}w\right)(\eta) + \left([\hat{Q}'^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta)\right)_1,\right. \\
&\left.-\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{-i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}w\right)(\eta) + \left([\hat{Q}_z'^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta)\right)_2\right)
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
&[\hat{Q}_z'^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta) = \\
&\quad\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\mathcal{P}f\right)w\right)\right)(\eta),\right. \\
&\quad\left.\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z\|.\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\overline{\mathcal{P}f}\right)w\right)\right)(\eta)\right).
\end{aligned}
$$

Setzen wir nun noch $b = (b_1, .., b_K)$ mit

$$b_j = \mathcal{F}_{N-1} g^{exp}(z_j, \cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z_j, \cdot),$$

dann lässt sich das Problem eines Newtonschrittes mit den neuen Bezeichnungen schreiben als

$$\mathcal{B}(\mathcal{P}f)(h, q) = b. \tag{3.10}$$

Zur Lösung dieses Systems setzen wir ein CG-Verfahren ein.

Algorithmus 3.3.6 (CG-Verfahren)

- *Wähle einen Startwert* $(h^{(0)}, q^{(0)})$.
- *Berechne*

  $$r^{(m)} = \mathcal{B}^*(\mathcal{P}f)(\mathcal{B}(\mathcal{P}f)(h^{(m)}, q^{(m)}) - b)$$

  und setze

  $$d^{(m)} = -r^{(m)}, \text{ falls } m = 0.$$

- *Berechne*

  $$(h^{(m+1)}, q^{(m+1)}) = (h^{(m)}, q^{(m)}) + \alpha_m d^{(m)} \text{ mit } \alpha_m = \frac{\|r^{(m)}\|^2}{\|\mathcal{B}(\mathcal{P}f)d^{(m)}\|^2}.$$

- *Bestimme*

  $$d^{(m+1)} = -r^{(m+1)} + \beta_m d^{(m)}, \text{ wobei } \beta_m = \frac{\|r^{(m+1)}\|^2}{\|r^{(m)}\|^2}.$$

Genau wie in Satz 2.2.13 zeigen wir nun, dass die Iterierten des CG-Verfahrens in festen Räumen bleiben.

Satz 3.3.7 *Seien $\mathcal{F}_{N-1} g^{exp} \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$ die exakten, fouriertransformierten Daten und $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$. Ist $(\mathcal{F}_{N-1}h^{(0)}, \mathcal{F}_{N-1}q^{(0)}) \in (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)) \times (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp))$, dann gilt in Algorithmus 3.3.6:*

$(\mathcal{F}_{N-1}h^{(m)}, \mathcal{F}_{N-1}q^{(m)}) \in (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)) \times (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp))$ für alle $m \in I\!N$.

Beweis: Wir unterteilen den Beweis in drei Schritte

1. Wir zeigen zunächst, dass $b \in H^K$ ist. Weil

   $$b_j = \mathcal{F}_{N-1} g^{exp}(z_j, \cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z_j, \cdot)$$

ist, reicht es $\mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z,\cdot) \in L_2(\alpha^\perp)$ für alle $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$ nachzuweisen.
Sei also $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$, dann gilt

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z,\cdot)\|_{L_2} &\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2} + \|\mathcal{F}_{N-1}[Q(\mathcal{P}f)](z_j,\cdot)\|_{L_2} \\
&\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2} + \|[Q(\mathcal{P}f)](z_j,\cdot)\|_{L_2} \\
&\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2} + \frac{k^2}{4}\left\|\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(e^{-i\frac{z\|\cdot\|}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)\right\|_{L_\infty} \\
&\quad \cdot\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2} \\
&\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2} + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}}\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1} \\
&\quad \cdot\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_2}.
\end{aligned}$$

Somit ist also $\mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z_j,\cdot) \in L_2(\alpha^\perp)$ und deshalb auch $b \in H^K$.
Nun zeigen wir $b_j \in L_1(\alpha^\perp)$. Hierzu reicht es wieder, $\mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z,\cdot) \in L_1(\alpha^\perp)$ zu betrachten. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\|[\mathcal{F}_{N-1}[g_3(\mathcal{P}f)](z,\cdot)\|_{L_1} &\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1} + \|\mathcal{F}_{N-1}[Q(\mathcal{P}f)](z_j,\cdot)\|_{L_1} \\
&\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1} + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}} \\
&\quad \cdot\left\|\left(e^{-i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right) * D\left(e^{i\frac{z\|\cdot\|^2}{2k}}\overline{\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f}\right)\right\|_{L_1} \\
&\leq k\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1} + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}}\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1}^2.
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir den Operator $Df(x) = f(-x)$ verwendet.

2. Als Nächstes zeigen wir, dass $B_z(T)(h,q) \in L_1(\alpha^\perp)$ liegt für alle $\mathcal{F}_{N-1}h, \mathcal{F}_{N-1}q \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$.
Sei also $\mathcal{F}_{N-1}h, \mathcal{F}_{N-1}q \in L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)$, dann gilt

$$\begin{aligned}
&\|B_z(\mathcal{P}f)(h,g)\|_{L_1} \\
&\quad \leq \frac{k}{2}\left(\|\mathcal{F}_{N-1}h\|_{L_1} + \|\mathcal{F}_{N-1}q\|_{L_1}\right) + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}} \\
&\quad\quad \cdot\left(\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1}\|\mathcal{F}_{N-1}h\|_{L_1} + \|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1}\|\mathcal{F}_{N-1}q\|_{L_1}\right).
\end{aligned}$$

Auf Grund von Satz 3.3.5 gilt außerdem $\mathcal{B}(\mathcal{P}f)(h,q) \in H^K$.

3. Schließlich betrachten wir noch $\mathcal{B}^*(\mathcal{P}f)b$ mit $b \in H^K$ und $b_j \in L_1(\alpha^\perp)$ für alle $j = 1,..,K$. Wir wollen zeigen, dass $\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{B}^*b \in (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp)) \times (L_1(\alpha^\perp) \cap L_2(\alpha^\perp))$ liegt. Hier reicht es, $\mathcal{F}_{N-1}B_{z_j}^*(\mathcal{P}f)b_j$ zu betrachten. Für die erste Komponente gilt

$$\|\mathcal{F}_{N-1}(B_z^*(\mathcal{P}f)b_j)_1\|_{L_1} \leq \frac{k}{2}\|b_j\|_{L_1} + \frac{k^2}{4(2\pi)^{(N-1)/2}}\|\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\|_{L_1}\|b_j\|_{L_1}.$$

Analog verfahren wir bei der zweiten Komponente. Die Zugehörigkeit von $\mathcal{F}_{N-1}B_z^*(\mathcal{P}f)b_j \in H^2$ ist nach Satz 3.3.5 klar.

Die Aussage folgt nun mittels vollständiger Induktion.

□

Schließlich gelangen wir zum Gauß-Newton-Verfahren:

Algorithmus 3.3.8 (NILI I)

1. *Wähle einen Startwert* $w^{(0)}$.

2. *Löse das System*
$$\mathcal{B}(w^{(\mu)})(h,q) = b$$
mit Hilfe von Algorithmus 2.2.12 iterativ.

3. *Führe einen Newtonschritt durch*
$$\begin{aligned} w^{(\mu+1)} &= w^{(\mu)} + h \\ b_j &= \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_j,\cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_3(w^{(j+1)})](z_j,\cdot) \textit{ für alle } j = 1,..,K \end{aligned}$$
und gehe zurück zu Schritt 2 (solange bis gewünschte Auflösung erreicht ist)

4. *Wende gefilterte Rückprojektion an*
$$f = \mathcal{P}^{-1}w$$

3.3.3 Der IIF- und der BVD-Algorithmus

Nun betrachten wir das Modell M2. Als Daten setzen wir

$$g_2(z,\alpha,s) = I_2(z,\alpha,s) - 1.$$

Da wir für das gestreute Feld jetzt die Born-Approximation verwenden, bietet sich der Propagationssatz 3.2.4 zur Inversion an. Nach diesem Satz gilt für $\sigma \in \alpha^\perp$ mit $\|\sigma\| \le k$ die Gleichung:

$$\mathcal{F}_{N-1}u_{s,1}(z,\alpha,\sigma) = -ik^2\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{e^{iza(\sigma)}}{a(\sigma)}\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)),$$

wobei $a(\sigma) = \sqrt{k^2 - \|\sigma\|^2}$ und $\omega(\alpha,\sigma) = (a(\sigma)-k)\alpha + \sigma$.
Zur besseren Übersicht führen wir die Funktion

$$W(z,\sigma) = -ik^2\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{e^{iz(a(\sigma)-k)}}{a(\sigma)}$$

ein. Die Daten g_2 sind dann für $\|\sigma\| \le k$

$$\mathcal{F}_{N-1}g_2(z,\alpha,\sigma) \;=\; \overline{W(z,\sigma)\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,-\sigma))} + W(z,\sigma)\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)).$$

Auch hier erhalten wir ein Eindeutigkeitsresultat.

Satz 3.3.9 *Es seien $z_1, z_2 > 0$ verschieden und f habe kompakten Träger. Dann lässt sich die Funktion f eindeutig aus den Messwerten $g_2(z_1, \cdot, \cdot)$ und $g_2(z_2, \cdot, \cdot)$ bestimmen.*

Beweis: Für die beiden Messabstände z_1 und z_2 erhalten wir für das System bei $\|\sigma\| \le k$

$$\begin{pmatrix} W(z_1,\sigma) & \overline{W(z_1,\sigma)} \\ W(z_2,\sigma) & \overline{W(z_2,\sigma)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) \\ \overline{\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,-\sigma))} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} g_2(z_1,\alpha,\sigma) \\ \mathcal{F}_{N-1} g_2(z_2,\alpha,\sigma) \end{pmatrix}.$$

Dieses System ist auf einer nichtleeren, offenen Menge invertierbar. Genau wie im Satz 3.3.1 folgt nun aus der Kompaktheit des Trägers von f die Eindeutigkeit von $\mathcal{F}_N f$. Wegen der Injektivität von $\mathcal{F}_N$ ist deshalb auch f eindeutig festgelegt.

□

Um in den folgenden Berechnungen nicht immer auf die Bedingung $\|\sigma\| \le k$ hinweisen zu müssen, gehen wir nun davon aus, dass die betrachteten Frequenzen σ bereits die Ungleichung $\|\sigma\| \le k$ erfüllen. In der Tat ist bei den späteren numerischen Berechnungen auf Grund der großen Wellenzahl k diese Bedingung für die diskreten Frequenzen immer erfüllt.
Um die Stabilität bei der Rekonstruktion zu gewährleisten, verwenden wir bei der Inversion wieder mehr als einen Abstand.
Aus der Kenntnis der Messabstände $z_1, .., z_K$ ermitteln wir $\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma))$. Es ist

$$\begin{pmatrix} W(z_1,\sigma) & \overline{W(z_1,\sigma)} \\ \vdots & \vdots \\ W(z_K,\sigma) & \overline{W(z_K,\sigma)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) \\ \overline{\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,-\sigma))} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{N-1} g_2(z_1,\alpha,\sigma) \\ \vdots \\ \mathcal{F}_{N-1} g_2(z_K,\alpha,\sigma) \end{pmatrix}.$$

Indem wir wie in Kapitel 3.3.1 die Approximative Inverse anwenden, erhalten wir

$$\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) = \langle g_2, \Psi \rangle_{H^K}$$

mit dem Rekonstruktionskern

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{N-1}\Psi(\sigma) &= \frac{2a(\sigma)^2}{k^4\pi} \frac{\mathcal{F}_{N-1} e_\gamma(\sigma)}{K^2 - |\sum_{l=1}^K e^{2iz_l(a(\sigma)-k)}|^2} \\ & \begin{pmatrix} W(z_1,\sigma)K - \overline{W(z_1,\sigma)} \sum_{l=1}^K e^{2iz_l(a(\sigma)-k)} \\ \vdots \\ W(z_K,\sigma)K - \overline{W(z_K,\sigma)} \sum_{l=1}^K e^{2iz_l(a(\sigma)-k)} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Nun müssen wir noch die inverse Fouriertransformation von $\mathcal{F}_N f$ bestimmen. Dies ist allerdings problematisch, da die Fouriertransformierte nur auf den Ewald Sphären gegeben ist. Um die inverse Fouriertransformation schnell ausführen zu können, interpolieren wir f deshalb auf ein kartesisches Gitter.

Da die Messrichtungen $\alpha \in \tilde{\mathcal{S}}_1$ sind, können wir α durch den Winkel φ beschreiben:

$$\alpha = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Betrachten wir also die Transformation

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} = \omega(\alpha, \sigma) = \begin{pmatrix} (a(\sigma) - k)\cos\varphi + \sigma_1 \\ (a(\sigma) - k)\sin\varphi + \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

und lösen nach φ bzw. σ auf, dann ist mit dem Projektionsoperator Θ siehe Formel (3.8)

$$\begin{aligned} \cos\varphi_{1,2} &= -\frac{\xi_1\|\xi\|^2}{2k\|\Theta\xi\|^2} \pm \sqrt{\xi_2^2\left(\frac{1}{\|\Theta\xi\|^2} - \frac{\|\xi\|^4}{4k^2\|\Theta\xi\|^4}\right)} \\ \sigma &= \begin{pmatrix} (\xi_1\sin\varphi - \xi_2\cos\varphi)\sin\varphi \\ (-\xi_1\sin\varphi + \xi_2\cos\varphi)\cos\varphi \\ \xi_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Im zweidimensionalen Fall fällt lediglich die letzte Komponente ξ_3 weg. Die Ergebnisse für φ und σ_1, σ_2 sind gleich.
Zu beachten ist, dass wir insgesamt vier mögliche Kandidaten für die Lösungen des Winkels φ erhalten. Zwei ergeben sich direkt aus der obigen Formel durch Anwenden der arccos-Funktion und die beiden anderen aus $\varphi_{3,4} = 2\pi - \varphi_{1,2}$. Durch Einsetzen in die Formel (3.11) können wir nun die beiden richtigen Lösungen identifizieren.
Wie aus der konventionellen CT zu erwarten, ergibt lineare Interpolation auf das kartesische Gitter einige Artefakte. In der CT wurden für dieses Problem Vorschläge zur Verbesserung der Rekonstruktion gemacht, siehe [38].
So können wir zeropadding sowohl direkt auf die Daten anwenden, was aber nur eine minimale Verbesserung der Rekonstruktionergebnisse bringt, oder wir benutzen zeropadding, bevor wir die Interpolation anwenden. Dies verbessert das Bild merklich.
Eine andere Methode verwendet Zusatzinformationen des Objektes, nämlich die Beschränktheit des Trägers (siehe [38]). Hier wird eine beschleunigte Sinc-Reihe für die Fouriertransformation angesetzt.
Um die Fouriertransformation noch genauer zu berechnen, können wir auch die diskrete Fouriertransformation an nicht äquidistanten Punkten auswerten, was aber zu einer wesentlich höheren Laufzeit führt.
In dem folgenden Algorithmus *Interpolation im Fourierraum* benutzen wir beschleunigte sinc-Reihen.

Algorithmus 3.3.10 (IIF)
Vorberechnung:

- *Berechne den Rekonstruktionskern* Ψ

Hauptberechnung:

- *Berechne*

$$\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) \quad = \quad \langle g_2(\alpha,.), \Psi\rangle_{H^K}$$

- *Interpoliere* $\mathcal{F}_N f$ *mit Hilfe beschleunigter Sinc-Reihe auf ein kartesisches Gitter*

- *Wende schnelle inverse Fouriertransformation an*

Ein weiterer Ansatz basiert auf einer Methode, die in der Ultraschalltomographie von Devaney vorgeschlagen wurde (siehe [19]). Hier wird die Interpolation im Fourierraum umgangen, indem direkt auf dem vorgegebenen Gitter die inverse Fouriertransformation berechnet wird. Es ist

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{F}_N f(\xi) e^{i\langle x,\xi\rangle} d\xi.$$

Koordinatentransformation auf die Ewald-Sphären liefert eine tiefpassgefilterte Version von f

$$\begin{aligned} f(x) \quad \approx \quad & \frac{1}{2(2\pi)^{N/2}} \int\limits_{\tilde{S}^1} \int\limits_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp \\ \|\sigma\|\leq k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma) e^{i\langle (a(\sigma)-k)\alpha+\sigma, x\rangle} \\ & \cdot \left(\|\Theta\sigma\| - \frac{\|\Theta\sigma\|(a(\sigma)-k)}{a(\sigma)} \right) d\sigma d\alpha. \end{aligned}$$

Bei dem Ansatz von Devaney ist es jedoch zunächst nicht möglich, auf einfache Weise einen schnellen Algorithmus anzugeben. Die Laufzeit für die direkte Umsetzung des Integrals (numerische Integration) hätte im dreidimensionalen bei n Unterteilungen pro Raumrichtung eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^6)$, wäre also vollkommen indiskutabel. Dies kommt daher, dass für jeden Rekonstruktionspunkt das innere Integral über $\alpha^\perp$ neu berechnet werden muss.

Beschleunigen können wir das Verfahren, indem wir die hohe Wellenzahl k der Phasentomographie ausnutzen. Wir entwickeln die Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} f(x) &\approx \frac{1}{2(2\pi)^{N/2}} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp \\ \|\sigma\|\le k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma) e^{i(a(\sigma)-k)\langle\alpha,x\rangle} \frac{\|\Theta\sigma\|k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,x\rangle} d\sigma d\alpha \\ &\approx \frac{1}{2(2\pi)^{N/2}} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp \\ \|\sigma\|\le k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma) \sum_{\nu=0}^{M} \frac{(i(a(\sigma)-k)\langle\alpha,x\rangle)^\nu}{\nu!} \\ &\quad \cdot \frac{\|\Theta\sigma\|k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,x\rangle} d\sigma d\alpha \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^{N/2}} \sum_{\nu=0}^{M} \frac{\langle\alpha,x\rangle^\nu}{\nu!} \int_{\tilde{S}^1} \int_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp \\ \|\sigma\|\le k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma)(i(a(\sigma)-k))^\nu \\ &\quad \cdot \frac{\|\Theta\sigma\|k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,x\rangle} d\sigma d\alpha. \end{aligned}$$

Durch die Näherung ist nun die Integration über $\alpha^\perp$ unabhängig von x geworden. Wir erhalten deshalb ein Verfahren vom Typ gefilterte Rückprojektion. Die Laufzeit dieses Algorithmus ist im dreidimensionalen $\mathcal{O}(n^4)$.
Als Abbruchindices M reichen in der Regel schon kleine Werte von $M = 1$ bis $M = 4$. Die *beschleunigte Variante* ist:

Algorithmus 3.3.11 (Beschleunigte Variante (BVD))
Vorberechnung:

- *Berechne den Rekonstruktionskern* Ψ

Hauptberechnung:

- *Berechne*

$$\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) = \langle g_2(\alpha,.),\Psi\rangle_{H^K}$$

- *Filtere die Daten für jedes* $0 \le \nu \le M$

$$w_\nu(\alpha,x) = \frac{1}{2(2\pi)^{N/2}} \int_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp \\ \|\sigma\|\le k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma)(i(a(\sigma)-k))^\nu \frac{\|\Theta\sigma\|k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,x\rangle} d\sigma$$

- *Wende Rückprojektion an*

$$f(x) = \sum_{\nu=0}^{M} \frac{\langle\alpha,x\rangle^\nu}{\nu!} \int_{\tilde{S}^1} w_\nu(\alpha,x) d\alpha$$

Bei der klassischen gefilterten Rückprojektion kann die innere Integration, hier auch Filterung genannt, im Ortsraum als Faltung berechnet werden. Dazu wird ein Filter $F_\gamma(\sigma)$ gewählt, eine inverse Fouriertransformation analytisch berechnet und die dann entstehende Faltung mittels numerischer Integration ausgewertet. Leider ist ein analoges Vorgehen bei dem BVD-Algorithmus nicht ohne weiteres möglich, denn die hier zu bestimmende inverse Fouriertransformation

$$\psi^\nu(s) = (2\pi)^{-(N-1)/2} \int_{\mathbb{R}} (i(a(\sigma)-k))^\nu \frac{\|\Theta\sigma\| k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,s\rangle} F_\gamma(\sigma) d\sigma$$

ist nicht analytisch berechenbar.
Mit einigen Approximationen können wir aber Näherungswerte für ψ^ν bestimmen. Es ist

$$\psi^\nu(s) \approx (2\pi)^{-(N-1)/2} \int_{\mathbb{R}} \left(-i\frac{\|\sigma\|^2}{2k}\right)^\nu \|\Theta\sigma\| e^{i\langle\sigma,s\rangle} F_\gamma(\sigma) d\sigma.$$

Für einfache Filter wie z.B. das Ram-Lak Filter kann dieses Integral nun analytisch berechnet werden. Daher wäre es auch möglich, die Multiplikation im Fourierraum durch eine Faltung zu ersetzen.

3.3.4 Die nichtlinearen Verfahren NILI II und NILI III

Schließlich analysieren wir das noch fehlende Modell M1. Die Daten sind nun

$$g_1(z,\alpha,s) = I_1(z,\alpha,s) - 1.$$

Zur Lösung des inversen Problems wenden wir wie in Kapitel 3.3.2 auch hier ein Gauß-Newton-Verfahren an. Die Rechnungen zur Herleitung des Verfahrens verlaufen vollkommen analog zu Kapitel 3.3.2. Wir werden deshalb nur die Ergebnisse angeben.
Da sich auch hier zur Herleitung eines Inversionsverfahrens der Propagationssatz anbietet, ergibt sich wie im vorigen Abschnitt das Problem der Frequenzen $\|\sigma\| > k$. Dieses können wir umgehen, indem wir anstatt f eine tiefpassgefilterte Version von f berechnen. Wir benutzen daher die Abkürzung

$$W(z,\sigma) = \begin{cases} -e^{-ikz} \frac{ik^2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}a(\sigma)} e^{iza(\sigma)} & \text{für } \|\sigma\| \le k \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Wie bereits im vorigen Abschnitt erwähnt, hat diese Einschränkung keine Auswirkungen auf die numerischen Ergebnisse, da die diskreten Frequenzen wegen der hohen Wellenzahl k immer die Bedingung $\|\sigma\| \le k$ erfüllen.

Die Ableitung von $\hat{g}_1$ bestimmt sich zu

$$
\begin{aligned}
&[\hat{g}_1'(\mathcal{F}_N f)h](\alpha,\sigma) = \\
&\quad \overline{W(z,\sigma)\mathcal{F}_N h(\omega(\alpha,-\sigma))} + W(z,\sigma)\mathcal{F}_N h(\omega(\alpha,\sigma)) + \\
&\quad \mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\mathcal{F}_N h(\omega(\alpha,.))\right)\overline{\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,.))\right)}\right)(\sigma) + \\
&\quad \mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,.))\right)\overline{\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\mathcal{F}_N h(\omega(\alpha,.))\right)}\right)(\sigma).
\end{aligned}
$$

Genau wie bei dem Verfahren NILI I setzen wir auch hier $q = \overline{h}$. Desweiteren sehen wir wieder, dass die einzelnen Richtungen vollkommen separat voneinander betrachtet werden können. Wir lassen daher die Einfallsrichtung α im Argument der Funktionen der besseren Übersicht halber weg. Um dennoch anzudeuten, dass die Fouriertransformation auf den Ewald Sphären ausgewertet wird, setzen wir

$$
\begin{aligned}
\tilde{f}(\sigma) &= \mathcal{F}_N f(\omega(\alpha,\sigma)) \\
\tilde{h}(\sigma) &= \mathcal{F}_N h(\omega(\alpha,\sigma)) \\
\tilde{q}(\sigma) &= \mathcal{F}_N q(\omega(\alpha,\sigma)).
\end{aligned}
$$

Wir definieren den Operator C_z in folgender Weise

$$C_z(\mathcal{F}_N f) \;:\; H^2 \;\to\; L_2(\alpha^\perp)$$

mit

$$
\begin{aligned}
[C_z(\tilde{f})(\tilde{h},\tilde{q})](\sigma) \;=\; & \overline{W(z,\sigma)}\tilde{q}(\sigma) + W(z,\sigma)\tilde{h}(\sigma) + \\
& \mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\tilde{h}\right)\overline{\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\tilde{f}\right)}\right)(\sigma) + \\
& \mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\tilde{f}\right)\mathcal{F}_{N-1}\left(\overline{W(z,.)}\tilde{q}\right)\right)(\sigma).
\end{aligned}
$$

Hieraus ergibt sich unmittelbar

$$
\begin{aligned}
&[C_z^*(\tilde{f})(\mathcal{F}_{N-1}w)](\sigma) = \\
&\qquad \Big(\overline{W(z,\sigma)}\mathcal{F}_{N-1}w(\sigma) + \overline{W(z,\sigma)}\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\tilde{f}\right)w\right)(\sigma), \\
&\qquad W(z,\sigma)\mathcal{F}_{N-1}w(\sigma) + W(z,\sigma)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\overline{\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(W(z,.)\tilde{f}\right)}w\right)(\sigma)\Big).
\end{aligned}
$$

Schließlich setzen wir noch

$$\mathcal{C}(\tilde{f})(\tilde{h},\tilde{q}) = (C_{z_1}(\tilde{f})(\tilde{h},\tilde{q}),...,C_{z_K}(\tilde{f})(\tilde{h},\tilde{q})).$$

Bei dem entstehenden Gauß-Newton-Verfahren lösen wir in jedem Iterationsschritt mit $b = (b_1,...,b_K)$ und

$$b_j = \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_j,\cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_1(\tilde{f})](z_j,\cdot)$$

die Gleichung

$$\mathcal{C}(\tilde{f})(\tilde{h}, \tilde{q}) = b. \tag{3.12}$$

Mit der Funktion $[g_1(\tilde{f})](z_j, \cdot)$ bezeichnen wir die Daten, die sich bei der Funktion $\tilde{f}$ im Modell M1 ergeben.
Zur Lösung des Systems (3.12) dient ein Standard-CG-Verfahren.

Algorithmus 3.3.12 (CG-Verfahren)

1. *Wähle einen Startwert* $(\tilde{h}^{(0)}, \tilde{q}^{(0)})$.

2. *Berechne*
$$r^{(m)} = \mathcal{C}^*(\tilde{f})(\mathcal{C}(\tilde{f})(\tilde{h}^{(m)}, \tilde{q}^{(m)}) - b)$$
und setze
$$d^{(m)} = -r^{(m)}, \textit{ falls } m = 0.$$

3. *Berechne*
$$(h^{(m+1)}, q^{(m+1)}) = (h^{(m)}, q^{(m)}) + \alpha_m d^{(m)} \textit{ mit } \alpha_m = \frac{\|r^{(m)}\|^2}{\|\mathcal{C}(\tilde{f})d^{(m)}\|^2}.$$

4. *Bestimme*
$$d^{(m+1)} = -r^{(m+1)} + \beta_m d^{(m)}, \textit{ wobei } \beta_m = \frac{\|r^{(m+1)}\|^2}{\|r^{(m)}\|^2}.$$

Durch das Gauß-Newton-Verfahren haben wir nun die Fouriertransformation von f auf den Ewald Sphären bestimmt. Genau wie bei dem linearen Fall ergeben sich die beiden Möglichkeiten, entweder die Fourierwerte auf ein kartesisches Gitter zu interpolieren und dann schnelle Fouriertransformation anzuwenden (wie im Verfahren IIF) oder die Integration wie im BVD-Verfahren auf den Ewald Sphären durchzuführen. Die beiden hieraus resultierenden Methoden sind NILI II und NILI III.

Algorithmus 3.3.13 (NILI II)

1. *Wähle für jede Richtung* α *einen Startwert* $\tilde{f}^{(0)}$
2. *Löse für jede Richtung* α *das System*
$$\mathcal{C}(\tilde{f}^{(\mu)})(\tilde{h},\tilde{q}) = b$$
mit dem CG-Verfahren 3.3.12
3. *Führe einen Newtonschritt durch*
$$\begin{aligned}\tilde{f}^{(\mu+1)} &= \tilde{f}^{(\mu)} + \tilde{h}\\ b_j &= = \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_j,\cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_1(\tilde{f}^{\mu+1})](z_j,\cdot) \text{ für alle } j = 1,..,K\end{aligned}$$
und gehe zurück zu Schritt 2 (solange bis die gewünschte Auflösung erreicht ist)
4. *Interpoliere* $\mathcal{F}_N f$ *mittels beschleunigter sinc-Reihen auf ein kartesisches Gitter*
5. *Wende schnelle inverse Fouriertransformation an*

Algorithmus 3.3.14 (NILI III)

- *Wähle für jede Richtung* α *einen Startwert* $\tilde{f}^{(0)}$
- *Löse für jede Richtung* α *das System*
$$\mathcal{C}(\tilde{f}^{(\mu)})(\tilde{h},\tilde{q}) = b$$
mit dem CG-Verfahren 3.3.12
- *Führe einen Newtonschritt durch*
$$\begin{aligned}\tilde{f}^{(\mu+1)} &= \tilde{f}^{(\mu)} + \tilde{h}\\ b_j &= = \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_j,\cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_1(\tilde{f}^{\mu+1})](z_j,\cdot) \text{ für alle } j = 1,..,K\end{aligned}$$
und gehe zurück zu Schritt 2 (solange bis die gewünschte Auflösung erreicht ist)
- *Filtere die Daten für jedes* $0 \leq \nu \leq M$
$$w_\nu(\alpha,x) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int\limits_{\substack{\sigma\in\alpha^\perp\\ \|\sigma\|\leq k}} \mathcal{F}_N f((a(\sigma)-k)\alpha+\sigma)(i(a(\sigma)-k))^\nu \frac{\|\Theta\sigma\|k}{a(\sigma)} e^{i\langle\sigma,x\rangle} d\sigma$$
- *Wende Rückprojektion an*
$$f(x) = \sum_{\nu=0}^{M} \frac{\langle\alpha,x\rangle^\nu}{\nu!} \int\limits_{\tilde{S}^1} w_\nu(\alpha,x)d\alpha$$

3.4 Numerische Tests

Die im vorigen Abschnitt hergeleiteten Verfahren müssen sich nun in der Anwendung bewähren. Dazu erzeugen wir eine Reihe von Phantomen und vergleichen die Ergebnisse der Verfahren bezüglich ihrer Rechenzeit und ihrer Genauigkeit. Als Mollifier für die Approximative Inverse wählen wir die Gauß-Glocke

$$e_\gamma(x) = (2\pi)^{-N/2}\gamma^{-N}e^{-\frac{\|x\|^2}{(2\gamma)^2}}.$$

Bei der Wahl der Messabstände lassen wir uns von der Strategie in Kapitel 3.3.1 leiten. An einem Beispiel verdeutlichen wir, dass es sinnvoll ist, bei der Wahl der Messabstände sorgfältig zu sein.
Da die Richtungen unabhängig voneinander betrachtet werden können, lassen sich alle vorgestellten Verfahren sehr leicht parallelisieren. Dies zahlt sich besonders bei den rechenintensiveren nichtlinearen Verfahren aus.

3.4.1 Künstliche Daten

Bei den Tests mit künstlichen Daten konzentrieren wir uns auf den zweidimensionalen Fall. Dies stellt keine große Einschränkung dar, weil die Struktur des Problems in zwei und drei Dimensionen gleich ist. So können wir die Ergebnisse, die wir im zweidimensionalen erhalten, direkt auf den dreidimensionalen Fall übertragen. Zudem lassen sich die Rekonstruktionen im zweidimensionalen besser veranschaulichen.
Bei allen Phantomen haben wir folgende Parameter verwendet:

Wellenlänge λ	$3 \cdot 10^{-10}$
Pixelgröße der Detektorelemente	10^{-6}
Anzahl der Pixel	512
Messrichtungen	800

Wir beginnen die Rekonstruktionen aus exakten Daten. Diese erzeugen wir mit Hilfe der Reihendarstellung aus Kapitel 3.2. Allerdings stellt sich die Berechnung der exakten Daten bei den hohen Wellenzahlen problematisch dar, denn die Koeffizienten a_n der Reihendarstellung liefern bei den hohen Wellenzahlen auch für einen sehr hohen Index noch einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag. Dies sehen wir z.B. in der Besselfunktion $J_n(k\rho)$. Da die Wellenzahl $k = 2.1 \cdot 10^{10}$ und der Objektradius $\rho = 10^{-4}$ ist, benötigen wir Werte ungefähr bis zum Index $n \approx 10^6$. Außerdem kommt noch hinzu, dass bei der Berechnung der a_n für große Indices sowohl im Zähler wie auch im Nenner Auslöschung auftritt. Auswirkungen hat dies besonders auf Oszillationen in der Intensität, die durch Variation im Realteil von f verursacht werden. Der Realteil von f kann wegen diesen Problemen bei der Datenerzeugung auch nicht verlässlich rekonstruiert werden.

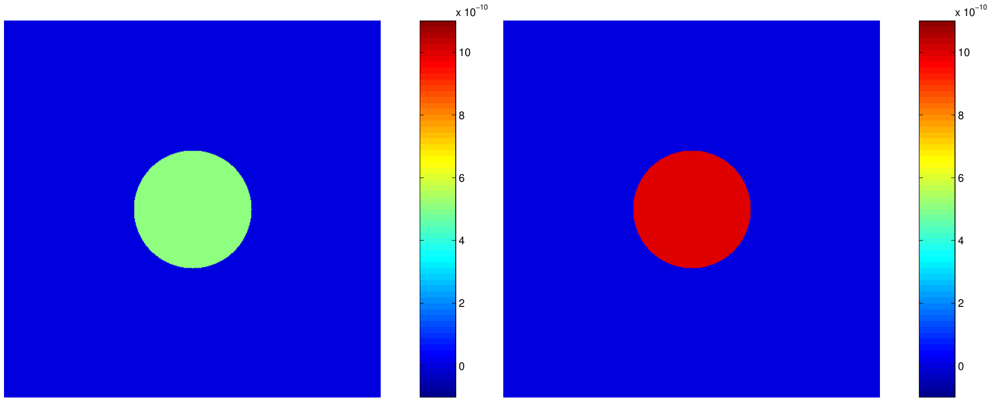

Abbildung 3.2: Phantom A: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

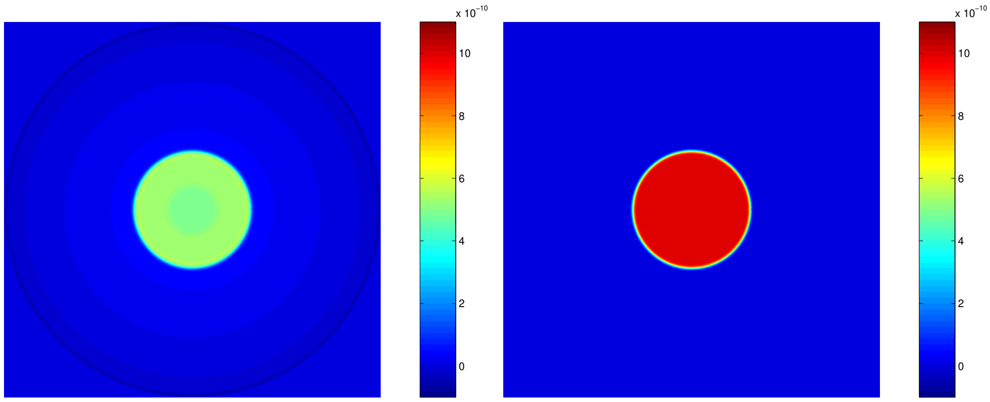

Abbildung 3.3: Rekonstruktion von Phantom A mit MOR bei den Messabständen $z = 0.01, 0.15, 0.35, 0.4$: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

Als erstes Phantom betrachten wir einen Kreis mit Radius $8 \cdot 10^{-5}$, siehe Abbildung 3.2. Eine Rekonstruktion mittels MOR ist in Abbildung 3.3 zu sehen.

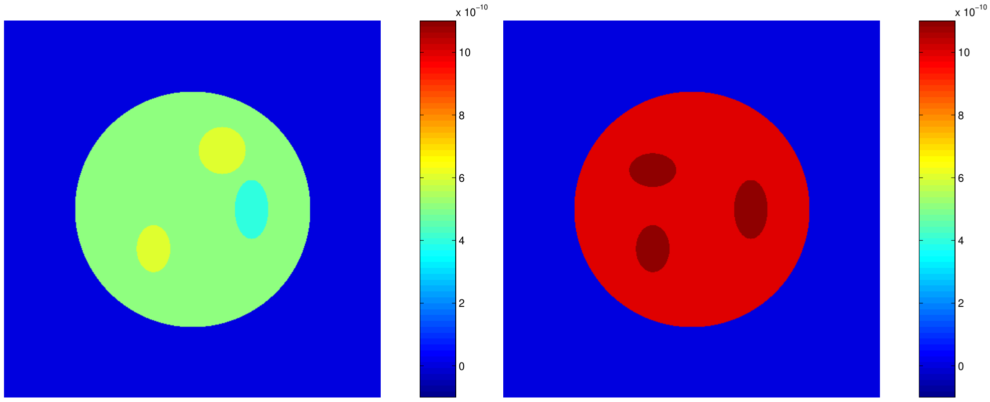

Abbildung 3.4: Phantom B: Realteil (links) , Imaginärteil (rechts)

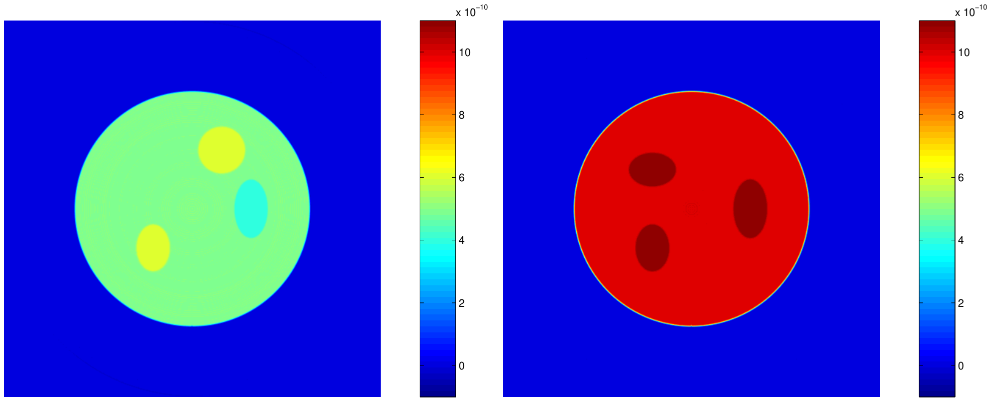

Abbildung 3.5: Rekonstruktion von Phantom B mit MOR bei den Messabständen $z = 0.02, 0.14, 0.77, 0.98$: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

Als Nächstes untersuchen wir die Wahl der Messabstände. Hierzu haben wir das Phantom B, siehe Abbildung 3.4, mit zwei unterschiedlichen Konstellationen von Messabständen aufgezeichnet. Zur Datenerzeugung verwenden wir nun nicht mehr die Reihendarstellung, sondern den Propagationssatz der Born-Approximation.
Eine gute Wahl für die Messabstände ist (siehe Abbildung 3.5)

$$z = (0.02, 0.14, 0.77, 0.98).$$

Auf der anderen Seite stellt

$$z = (0.01, 0.17, 0.33, 0.65),$$

wie wir in Abbildung 3.6 erkennen können, eine schlechte Wahl dar. Der Grund für diesen Unterschied ergibt sich unmittelbar aus der Bewertungsfunktion G aus

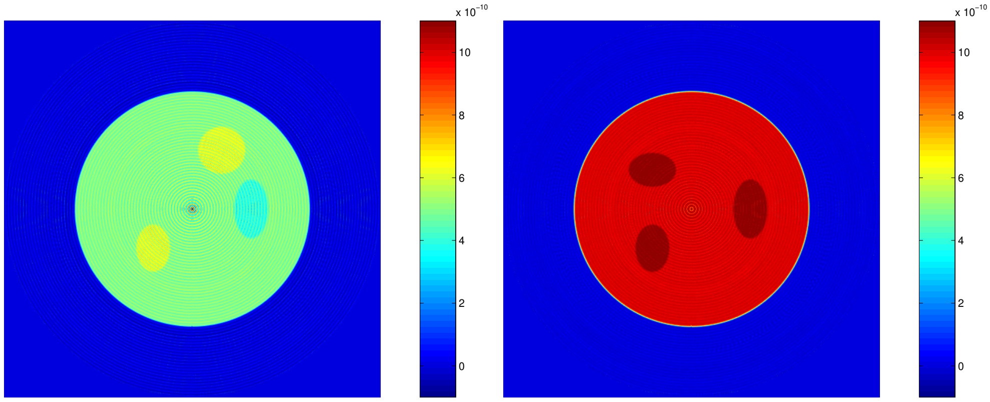

Abbildung 3.6: Rekonstruktion von Phantom B mit MOR bei den Messabständen $z = 0.01, 0.17, 0.33, 0.65$: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

Kapitel 3.3.1. Während die erste Konstellation der Messabstände einen sehr hohen Wert für G liefert, ergibt die Auswertung der zweiten Konstellation einen sehr kleinen Wert. Hieraus resultiert, dass mit der ersten Wahl der Kern stabiler berechnet werden kann als mit der zweiten.

Nun wenden wir uns den Laufzeiten der Algorithmen zu. Die Messung der Rechenzeit bei Phantom B ergab auf einem herkömmlichen Desktop-PC:

PA	MOR	NILI I	IIF	BVD	NILI II	NILI III
319 s	170 s	485 s	27 s	841 s	586 s	1474 s

Die nichtlinearen Verfahren haben jeweils zwei Newtonschritte durchgeführt. Der BVD-Algorithmus verwendete den Wert $M = 1$.
Zu beachten ist, dass die Verfahren, die auf der Parabelnäherung basieren (PA, MOR, NILI I), nur die Hälfte der Messrichtungen benötigen, denn bei dieser Näherung wird die Röntgentransformation verwendet.
Wie zu erwarten, ist der IIF-Algorithmus mit Abstand das schnellste Verfahren. Seine Komplexität ist wegen der schnellen Fouriertransformation $\mathcal{O}(n^2 \log n)$, also deutlich besser als die Verfahren mit Rückprojektion, die eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^3)$ besitzen. Der Geschwindigkeitsvorteil des MOR-Verfahrens über die Paraboloid-Methode PA rührt hauptsächlich von der schnellen Rückprojektion, aber auch von der Approximativen Inversen, deren Kern sehr gut vorberechnet werden kann. Der BVD-Algorithmus hat ungefähr eine fünfmal höhere Rechenzeit als das MOR-Verfahren. Der Grund hierfür ist, dass der BVD-Algorithmus alle Richtungen benötigt und zudem bei einem Wert von $M = 1$ insgesamt zweimal rückprojiziert.
Die nichtlinearen Verfahren haben eine wesentlich höhere Rechenzeit. Hier bietet sich besonders die Möglichkeit der Parallelisierung an, um die Rechenzeit zu

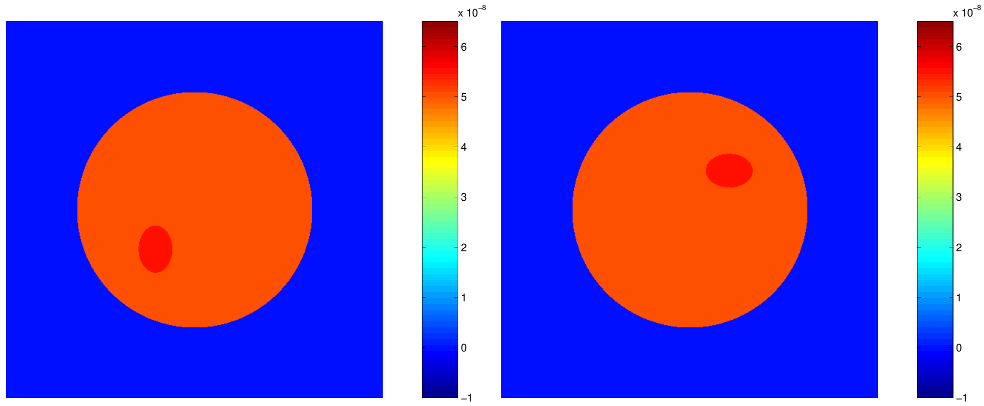

Abbildung 3.7: Phantom C: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

verkürzen.

Als Nächstes analysieren wir die Genauigkeit und Stabilität der Methoden. Dazu erzeugen wir zusätzlich zum Phantom B das Phantom C, siehe Abbildung 3.7 und addieren zu den Daten einen zufälligen Fehler. Bei dem Phantom C handelt es sich um einen stärkeren Streuer. Wir rekonstruieren auf einem 512^2-Gitter mit Schrittweite $h = 10^{-6}$ und nehmen als Messabstände die erste Wahl

$$z = (0.02, 0.14, 0.77, 0.98).$$

Wir erhalten für die Verfahren unter Verwendung der Frobenius-Norm folgende relative Fehler:

Phantom	Datenfehler	PA	MOR	NILI I	IIF	BVD	NILI II	NILI III
B	0%	0.04	0.06	0.06	0.04	0.06	0.03	0.06
B	1%	0.08	0.07	0.08	0.29	0.08	0.31	0.08
B	5%	0.31	0.19	0.27	1.06	0.19	1.17	0.27
C	0%	0.11	0.12	0.06	0.12	0.12	0.04	0.06
C	1%	0.13	0.13	0.08	0.26	0.13	0.25	0.08
C	5%	0.30	0.21	0.24	1.16	0.21	1.13	0.24

Es fällt auf, dass die Paraboloid-Methode bei Phantom B und Phantom C ohne Datenfehler geringfügig bessere Rekonstruktionen liefert als das MOR-Verfahren. Der Grund hierfür ist die schnelle Rückprojektion des MOR-Verfahrens. Dadurch, dass zunächst auf einem Polargitter rekonstruiert wird, tritt bei der abschließenden Interpolation ein zusätzlicher Fehler auf. Anders sieht es hingegen bei Datenfehlern aus. Hier kommt die bessere regularisierende Wirkung des MOR-Verfahrens zum Tragen und die Paraboloid-Methode schneidet deutlich

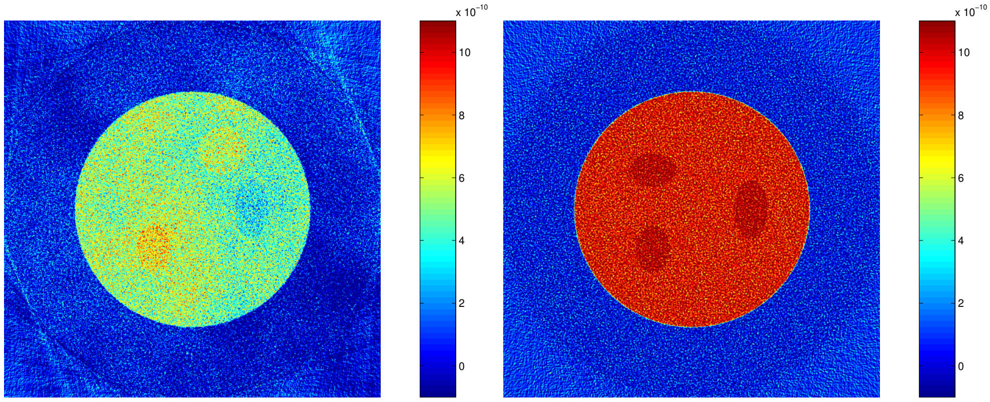

Abbildung 3.8: Rekonstruktion von Phantom B bei 5% Datenfehler mit der Paraboloid-Methode (PA): Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

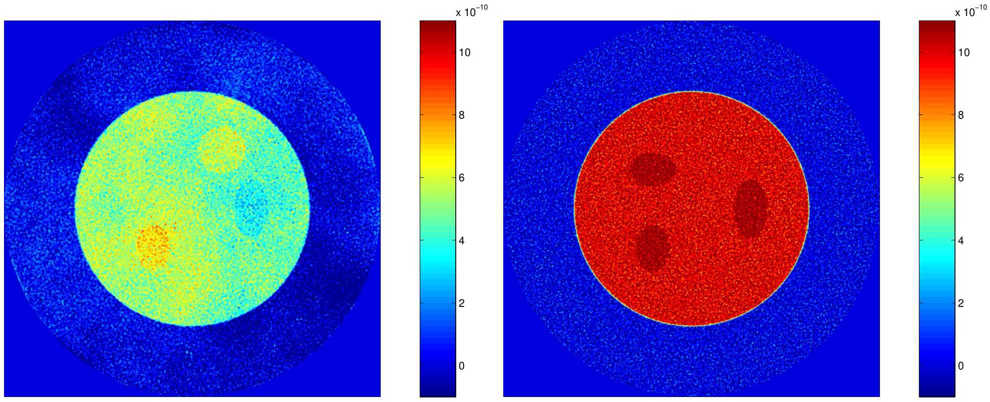

Abbildung 3.9: Rekonstruktion von Phantom B bei 5% Datenfehler mit dem MOR-Verfahren: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

schlechter ab (siehe auch Abbildung 3.8 und 3.9).
Das IIF- und das NILI II Verfahren zeichnen sich durch sehr gute Approximationseigenschaften ohne Datenfehler und durch eine extreme Sensitivität auf Datenfehler aus, siehe Abbildung 3.10. Wie bereits in [38] beschrieben ist hier die Interpolation im Fourierraum kritisch. Die zunächst nur lokalen Interpolationsfehler werden bei der inversen Transformation global auf das gesamte Bild verteilt. Das Ergebnis ist nicht mehr zu gebrauchen.
Da es sich bei Phantom C um einen stärkeren Streuer handelt, sind die linearen Modelle, auf denen die Verfahren PA, MOR, IIF und BVD basieren, nicht mehr ausreichend. Hier zeigt sich die Stärke der nichtlinearen Algorithmen NILI I, NILI II und NILI III. In der Abbildung 3.11 sehen wir bei dem MOR-Verfahren Schattenartefakte, die bei dem nichtlinearen Verfahren NILI I, siehe Abbildung

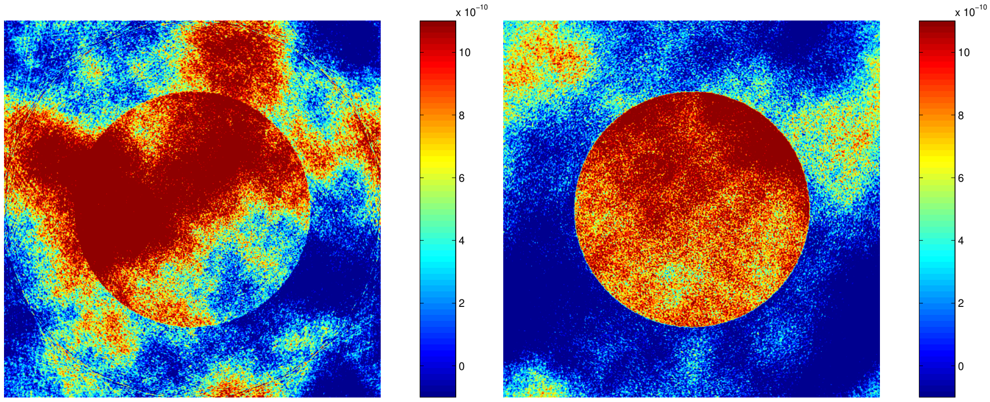

Abbildung 3.10: Rekonstruktion von Phantom B bei 5% Datenfehler mit dem IIF-Verfahren: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

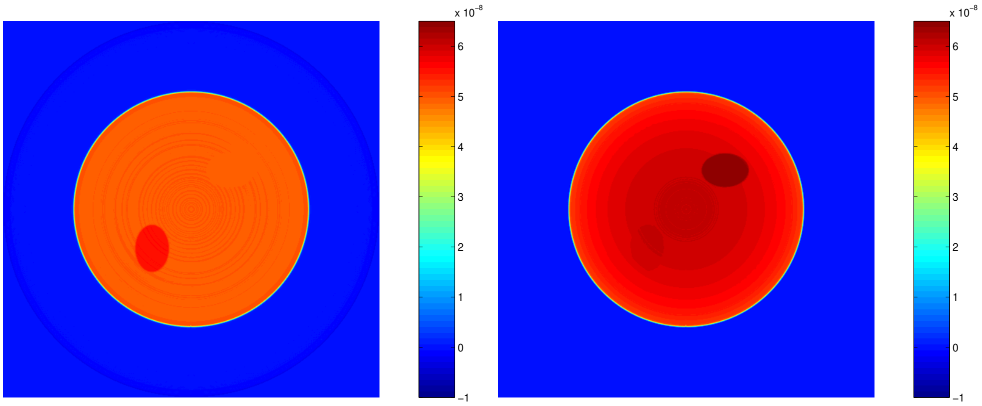

Abbildung 3.11: Rekonstruktion von Phantom C ohne Datenfehler mit dem MOR-Verfahren : Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

3.12, nicht mehr auftreten.
Der BVD-Algorithmus kann bei den Phantomen B und C keine Verbesserung im Vergleich zum MOR-Verfahren verzeichnen, weil die beiden Phantome von ihrer räumlichen Ausdehnung noch zu klein sind. Er ist zwar stabil, benötigt aber eine ungefähr fünfmal höhere Rechenzeit.

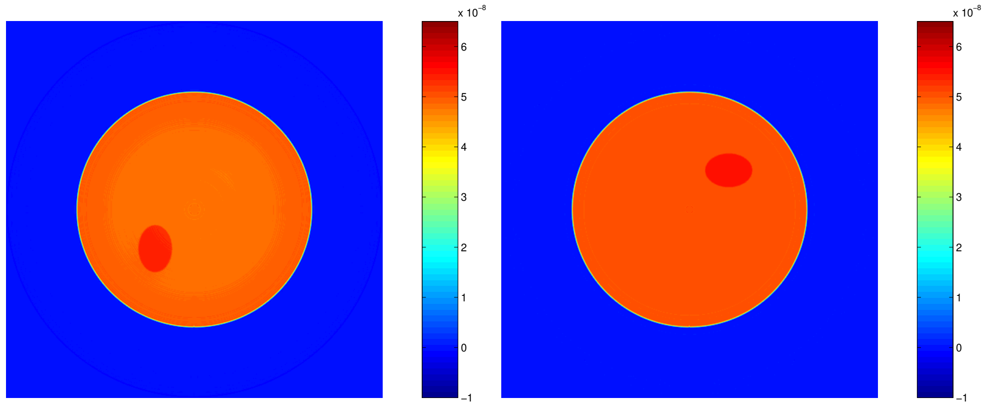

Abbildung 3.12: Rekonstruktion von Phantom C ohne Datenfehler mit dem Verfahren NILI I: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

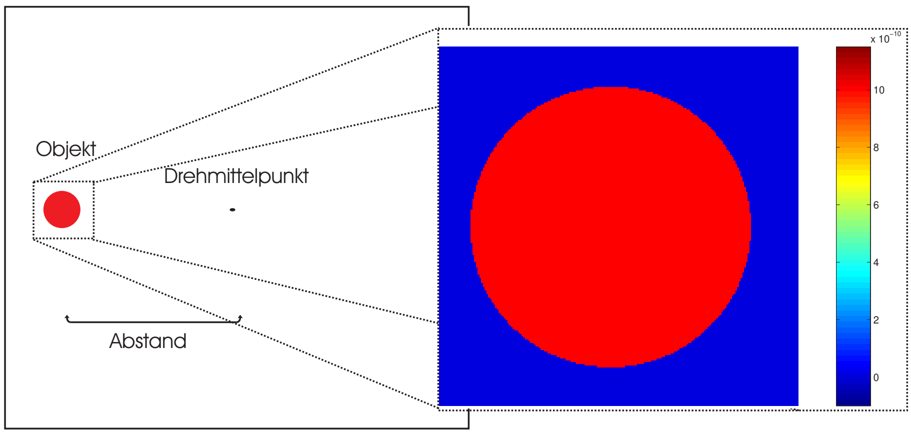

Abbildung 3.13: Phantom D (links) mit einer Vergrößerung des Kreises (rechts)

Betrachten wir schließlich noch ein Phantom, bei dem wir den Zulässigkeitsbereich der Parabelnäherung verlassen. Dazu benötigen wir ein größeres Rekonstruktiongebiet. Daher ändern wir die Messparameter zu

Wellenlänge λ	$800 \cdot 10^{-10}$
Pixelgröße der Detektorelemente	$2 \cdot 10^{-6}$
Anzahl der Pixel	4096
Messrichtungen	800

Als Objekt nehmen wir einen Kreis mit Radius $1.6 \cdot 10^{-4}$, der aus dem Drehmittelpunkt um den Abstand $3 \cdot 10^{-3}$ verschoben ist, siehe 3.13. Die Objektfunktion f, die wir rein reell wählen, ist in einer Vergrößerung in Abbildung 3.13 zu ersehen. Die Rekonstruktion mit dem MOR-Verfahren (Abbildung 3.14 links) zeigt

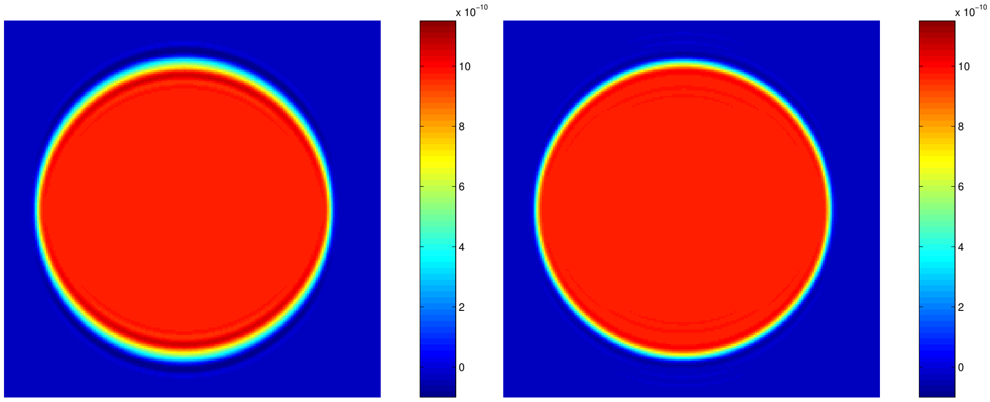

Abbildung 3.14: Vergrößerung der Rekonstruktion von Phantom D mit dem MOR-Verfahren (links) und dem BVD-Algorithmus bei einem Index von $M = 4$ (rechts)

vor allem am oberen und unteren Rand des Objektes einige Verschmierungen. Dies deutet darauf hin, dass die Parabelnäherung hier nicht mehr ganz zutreffend ist. Da der BVD-Algorithmus nicht auf der Parabelnäherung, sondern auf der Born-Approximation beruht, können wir hier bessere Ergebnisse erwarten. In der Tat werden bei dem BVD-Algorithmus mit einem Index von $M = 4$ die Verschmierungen an den Rändern abgemindert (Abbildung 3.14 rechts).

3.4.2 Reale Daten

Nun wenden wir unsere Verfahren auf zwei reale Datensätze an. Hierzu benötigen wir natürlich die dreidimensionalen Varianten der Methoden.
Die beiden Datensätze wurden vom ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) in Grenoble zur Verfügung gestellt. Es handelt sich in beiden Fällen um schwach absorbierende Medien, nämlich um eine Polymerfaser und um einen Polystyren-Schaum.
Auf Grund der Ergebnisse des vorigen Abschnitts benutzen wir zur Rekonstruktion das MOR-Verfahren. Die nichtlinerearen Methoden NILI I und NILI III ergaben keine wesentlichen Verbesserungen in den Rekonstruktionen, weil die Objektfunktionen nur einen sehr kleinen Wertebereich besitzen, so dass die linearen Methoden ausreichen, um eine gute Rekonstruktion zu erhalten.
Bei der ersten Probe handelt es sich um einen Polystyren-Schaum. Hier haben wir die Parameter

Wellenlänge λ	$0.69 \cdot 10^{-10}m$
Pixelgröße der Detektorelemente	$0.95\,\mu m$
Anzahl der Pixel	1024^2
Messrichtungen (Scan von 180°)	700
Messabstände	2.7 cm, 20.7 cm, 50.5 cm, 90.1 cm

Die Intensitätsmessungen einer Projektionsrichtung sind in Abbildung 3.15 zu sehen.
Wir erkennen deutlich, dass die Aufnahme zum Abstand 2.7 cm kaum Kontrast liefert. Es handelt sich also um ein schwach absorbierendes Medium.
In der Rekonstruktion, siehe Abbildungen 3.16 und 3.17, wird dies bestätigt. Wir sehen auch, dass die Phaseninformation einen viel besseren Kontrast liefert als die Absorption. Die rekonstruierten Werte für die Phaseninformation liegen bei $0.5 \cdot 10^{-6}$ und für die Absorption bei $-1 \cdot 10^{-8}$.
Allerdings erkennen wir auch eine Reihe von Streifenartefakten, vor allem in Richtungen, in denen viel Polymer durchstrahlt wird. Dieser Effekt kann zwei Ursachen haben. Zum einen ist die Anzahl der Projektionsrichtungen mit 700 etwas zu klein, ideal wären rund 800, zum anderen wird entlang der Richtungen in denen viel Material durchstrahlt wird, die Intensität sehr stark gemindert. Die zweite Ursache ist auch vergleichbar mit Metallartefakten bei herkömmlicher Computertomographie.

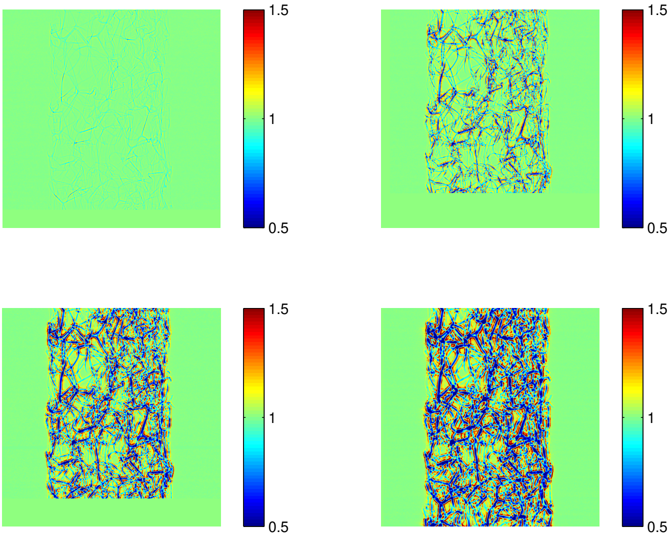

Abbildung 3.15: Intensitätsaufnahmen eines Polystyren-Schaumes für die Abstände 2.7 cm (links oben), 20.7 cm (rechts oben), 50.5 cm (links unten) und 90.1 cm (rechts unten)

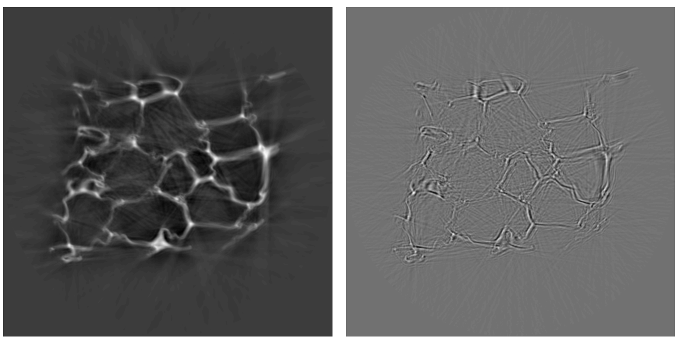

Abbildung 3.16: Schnitt durch das rekonstruierte Objekt in einer Höhe von 466.4 μm: Phaseninformation (links), Absorption (rechts)

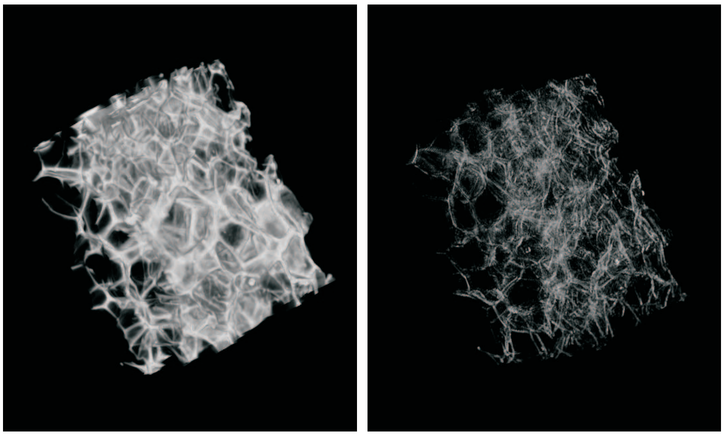

Abbildung 3.17: Räumliche Darstellung der Rekonstruktion des Polystyren-Schaums mit MOR: Phaseninformation (links), Absorption (rechts)

Die Kenngrößen bei der Polymerfaser sind:

Wellenlänge λ	$1.236 \cdot 10^{-10} m$
Pixelgröße der Detektorelemente	$2.8\,\mu m$
Anzahl der Pixel	1024^2
Messrichtungen (180°-Scan)	900
Messabstände	0.3 cm, 4.55 cm, 20 cm, 60 cm

Genau wie bei dem Polystyren-Schaum liefern die Aufnahmen zur Polymerfaser bei kleinen Abständen nur sehr schlechten Kontrast siehe Abbildung 3.18. In der Rekonstruktion hingegen sind die Konturen bei der Absorption besser zu erkennen als bei der Phaseninformation, siehe Abbildung 3.19. Dies wird höchstwahrscheinlich durch die relativ große Pixelgröße von $2.8\,\mu m$ verursacht. Dadurch können die feinen Oszillationen, die durch die Phasenverschiebungen bewirkt werden, nicht mehr hinreichend aufgelöst werden und als Folge verliert die Rekonstruktion der Phaseninformation an Schärfe.
Allerdings bemerken wir bei der Phaseninformation einen besseren Hell-Dunkel-Kontrast. Dies zahlt sich unter anderem bei der räumlichen Darstellung des Objektes aus, siehe Abbildung 3.20. Hier sind die Strukturen besser zu erkennen. Die rekonstruierten Werte für die Phaseninformation liegen bei $4 \cdot 10^{-9}$ und für die Absorption bei $-4.3 \cdot 10^{-11}$.

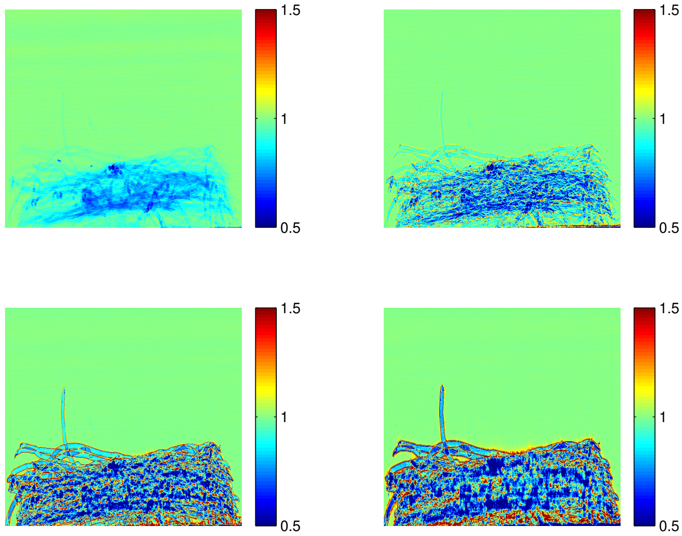

Abbildung 3.18: Intensitätsaufnahmen eines Faserstoffes für die Abstände 0.3 cm (links oben), 4.55 cm (rechts oben), 20 cm (links unten) und 60 cm (rechts unten)

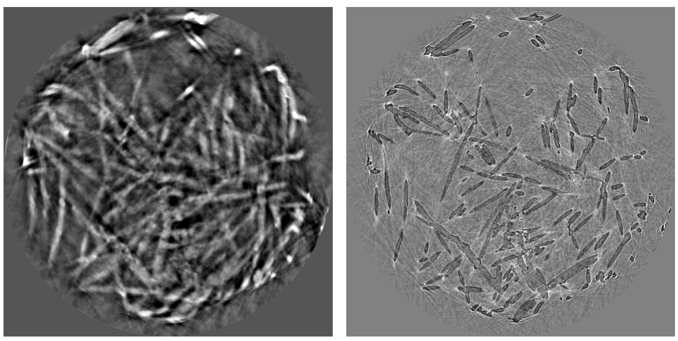

Abbildung 3.19: Schnitt durch das rekonstruierte Objekt in einer Höhe von 1.024mm: Phaseninformation (links), Absorption (rechts)

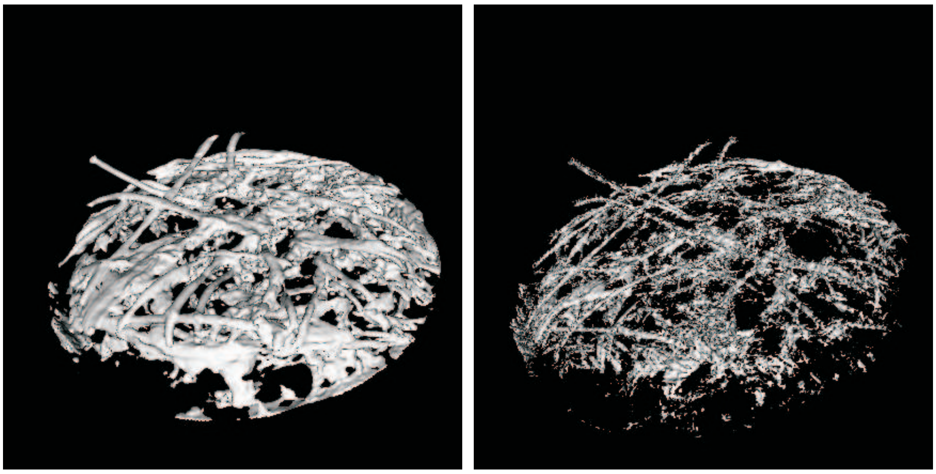

Abbildung 3.20: Räumliche Darstellung der Rekonstruktion des Faserstoffes mit MOR: Phaseninformation (links), Absorption (rechts)

Kapitel 4

Räumliche Phasenobjekte bei Kugelwellen

Die Untersuchungen des vorigen Kapitels basierten auf der Annahme, dass die einfallende Welle als ebene Welle vorliegt. Diese Bedingung kann z.B. bei einem Synchrotron sehr einfach realisiert werden.
Anders sieht es hingegen bei der sogenannten Mikrofocusröhre aus, die sehr gute Aussichten hat, für die labortechnische Anwendung relevant zu werden. Sie erfüllt die Eigenschaft von ebenen Wellen allerdings nicht. Gute Kohärenzbedingungen werden bei einer Mikrofocusröhre durch einen sehr kleinen Brennfleck der Röntgenröhre erzeugt. Dieser Brennfleck kann als Ausgangspunkt einer Kugelwelle angesehen werden.
Da die Messanordnung bei Mikrofocusröhren von besonderer Bedeutung ist, werden wir in diesem Kapitel die Modellierung bezüglich Kugelwellen untersuchen und Rekonstrukionsverfahren entwickeln.
Außer dass die Mikrofocusröhre für die praktische Anwendung von großem Interesse ist, hat sie auch den Vorteil, dass durch diese spezielle Anordnung eine optische Vergrößerung des Objektes erzielt wird.

4.1 Das Vorwärtsmodell und die Erzeugung von Phantomdaten

Ausgangspunkt der mathematischen Modellierung ist wieder die Wellengleichung und daraus abgeleitet die Lippmann-Schwinger-Integralgleichung

$$u_s(x) = -k^2 \int_\Omega G(k\|x-y\|)f(y)(u_i(y)+u_s(y))dy.$$

Im Gegensatz zum vorigen Kapitel haben wir als einfallende Wellen nun keine ebenen Wellen, sondern Kugelwellen. Diese Kugelwellen können wir in der Form

$$u_i(x) = \begin{cases} H_0^{(1)}(k\|x - x_q\|) & \text{für } N = 2 \\ \frac{e^{ik\|x-x_q\|}}{\|x-x_q\|} & \text{für } N = 3 \end{cases}$$

darstellen, wobei x_q der Quellpunkt der Kugelwelle ist.
Bei dem Ansatz mit ebenen Wellen war es uns möglich, bei konstanten Funktionen mit einem kreis- bzw. kugelförmigen Träger das exakte Streufeld u_s anzugeben (siehe Kapitel 3.2). Dies ist für Kugelwellen leider nicht mehr der Fall. Stattdessen müssen wir uns bei der Datenerzeugung auf die Born-Approximation zurückziehen.
Durch die Born-Approxmation erhalten wir

$$u_{s,1}(x) = -k^2 \int_\Omega G(k\|x - y\|) f(y) u_i(y) dy.$$

Bei charakteristischen Funktionen mit kreis- bzw. kugelförmigen Träger können wir das Streufeld $u_{s,1}$ analytisch angeben.

Satz 4.1.1 *Es sei $f = \chi_{B_\rho(0)}$ mit dem Radius $\rho \in \mathbb{R}^+$. Erfüllt der Quellpunkt die Bedingung $\|x_q\| > \rho$, dann ist das Streufeld $u_{s,1}$ für $\|x\| > \rho$ im Fall $N = 2$ gegeben durch*

$$\begin{aligned} u_{s,1}(x) &= -\frac{i\pi k^4}{2} \sum_m H_m^{(1)}(k\|x\|) Y_m(x/\|x\|) H_{-m}^{(1)}(k\|x_q\|) Y_{-m}(x_q/\|x_q\|) \\ &\qquad \cdot (-1)^m \frac{1}{2} \rho^2 \left(J_m^2(k\rho) - J_{m-1}(k\rho) J_{m+1}(k\rho) \right) \end{aligned}$$

und im Fall $N = 3$ durch

$$\begin{aligned} u_{s,1}(x) &= \frac{k^4}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{4\pi} h_m^{(1)}(k\|x\|) h_m^{(1)}(k\|x_q\|) P_m(\cos\beta) \\ &\qquad \cdot \int_0^\rho r^2 j_m^2(kr) dr. \end{aligned}$$

Der Wert β ist der Winkel zwischen x sowie x_q und P_m sind Legendre Polynome.

Beweis: Betrachten wir zunächst den Fall $N = 2$. Mit Ergebnissen aus [2, 12, 36] berechnen wir

$$\begin{aligned} u_{s,1}(x) &= -\frac{ik^2}{4} \int_\Omega H_0^{(1)}(k\|x - y\|) f(y) u_i(y) dy \\ &= -\frac{ik^2}{4} \int_\Omega H_0^{(1)}(k\|x - y\|) H_0^{(1)}(k\|y - x_q\|) dy \\ &= -\frac{ik^2}{4} \int_{S^1} \int_0^\rho r \sum_m \sum_n J_m(kr) H_m^{(1)}(k\|x\|) Y_m(x/\|x\|) Y_{-m}(\theta) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& \qquad \cdot J_n(kr)H_n^{(1)}(k\|x_q\|)Y_n(x_q/\|x_q\|)Y_{-n}(\theta)drd\theta \\
= & -\frac{i\pi k^2}{2}\int_0^\rho r\sum_m J_m(kr)H_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m(x/\|x\|) \\
& \qquad \cdot J_{-m}(kr)H_{-m}^{(1)}(k\|x_q\|)Y_{-m}(x_q/\|x_q\|)dr \\
= & -\frac{i\pi k^2}{2}\sum_m H_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m(x/\|x\|)H_{-m}^{(1)}(k\|x_q\|)Y_{-m}(x_q/\|x_q\|) \\
& \qquad \cdot(-1)^m\int_0^\rho rJ_m(kr)J_m(kr)dr \\
= & -\frac{i\pi k^2}{2}\sum_m H_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m(x/\|x\|)H_{-m}^{(1)}(k\|x_q\|)Y_{-m}(x_q/\|x_q\|) \\
& \qquad \cdot(-1)^m\frac{1}{2}\rho^2\left(J_m^2(k\rho)-J_{m-1}(k\rho)J_{m+1}(k\rho)\right).
\end{aligned}
$$

In drei Dimensionen gestaltet sich die Rechnung etwas aufwendiger

$$
\begin{aligned}
u_{s,1}(x) &= -\frac{k^2}{4\pi}\int_\Omega \frac{e^{ik\|x-y\|}}{\|x-y\|}f(y)u_i(y)dy \\
&= -\frac{k^2}{4\pi}\int_\Omega \frac{e^{ik\|x-y\|}}{\|x-y\|}\frac{e^{ik\|y-x_q\|}}{\|y-x_q\|}dy \\
&= \frac{k^4}{4\pi}\int_{S^2}\int_0^\rho r^2\sum_{m=0}^\infty\sum_{l=-m}^m\sum_{n=0}^\infty\sum_{p=-n}^n j_m(kr)h_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m^l(x/\|x\|)\overline{Y_m^l(\theta)} \\
&\qquad \cdot j_n(kr)h_n^{(1)}(k\|x_q\|)Y_n^p(x_q/\|x_q\|)\overline{Y_n^p(\theta)}drd\theta \\
&= \frac{k^4}{4\pi}\int_{S^2}\int_0^\rho r^2\sum_{m=0}^\infty\sum_{l=-m}^m\sum_{n=0}^\infty\sum_{p=-n}^n j_m(kr)h_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m^l(x/\|x\|)\overline{Y_m^l(\theta)} \\
&\qquad \cdot j_n(kr)h_n^{(1)}(k\|x_q\|)Y_n^p(x_q/\|x_q\|)(-1)^pY_n^{-p}(\theta)drd\theta \\
&= \frac{k^4}{2}\int_0^\rho r^2\sum_{m=0}^\infty\sum_{l=-m}^m(-1)^p j_m(kr)h_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m^l(x/\|x\|) \\
&\qquad \cdot j_m(kr)h_m^{(1)}(k\|x_q\|)Y_m^{-l}(x_q/\|x_q\|)dr \\
&= \frac{k^4}{2}\sum_{m=0}^\infty\sum_{l=-m}^m h_m^{(1)}(k\|x\|)Y_m^l(x/\|x\|)h_m^{(1)}(k\|x_q\|)\overline{Y_m^l(x_q/\|x_q\|)} \\
&\qquad \cdot\int_0^\rho r^2 j_m(kr)j_m(kr)dr \\
&= \frac{k^4}{2}\sum_{m=0}^\infty\frac{2m+1}{4\pi}h_m^{(1)}(k\|x\|)h_m^{(1)}(k\|x_q\|)P_m(\cos\beta) \\
&\qquad \cdot\int_0^\rho r^2 j_m(kr)j_m(kr)dr.
\end{aligned}
$$

Hierbei ist β der Winkel zwischen $x/\|x\|$ und $x_q/\|x_q\|$.

$\square$

Leider gibt es für die Anordnung mit Kugelwellen keinen Satz, der vergleichbar mit dem Propagationssatz ist. Um einen schnellen Rekonstruktionsalgorithmus abzuleiten, kommen wir somit nicht umhin, noch weitere Approximationen durchzuführen. Dies ist aber kein Problem, da durch die hohe Wellenzahl k die verursachten Approximationsfehler klein sind. Wir gehen nun davon aus, dass

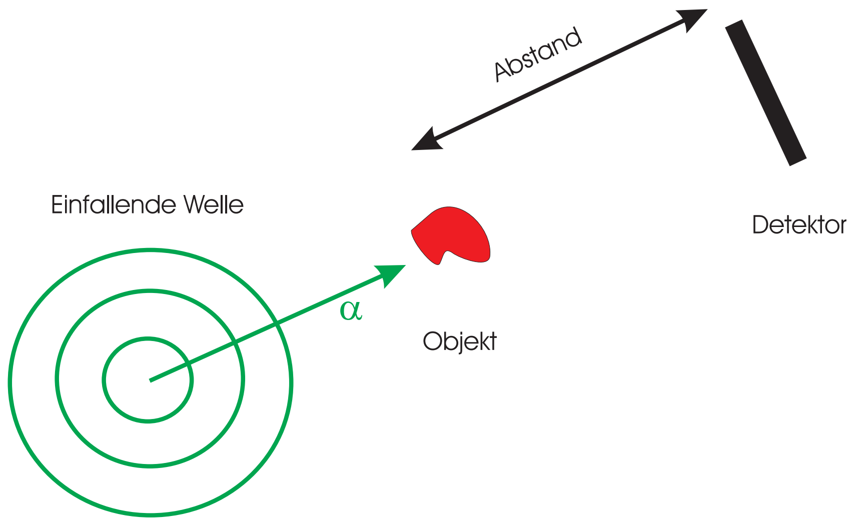

Abbildung 4.1: Messanordnung für einfallende Kugelwellen

der Quellpunkt x_q genau gegenüber dem Detektor liegt (siehe Abbildung 4.1), also

$$x_q = -z_q \alpha.$$

Wir nähern das einfallende Feld im zweidimensionalen durch

$$u_{i,1}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi k \|x - x_q\|}} e^{ik\|x-x_q\| - 1/4 i\pi}$$

an. Das Feld $u_{i,1}$ hat nun dasselbe Aussehen wie das einfallende Feld im dreidimensionalen. Die folgenden Näherungen führen wir deshalb in zwei und drei Raumdimensionen durch. Wir zerlegen zunächst $x = t\alpha + \tilde{x}$ mit $\tilde{x} \in \alpha^\perp$. Danach approximieren wir die Norm im Nenner durch

$$\|x - x_q\| = \|(t + z_q)\alpha + \tilde{x}\| \approx t + z_q$$

und die Norm im Argument der Exponentialfunktion durch

$$\|x - x_q\| = \|(t + z_q)\alpha + \tilde{x}\| \approx z_q + \frac{\|\tilde{x}\|^2}{2z_q} + t.$$

Wir erhalten

$$u_{i,2}(t\alpha+\tilde{x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi k(z_q+t)}} e^{ik(t+z_q)} e^{\frac{i\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}} & \text{für } N=2 \\ \frac{1}{z_q+t} e^{ik(t+z_q)} e^{\frac{i\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}} & \text{für } N=3 \end{cases}.$$

Wollen wir das Streufeld im Inneren des Objektes f auswerten, so nähern wir zusätzlich den Term im Nenner durch

$$z_q + t \approx z_q$$

und es ist

$$u_{i,3}(t\alpha+\tilde{x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi k z_q}} e^{ik(t+z_q)} e^{\frac{i\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}} & \text{für } N=2 \\ \frac{1}{z_q} e^{ik(t+z_q)} e^{\frac{i\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}} & \text{für } N=3. \end{cases}$$

Diese Näherung für u_i setzen wir nun in die Born-Approximation ein. Es ist

$$u_{s,4}(z\alpha+s) = -k^2 \int_\Omega G(k\|z\alpha+s-y\|) f(y) u_{i,3}(y) dy.$$

Leider ist auch für diese Integralgleichung kein Resultat bekannt, das auf eine schnelle Inversionsformel führen würde. Deshalb approximieren wir den Kern $G(k\|z\alpha+s-y\|)$ wie im Fall ebener Wellen durch die Parabelnäherung. Es ergibt sich

$$u_{s,5}(z\alpha+s) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{ik}}{2\pi\sqrt{z_q z}} e^{ik(z+z_q)} \int_{\alpha^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k\|\tilde{y}\|^2}{2z_q}} e^{i\frac{k\|s-\tilde{y}\|^2}{2z}} f(t\alpha+\tilde{y}) dt d\tilde{y} & \text{für } N=2 \\ -\frac{k^2}{4\pi z_q z} e^{ik(z+z_q)} \int_{\alpha^\perp} \int_{\mathbb{R}} e^{i\frac{k\|\tilde{y}\|^2}{2z_q}} e^{i\frac{k\|s-\tilde{y}\|^2}{2z}} f(t\alpha+\tilde{y}) dt d\tilde{y} & \text{für } N=3. \end{cases}$$

Mit diesem Feld $u_{s,5}$ definieren wir nun das erste Modell bezüglich Kugelwellen.

Modell 5 (M5): Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^\perp$ der Zusammenhang

$$I_5(z,\alpha,s) = |u_{i,2}(z\alpha+s) + u_{s,5}(z\alpha+s)|^2.$$

Als weiteres Modell vernachlässigen wir den quadratischen Anteil im Streufeld $u_{s,5}$.

Modell 6 (M6): Es sei f die Objektfunktion, dann gilt für $s \in \alpha^\perp$ der Zusammenhang

$$I_6(z,\alpha,s) = |u_{i,2}(z\alpha+s)|^2 + 2\mathrm{Re}\left(u_{i,2}(z\alpha+s)\overline{u_{s,5}(z\alpha+s)}\right).$$

Wir untersuchen nun die Güte der Modelle M5 und M6. Dazu müssen wir die Differenz von I_5 bzw I_6 zur exakten Intensität berechnen. Zuerst analysieren wir den Fehler, der durch die Approximation von u_i entsteht.

Lemma 4.1.2 *Es sei $t > -z_q$, dann gibt es ein Polynom Π_2 homogen vom Grad 2 und ein Polynom Π_4 homogen vom Grad 4, so dass gilt*

$$|u_i(t\alpha+\tilde{x})-u_{i,2}(t\alpha+\tilde{x})| \leq \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3(z_q+t)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z_q+t))^{5/2}}\right) + \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k(z_q+t)}} \left\{ \frac{\|\tilde{x}\|^2}{2(z_q+t)^2} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{(z_q+t)^2}\right)\right) + \right. \\ \left. \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right\} & \text{für } N=2 \\ \\ \frac{1}{(z_q+t)} \left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{2(z_q+t)^2} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{(z_q+t)^2}\right)\right) + \right. \\ \left. \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right) & \text{für } N=3 \end{cases}$$

und

$$|u_i(t\alpha+\tilde{x})-u_{i,3}(t\alpha+\tilde{x})| \leq \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3(z_q+t)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z_q+t))^{5/2}}\right) + \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k z_q}} \left\{ \frac{|t|}{2z_q} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right) + \right. \\ \left. \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right\} & \text{für } N=2 \\ \\ \frac{1}{z_q} \left(\frac{|t|}{2z_q} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right) + \right. \\ \left. \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right) & \text{für } N=3. \end{cases}$$

Beweis: Wie im Beweis zu Lemma 3.2.6 gilt

$$\left| H_0^{(1)}(k\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|) - \frac{\sqrt{2}e^{ik\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|-1/4i\pi}}{\sqrt{\pi k\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|}} \right| \leq$$
$$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi k^3(z_q+t)^3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(k(z_q+t))^{5/2}}\right).$$

Desweiteren ist in zwei Raumdimensionen nach einer ähnlichen Rechnung wie im Beweis zu Lemma 3.2.7

$$\left| \frac{e^{ik\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|}}{\sqrt{\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|}} - \frac{e^{ik(t+z_q)}e^{\frac{ik\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}}}{\sqrt{z_q+t}} \right|$$
$$\leq \frac{1}{\sqrt{z_q+t}} \left\{ \frac{\|\tilde{x}\|^2}{2(z_q+t)^2} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{(z_q+t)^2}\right)\right) + \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k\mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right\}$$

und

$$\left| \frac{e^{ik\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|}}{\sqrt{\|t\alpha+\tilde{x}-x_q\|}} - \frac{e^{ik(t+z_q)}e^{\frac{ik\|\tilde{x}\|^2}{2z_q}}}{\sqrt{z_q}} \right|$$
$$\leq \frac{1}{\sqrt{z_q}} \left\{ \frac{|t|}{2z_q} + \mathcal{O}\left(\Pi_2\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right) + \frac{\|\tilde{x}\|^2|t|}{2z_q^2} + z_q k \mathcal{O}\left(\Pi_4\left(\frac{\|\tilde{x}\|^2}{z_q^2}, \frac{|t|}{z_q}\right)\right)\right\}$$

mit Polynomen Π_n homogen vom Grad n.
Analog folgt die Aussage im Fall $N = 3$.

□

Betrachten wir die ckarakteristischen Größen der Phasentomographie zusammen mit einem Quellabstand von $z_q = 1$ und setzen diese in das vorige Lemma ein, dann erkennen wir, dass der Approximationsfehler vernachlässigbar klein ist.
Um den Gesamtfehler von I_5 und I_6 bezüglich der exakten Intensität anzugeben, müssen wir nun die Fehlerabschätzung für $u_{i,2}$ und $u_{i,3}$ mit den Abschätzungen zur Parabelnäherung, die wir in Kapitel 3.2.3 bereits ausführlich diskutiert haben, kombinieren. Durch Anwenden der Dreiecksungleichung ist dies ohne weiteres möglich, führt aber zu sehr langen und unübersichlichen Formeln, die zudem auch keine wesentlich neuen Erkenntnisse liefern. Aus diesem Grund verzichten wir an dieser Stelle auf eine exakte Darstellung.

4.2 Verfahren zur Rekonstruktion

Die Herleitung von Rekonstruktionsverfahren für die Modelle M5 und M6 gestaltet sich als nicht so aufwendig, denn die beiden Modelle lassen sich, wie wir im Folgenden sehen werden, auf den Fall ebener Wellen zurückführen.
Definieren wir zunächst die Datenfunktionen:

$$g_5(z,\alpha,s) = \frac{I_5(z\alpha,s)}{|u_{i,2}(z\alpha+s)|^2} - 1.$$

und

$$g_6(z,\alpha,s) = \frac{I_6(z\alpha,s)}{|u_{i,2}(z\alpha+s)|^2} - 1.$$

Durch das folgende Resultat erkennen wir die Verbindung zum Fall ebener Wellen.

Satz 4.2.1 *Es gilt*

$$u_{s,5}(z\alpha+s) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{ik}}{2\pi\sqrt{z_q z}} e^{ik\left(z+z_q+\frac{\|s\|^2}{2(z+z_q)}\right)} \int_{\alpha^\perp} \frac{z_q}{z_q+z} e^{i\frac{kz_q\|s-\tilde{y}\|^2}{2z(z_q+z)}} \mathcal{P}f\left(\alpha, \frac{z_q}{z_q+z}\tilde{y}\right) d\tilde{y} & \textit{für } N=2 \\ -\frac{k^2}{4\pi z_q z} e^{ik\left(z+z_q+\frac{\|s\|^2}{2(z+z_q)}\right)} \int_{\alpha^\perp} \frac{z_q^2}{(z_q+z)^2} e^{i\frac{kz_q\|s-\tilde{y}\|^2}{2z(z_q+z)}} \mathcal{P}f\left(\alpha, \frac{z_q}{z_q+z}\tilde{y}\right) d\tilde{y} & \textit{für } N=3. \end{cases}$$

Beweis: Wir zeigen die Aussage für $N=2$. Der Fall $N=3$ verläuft analog.

$$
\begin{aligned}
u_{s,5}(z\alpha+s) \quad \cdot \quad & e^{-ik\left(z+z_q+\frac{\|s\|^2}{2(z+z_q)}\right)} \\
&= -\frac{\sqrt{i}k}{2\pi\sqrt{z_q z}} e^{-ik\frac{\|s\|^2}{2(z_q+z)}} \int_{\alpha^\perp} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} e^{i\frac{k\|\tilde{y}\|^2}{2z_q}} \mathcal{P}f(\alpha,\tilde{y})d\tilde{y} \\
&= -\frac{\sqrt{i}k}{2\pi\sqrt{z_q z}} \int_{\alpha^\perp} e^{i\frac{k\left(z_q(z_q+z)\|s-\tilde{y}\|^2+z(z_q+z)\|\tilde{y}\|^2-zz_q\|s\|^2\right)}{2zz_q(z_q+z)}} \mathcal{P}f(\alpha,\tilde{y})d\tilde{y} \\
&= -\frac{\sqrt{i}k}{2\pi\sqrt{z_q z}} \int_{\alpha^\perp} e^{i\frac{k\|z_q s-(z_q+z)\tilde{y}\|^2}{2zz_q(z_q+z)}} \mathcal{P}f(\alpha,\tilde{y})d\tilde{y} \\
&= -\frac{\sqrt{i}k}{2\pi\sqrt{z_q z}} \int_{\alpha^\perp} \frac{z_q}{z_q+z} e^{i\frac{kz_q\|s-\tilde{y}\|^2}{2z(z_q+z)}} \mathcal{P}f\left(\alpha, \frac{z_q}{z_q+z}\tilde{y}\right) d\tilde{y}.
\end{aligned}
$$

□

Wir definieren den Operator

$$V_{\frac{z_q}{z_q+z}} g(\alpha,s) = g\left(\alpha, \frac{z_q}{z_q+z}s\right)$$

und erhalten mit der Notation aus Kapitel 3.2.3

$$
\begin{aligned}
g_5(z,\alpha,s) \quad = \quad & e^{-ikz} P_{\frac{z(z+z_q)}{z_q}} V_{\frac{z_q}{z_q+z}} \mathcal{P}f(\alpha,s) + e^{ikz} \overline{P_{\frac{z(z+z_q)}{z_q}} V_{\frac{z_q}{z_q+z}} \mathcal{P}f(\alpha,s)} \\
& + \left| P_{\frac{z(z+z_q)}{z_q}} V_{\frac{z_q}{z_q+z}} \mathcal{P}f(\alpha,s) \right|^2
\end{aligned}
$$

bzw.

$$g_6(z,\alpha,s) = e^{-ikz} P_{\frac{z(z+z_q)}{z_q}} V_{\frac{z_q}{z_q+z}} \mathcal{P}f(\alpha,s) + e^{ikz} \overline{P_{\frac{z(z+z_q)}{z_q}} V_{\frac{z_q}{z_q+z}} \mathcal{P}f(\alpha,s)}.$$

Wir sehen nun, dass die Modelle M5 und M3 bzw. M6 und M4 von der Struktur her sehr ähnlich sind. Im Grenzfall $\|z_q\| \to \infty$ erhalten wir, wie zu erwarten, den Fall ebener Wellen. Es ist daher möglich die Ideen, die wir bereits im dritten Kapitel ausgearbeitet haben, auch hier anzuwenden.
Mit Hilfe derselben Argumente wie in Satz 3.3.1 und Satz 3.3.4 können wir Eindeutigkeitsresultate zu den Modellen M5 und M6 angeben.

Satz 4.2.2 *Es seien $z_1, z_2 > 0$ verschieden und f habe kompakten Träger. Dann lässt sich die Funktion f eindeutig aus den Messungen $g_5(z_1,\cdot,\cdot)$ und $g_5(z_2,\cdot,\cdot)$ oder $g_6(z_1,\cdot,\cdot)$ und $g_6(z_2,\cdot,\cdot)$ bestimmen.*

Auch bei der Herleitung von Rekonstruktionsverfahren greifen wir auf die Ergebnisse aus dem dritten Kapitel zurück. Im Fourierraum ergibt sich für das Modell

M6 die Gleichung

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{N-1}g_6(z,\alpha,\sigma) &= \frac{-ik}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\left(\alpha,\frac{z_q+z}{z_q}\sigma\right)\\ &\quad+\frac{ik}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f\left(\alpha,\frac{z_q+z}{z_q}\sigma\right)}.\end{aligned}$$

Umtransformieren liefert

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{N-1}g_6\left(z,\alpha,\frac{z_q}{z_q+z}\sigma\right) &= \frac{-ik}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\left(\alpha,\sigma\right)\\ &\quad+\frac{ik}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f\left(\alpha,\sigma\right)}.\end{aligned}$$

Nun sind wir in exakt derselben Situation wie im Modell M4, siehe Kapitel 3.3.1, und können deshalb als Verfahren eine Variante des MOR-Verfahrens benutzen. Die einzige Schwierigkeit besteht darin, dass wir die Fouriertransformation auf einem um $\frac{z_q}{z_q+z}$ gestauchten Gitter benötigen. Hierfür gibt es zwei Möglichkeiten. Erstens können wir mittels schneller Fouriertransformation die Fouriertransformierte von g_6 berechnen und dann, z.B. mit beschleunigten sinc-Reihen, die Werte an den Stellen $\frac{z_q}{z+z_q}\sigma$ interpolieren. Diese Methode reagiert aber sehr sensitiv auf Datenfehler, wie wir am Beispiel des IIF-Verfahrens schon gesehen haben. Als Alternative interpolieren wir zunächst g_6 auf ein um $\frac{z_q+z}{z_q}$ gestrecktes Gitter und erhalten dann die Fouriertransformierte auf dem um $\frac{z_q}{z_q+z}$ gestauchten Gitter. Auch hier müssen wir interpolieren, allerdings im Ortsraum. In den numerischen Tests zeigte sich, dass lineare Interpolation merkliche Artefakte erzeugt. Wir haben daher kubische Splines verwendet.
Der Rekonstruktionkern hat folgende Gestalt

$$\mathcal{F}_{N-1}\tilde{\Psi}(\sigma) =$$

$$\frac{2i\|\Theta\sigma\|\hat{e}_\gamma(\sigma)}{k\left(K^2-\left|\sum_{l=1}^K e^{i\frac{z_l z_q\|\sigma\|^2}{k(z_q+z_l)}}\right|^2\right)}\begin{pmatrix} -e^{-i\frac{z_1z_q\|\sigma\|^2}{2k(z_q+z_l)}}\left(K-\sum_{l=1}^K e^{-i\frac{z_q^2(z_l-z_1)\|\sigma\|^2}{k(z_q+z_1)(z_q+z_l)}}\right)\\ \vdots \\ -e^{-i\frac{z_Kz_q\|\sigma\|^2}{2k(z_q+z_K)}}\left(K-\sum_{l=1}^K e^{-i\frac{z_q^2(z_l-z_K)\|\sigma\|^2}{k(z_q+z_l)(z_q+z_K)}}\right)\end{pmatrix}$$

und das resultierende MOR-Verfahren für Kugelwellen lautet:

Algorithmus 4.2.3 (KMOR)
Vorberechnung:

- *Berechne den Rekonstruktionskern* $\tilde{\Psi}$

Hauptberechnung:

- *Interpoliere mit kubischen Splines für jeden Abstand* z *und jede Richtung* α *die Datenfunktion* g_6 *auf das um* $\frac{z_q+z}{z_q}$ *gestreckte Gitter*

- *Bestimme*

$$w(\alpha, s) = \mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\sum_{l=1}^{K} \mathcal{F}_{N-1}\overline{\tilde{\Psi}_l}\ \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}\left(z_l, \alpha, \frac{z_q}{z_q+z}\ .\right)\right)$$

- *Wende schnelle Rückprojektion an:*

$$f = \mathcal{P}^* w$$

Betrachten wir nun das Modell M5, das wir wieder mit einem Gauß-Newton-Verfahren lösen werden. Im Fourierraum erhalten wir für einen Abstand z den Zusammenhang

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{N-1}g_5\left(z, \alpha, \frac{z_q}{z_q+z}\sigma\right) \quad = \quad & \frac{-ik}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\,(\alpha,\sigma) + \\ & \frac{ik}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)}{2kz_q}\|\sigma\|^2}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f\,(\alpha,\sigma)} + \\ & \mathcal{F}_{N-1}\left(\left|\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)\right|^2\right)(\sigma).\end{aligned}$$

Nach analogem Vorgehen wie in Kapitel 3.3.2 definieren wir

$$\begin{aligned}&[D_z(\mathcal{P}f)(h,q)]\left(\frac{z_q}{z_q+z}\sigma\right) = \\ &\quad -\frac{ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\sigma\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}h(\sigma) + \frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\sigma\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}q(\sigma) + \\ &\quad \mathcal{F}_{N-1}\left\{\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}\mathcal{P}f\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}q\right)\right. \\ &\quad \left. + \mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}\right)\mathcal{F}_{N-1}^{-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}h\right)\right\}(\sigma)\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\mathcal{P}f) \quad : \quad & H^2 \quad \to \quad H^K \\ & (h,q) \quad \mapsto \quad \mathcal{D}(\mathcal{P}f)(h,q) := (D_{z_1}(\mathcal{P}f)(h,q), ..., D_{z_K}(\mathcal{P}f)(h,q)).\end{aligned}$$

Unmittelbar erhalten wir wie in Satz 2.2.11

$$\mathcal{D}^*(\mathcal{P}f)(\mathcal{F}_{N-1}g(z_1,.),...,\mathcal{F}_{N-1}g(z_K,\cdot)) = \sum_{j=1}^{K} D^*_{z_j}(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}g(z_j,\cdot)$$

und

$$\begin{aligned}
&[D^*_z(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta) = \\
&\quad\left(\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}w\left(\frac{z_q}{z_q+z}\,\cdot\right)\right)(\eta) + \left([\hat{Q}'^*(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta)\right)_1,\right.\\
&\quad\left.-\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\left(\frac{ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}w\left(\frac{z_q}{z_q+z}\,\cdot\right)\right)(\eta) + \left([\hat{Q}'^*_z(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta)\right)_2\right)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
&[\hat{Q}'^*_z(\mathcal{P}f)\mathcal{F}_{N-1}w](\eta) = \\
&\left(\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\left\{\frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}\left(\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\mathcal{P}f\right)w\left(\frac{z_q}{z_q+z}\,\cdot\right)\right)\right\},\right.\\
&\left.\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\left\{\frac{-ki}{2}e^{-i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}_{N-1}\left(\mathcal{F}_{N-1}\left(\frac{ki}{2}e^{i\frac{z(z_q+z)\|\cdot\|^2}{2kz_q}}\mathcal{F}^{-1}_{N-1}\overline{\mathcal{P}f}\right)w\left(\frac{z_q}{z_q+z}\,\cdot\right)\right)\right\}\right).
\end{aligned}$$

Setzen wir nun noch $b = (b_1, .., b_K)$ mit

$$b_j = \mathcal{F}_{N-1}g^{exp}(z_j,\cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_5(\mathcal{P}f)](z_j,\cdot),$$

dann lässt sich das Problem eines Newtonschrittes mit den obigen Bezeichnungen schreiben als

$$\mathcal{D}(\mathcal{P}f)(h,q) = b. \tag{4.1}$$

Zur Lösung dieses Systems setzen wir auch hier ein Standard CG-Verfahren ein.

Algorithmus 4.2.4 (CG-Verfahren)

- *Wähle einen Startwert* $(h^{(0)}, q^{(0)})$.
- *Berechne*
$$r^{(m)} = \mathcal{D}^*(\mathcal{P}f)(\mathcal{D}(\mathcal{P}f)(h^{(m)}, q^{(m)}) - b)$$
und setze
$$d^{(m)} = -r^{(m)}, \text{ falls } m = 0.$$
- *Berechne*
$$(h^{(m+1)}, q^{(m+1)}) = (h^{(m)}, q^{(m)}) + \alpha_m d^{(m)} \text{ mit } \alpha_m = \frac{\|r^{(m)}\|^2}{\|\mathcal{D}(\mathcal{P}f)d^{(m)}\|^2}.$$
- *Bestimme*
$$d^{(m+1)} = -r^{(m+1)} + \beta_m d^{(m)}, \text{ wobei } \beta_m = \frac{\|r^{(m+1)}\|^2}{\|r^{(m)}\|^2}.$$

Schließlich gelangen wir zum Gauß-Newton-Verfahren für Kugelwellen:

Algorithmus 4.2.5 (KNILI I)

1. *Wähle einen Startwert* $w^{(0)}$.
2. *Löse das System*
$$\mathcal{B}(w^{(\mu)})(h, q) = b$$
mit Hilfe von Algorithmus 4.2.4 iterativ.
3. *Führe einen Newtonschritt durch*
$$\begin{aligned} w^{(\mu+1)} &= w^{(\mu)} + h \\ b_j &= \mathcal{F}_{N-1} g^{exp}(z_j, \cdot) - \mathcal{F}_{N-1}[g_5(w^{(\mu+1)})](z_j, \cdot) \text{ für } j = 1, .., K \end{aligned}$$
und gehe zurück zu Schritt 2 (solange bis gewünschte Auflösung erreicht ist)
4. *Wende gefilterte Rückprojektion an:*
$$f = \mathcal{P}^{-1} w$$

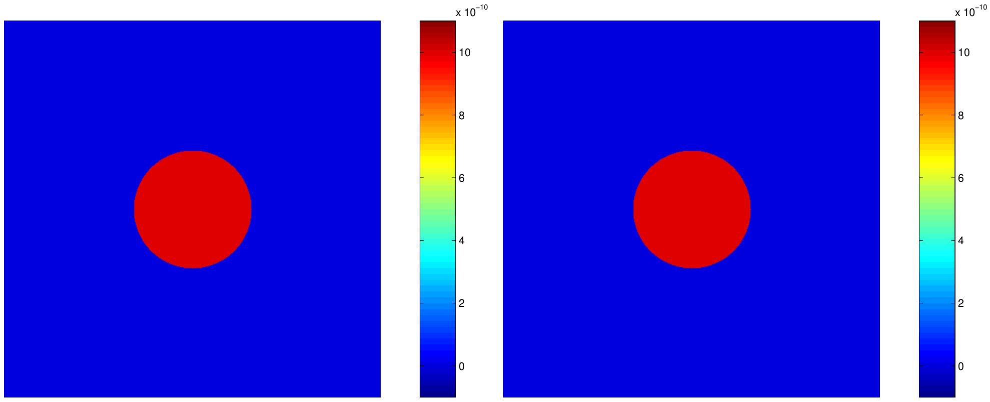

Abbildung 4.2: Phantom D: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

4.3 Numerische Tests

Bei den Tests beschränken wir uns wie im dritten Kapitel auf den zweidimensionalen Fall.
Die Daten erzeugen wir mittels Satz 4.1.1. Ähnlich wie im Fall ebener Wellen benötigen wir für die Auswertung der Summe aus Satz 4.1.1 eine sehr große Anzahl von Koeffizienten. Zudem tritt wieder das Problem der Auslöschung bei großen Indices auf.
In dem Testlauf verwenden wir einen Kreis mit Radius $80 \cdot 10^{-6}$, siehe Phantom D in Abbildung 4.2, und den Parametern:

Wellenlänge λ	$3 \cdot 10^{-10}$
Pixelgröße der Detektorelemente	10^{-6}
Anzahl der Pixel	512
Messrichtungen	800
Quellabstand	1
Messabstände	0.01, 0.05, 0.32, 0.41

Zunächst führen wir eine Rekonstruktion mit dem MOR-Verfahren für ebene Wellen durch. Überraschenderweise wird der Imaginärteil des Objektes noch recht gut bestimmt, siehe Abbildung 4.3. Der Realteil hingegen ist nicht zu gebrauchen.
Das KMOR-Verfahren behebt diesen Missstand und liefert sowohl den Realteil als auch den Imaginärteil, siehe Abbildung 4.4.
Genau wie das MOR-Verfahren ist das KMOR-Verfahren stabil gegenüber Datenfehlern. Bei stärkeren Streuern zeigt sich dasselbe Verhalten wie bei ebenen Wellen. Die Schattenartefakte, die bei der linearen KMOR-Methode noch auftreten, werden durch 2 Iterationsschritte des nichtlinearen Verfahrens KNILI beseitigt.

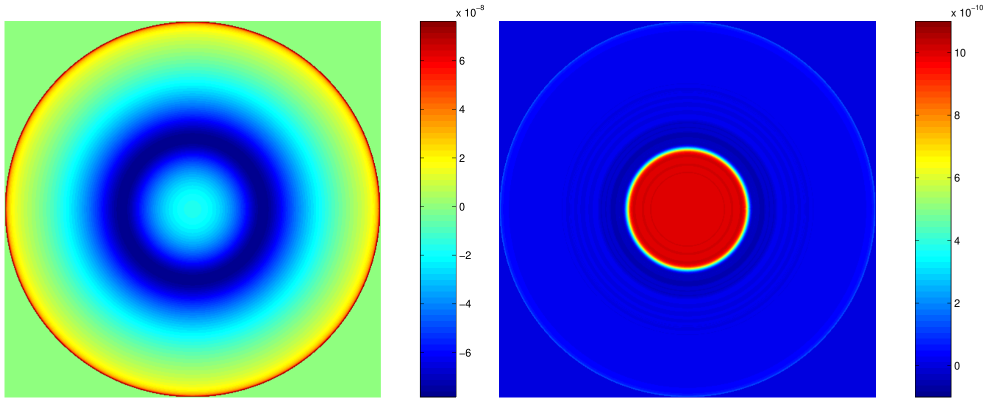

Abbildung 4.3: Rekonstruktion von Phantom D mit MOR-Verfahren: Realteil (links), Imaginärteil (rechts)

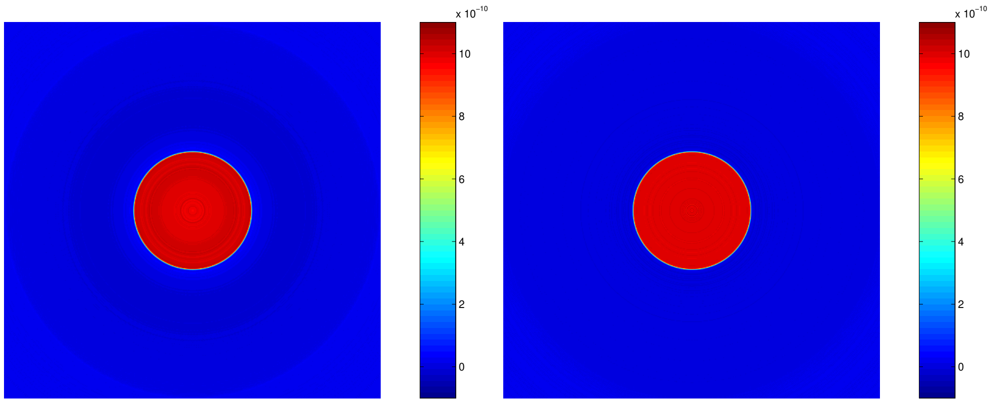

Abbildung 4.4: Rekonstruktion von Phantom D mit KMOR-Verfahren: links Realteil, rechts Imaginärteil

Kapitel 5

Zusammenfassung

Die Ergebnisse auf dem Gebiet der Phasenkontrasttomographie zeigen, dass mit der holographischen Methode gute Ergebnisse in den Rekonstruktionen, insbesondere auch bei realen Daten, erzielt werden können. So erreichen wir auch bei Objekten mit einem geringen Absorptionsvermögen einen sehr guten Kontrast.

In dieser Arbeit haben wir eine Reihe von Verbesserungen und Erweiterungen der bisherigen Verfahren vorgestellt.
So berücksichtigen die Verfahren NILI I, NILI II und NILI III auch nichtlineare Anteile in der Intensität. Dies hat zur Folge, dass die Schattenartefakte, die bei den linearen Verfahren auftreten, nun nicht mehr vorhanden sind.
Desweiteren können wir mit den Verfahren BVD bzw. NILI III den Messbereich vergrößern. Es ist deshalb auch möglich, größere Objekte und kleinere Wellenzahlen zu betrachten.
Weiter wurde das Verhalten der Algorithmen bei Datenfehlern verbessert. Daher reagiert das Verfahren MOR bei weitem nicht so sensitiv auf Datenfehler wie die klassische Paraboloid-Methode.
Durch die Nutzung neuer Resultate aus dem Gebiet der Tomographie, im Besonderen die schnelle Rückprojektion, konnte bei den Verfahren außerdem ein deutlicher Geschwindigkeitsgewinn erzielt werden.
Auch die Wahl der Messabstände wurde optimiert, so dass wir stabile Rekonstruktionsmethoden erhalten.
Schließlich haben wir noch den Fall von einfallenden Kugelwellen diskutiert und hierfür Rekonstruktionsverfahren angegeben.

Eine weiterführende Fragestellung im Bereich der Phasenkontrasttomographie ist die Verwendung von polychromatischer Strahlung. Im Gegensatz zu den bisher betrachteten Fällen wird bei diesem Ansatz ein ganzes Spektrum von Wellenlängen auf das Objekt gebracht. Das Modell verändert sich hierdurch in einigen Bereichen. Nach wie vor gilt die Wellengleichung für die einzelnen Wellenlängen. Das bedeutet zu jeder einfallenden Wellenlänge gibt es einen entsprechenden gestreuten Anteil. Wir haben also bei ebenen Wellen ein einfallendes Feld der Form

$$u_i(\alpha, x) = \int a(k) e^{ik\langle \alpha, x\rangle} dk$$

und ein gestreutes Feld

$$u_s(\alpha, x) = \int u_s(k, \alpha, x) dk,$$

hierbei ist $a(k)$ die Amplitudenverteilung der einfallenden Welle. Das gestreute Feld können wir wieder mit der Born-Approximation nähern

$$u_s(k, \alpha, x) \approx -k^2 \int G(k\|x - y\|) f(y) a(k) e^{ik\langle \alpha, y\rangle} dy.$$

Ein ganz wesentliches Problem bei dieser Herangehensweise stellt die Messung der Amplitudenverteilung $a(k)$ dar. Da die Intensitätsmuster von Phasenobjekten sehr stark von dem Amplitudenmuster der einfallenden Welle abhängen, muss die Funktion $a(k)$ sehr fein und genau abgetastet werden. Mit den heutzutage üblichen Methoden ist das aber schwer möglich.
Um für dieses Modell ein Rekonstruktionverfahren herzuleiten, können wir wieder die Parabelnäherung durchführen und erhalten im zweidimensionalen Fall

$$u_s(k, z, \alpha, s) = -\frac{\sqrt{i}k^2}{4} e^{ikz} a(k) \int_{\alpha^\perp} \sqrt{\frac{2}{\pi k z}} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} \mathcal{P}f(\alpha, \tilde{y}) d\tilde{y}.$$

Betrachten wir nun das gesamte Streufeld

$$\begin{aligned} u_s(z, \alpha, s) &= -\int \frac{\sqrt{i}k^2}{4} e^{ikz} a(k) \int_{\alpha^\perp} \sqrt{\frac{2}{\pi k z}} e^{i\frac{k}{2z}\|s-\tilde{y}\|^2} \mathcal{P}f(\alpha, \tilde{y}) d\tilde{y} dk \\ &= -\frac{\sqrt{4i\pi}}{4\sqrt{\pi z}} \int_{\alpha^\perp} b_z(s - \tilde{y}) \mathcal{P}f(\alpha, \tilde{y}) d\tilde{y}, \end{aligned}$$

wobei $b_z(x) = \mathcal{F}\left((.)^{3/2} a\right)\left(-z - \frac{\|x\|^2}{2z}\right)$ gilt. Durch Fouriertransformation der Gleichung ergibt sich

$$\mathcal{F}u_s(z, \alpha, \sigma) = -\frac{\sqrt{2i\pi}}{2\sqrt{z}} \mathcal{F}b_z(\sigma) \mathcal{F}\mathcal{P}f(\alpha, \sigma).$$

Wir haben nun einen sehr eleganten Zusammenhang zwischen der Objektfunktion und dem Streufeld hergeleitet, der allerdings numerisch sehr große Probleme bereitet. Die Funktion $\mathcal{F}b_z$ kann weder analytisch berechnet werden, weil a von der Quelle abhängt und somit keiner analytischen Funktion entspricht, noch kann numerisch integriert werden, denn die großen Wellenzahlen fordern eine immens feine Diskretisierung. Eine andere Idee wäre, die Amplitudenverteilung a durch Ansatzfunktionen zu nähern und für diese Ansatzfunktionen den Ausdruck b_z analytisch zu berechnen. Aber auch hier ist die Approximationsgüte zu schlecht. Wie wir sehen, ist die Herleitung eines Verfahrens bei polychromatischer Strahlung äußerst schwierig und die Frage, ob dieses Problem überhaupt lösbar ist, bleibt offen.

Literaturverzeichnis

[1] Abdullah H, Louis A K 1999 *The Approximate Inverse for Solving an Inverse Scattering Problem for Acoustic Waves in an Inhomogeneous Medium* Inverse Problems 15, S. 1213-1230

[2] Abramowitz M, Stegun I A 1965 *Handbook Of Mathematical Functions* Dover Publications New York

[3] Baltes H P 1978 *Inverse Source Problems in Optics* Springer-Verlag Berlin-Heidelberg-New York

[4] Barty A, Nugent K A, Roberts A, Paganin D 2000 *Quantitative phase tomography* Optics Communications 175, S. 329-336

[5] Beeck M O, Van Dyck D, Coene W 1996 *Wave function reconstruction in HRTEM: the parabola method* Ultramicroscopy 64, S. 167-183

[6] Beckmann F, Bonse U, Busch F, Günnewig O 1997 *X-ray Microtomography Using Phase Contrast for the Investigation of Organic Matter* Journal of Computer assisted Tomography, Vol 21, No. 4, S 539-553

[7] Blaschke-Kaltenbacher B, Engl H W 1997 *Regularization Methods for Nonlinear Ill-posed Problems with Applications to Phase Reconstruction* in Engl H W, Louis A K, Rundell W 1997 Inverse Problems in Medical Imaging and Nondestructive Testing Springer Wien New York S. 17-35

[8] Born M, Wolf E 1980 *Principles of Optics* Pergamon Press, Oxford, New York

[9] Bronnikov A V 1999 *Reconstruction formulas in phase-contrast tomography* Optics Communications 171, S. 239-244

[10] Bronnikov A V 2002 *Theory of quantitative phase-contrast computed tomography* J. Opt. Soc. Am. , Vol. 19, No. 3, S. 472-480

[11] Buffière J Y, Maire E, Cloetens P, Lormand G, Fougères R 1999 *Characterization of internal damage in a MMC_p using X-ray synchrotron phase contrast microtomography* Acta mater. Vol 47, No. 5, S. 1613-1625

[12] Colton D, Kress R 1998 *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory* Springer

[13] Cloetens P, Barrett R, Baruchel J, Guigay J P, Schlenker M 1996 *Phase objects in synchrotron radiation hard x-ray imaging* J. Phys D: Applied Physics D29, S. 133-146

[14] Cloetens P 1999 *Contribution to Phase Contrast Imaging, Reconstruction and Tomography with Hard Synchrotron Radiation* Dissertation Brüssel

[15] Cloetens P, Boller E, Ludwig W, Baruchel J, Schlenker M 2001 *Absorption and phase imaging with synchrotron radiation* Europhysics News, Vol 32, No. 2

[16] Chapman D, Pisano E, Thomlinson W, Zhong Z, Johnston R E 1998 *Medical Applications of Diffraction Enhanced Imaging* Breast Disease, Vol 10, No. 3/4, S. 197-208

[17] Davis T J, Gao D, Gureyev T E, Stevenson A W 1995 *Phase-contrast imaging of weakly absorbing materials using hard x-rays* Nature, Issue 6515, S. 595

[18] Devaney A J, Chidlaw R 1978 *On the uniqueness question in the problem of phase retrieval from intensity measurements* J. Opt. Soc. Am. Vol 68, No. 10, S. 1352-1354

[19] Devaney A J 1991 *Inverse Scattering and Diffraction Tomography using Intensity Data* Acoustical Imaging, Vol 18, S 97-103

[20] Gerchberg R W, Saxton W O 1972 *A practical Algorithm for the Determination of Phase from Image and Diffraction Plane Pictures* Optik Vol. 35, No. 2, S. 237-246

[21] Guigay J P 1977 *Fourier transform analysis of Fresnel diffraction patterns and in-line holograms* Short Note Grenoble

[22] Gureyev T E, Raven C, Snigireva I, Wilkins S W 1999 *Hard x-ray quantitative non-interferometric phase contrast microscopy*

[23] Hecht E 1998 *Optics* 3th ed. Addison-Wesley

[24] Hurt N E 1989 *Phase Retrieval and Zero Crossing* Kluwer Academic Publishers

[25] Huiser A M J, Drenth A J J, Ferwerda H A 1976 *On phase retrieval in electron microscopy form image and diffraction pattern* Optik 45, No 4, S. 303-316

[26] Jonas P, Louis A K, Rösch A 2002 *Using Invariances of Operators for the implementation of discret Algorithms especially for the Radon Transform* preprint Universität des Saarlandes

[27] Ingal V N, Beliaevskaya E A 1996 *Phase dispersion radiography of biological objects* Physica Media, Vol 12, No. 2, S. 75-82

[28] Ingal V N, Beliaevskaya E A, Brianskaya A P, Merkurieva R D 1998 *Phase mammography - a new technique for breast investigation* Physics in Medcine and Biology Vol 43 Number 9, S. 2555-2568

[29] Kirkland J 1984 *Improved high resolution image processing of bright field electron micrographs* Ultramicrosopy 15, S. 151-172

[30] Kohn V G 1997 *Specific instrumention and techniques of general use in physics: The method of phase retrieval of complex wavefield from two intensity measurements applicable to hard X-ray* Physica Scripta, Vol 56, No. 1, S. 14-19

[31] Louis A K 1989 *Inverse und schlecht gestellte Probleme*, Teubner

[32] Louis A K, Maaß P 1990 *A mollifier method for linear operator equations of the first kind* Inverse Problems 6, S. 427-439

[33] Louis A K 1996 *Approximate inverse for linear and some nonlinear problems* Inverse Problems 12 S. 175-190

[34] Louis A K 1997 *Application of the Approximate Inverse to 3D X-Ray CT and Ultrasound Tomography*, Inverse Problems in Medical Imaging and Nondestructive Testing, Springer-Verlag Wien, New York, Herausgeber: H.W. Engl, A.K. Louis, W. Rundell, S. 120-133,

[35] Lübbert D, Jenichen B, Baumbach T, Grahn H T, paris G, Mazuelas A, Kojima T, Arai S 1999 *Elastic stress relaxation in GaInAsP quantum wires on InP* J. Phys. D: Applied Physics 32, S. 21-25

[36] Luke Y L 1962 *Integrals Of Bessel Functions* McGraw-Hill Book Company

[37] Momose A 1995 *Demonstration of phase-contrast X-ray computed tomography using X-ray interferometer* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol 352, No. 3, S. 622

[38] Natterer F 1986 *Mathematics of Computerized Tomography* Wiley and Teubner

[39] Natterer F, Wübbeling F 1995 *A propagation-backpropagation method for ultrasound tomography* Inverse Problems 11, S. 1225-1232

[40] Natterer F, Wübbeling F 2001 *Mathematical Methods in Image Reconstruction* Siam

[41] Nugent K A, Gureyev T E, Cookson D F, Paganin D, Barnea Z 1996 *Quantitive phase imaging using hard x-ray* Physical Review Letters, Vol 77, No. 14, S. 2961-2964

[42] Produrets K M, Shil'shtein S S, Somenkov V A 1993 *Application of very small angle neutron scattering to some problems of material science and nondestructve testing* Journal de Physique 4, Vol 3, No. 8, S. 455

[43] Schiske P 1974 *Ein- und Mehrdeutigeit der Phasenbestimmung aus Bild und Beugungsfigur* Optik 40, Heft 3, S. 261-275

[44] Schuster T 1999 *Schnelle Rekonstruktion von Geschwindigkeitsfeldern und Theorie der Approximativen Inversen* Dissertation Saarbücken

[45] Tiller J B, Barty A, Paganin D, Nugent K A 2000 *The holographic twin image problem: a deterministic phase solution* Optics Communications 183, S. 7-14

[46] Volostnikov V G, Klibanov M V, Kotlyar V V 1985 *The Uniqueness of an Inverse Scattering Problem in Fresnel's Approximation* USSR Comput Maths Math Phys, Vol 25, No. 3, S 192-197

[47] Werner D 1995 *Funktionalanalysis* Springer

[48] Wübbeling F 1994 *Das direkte und das inverse Streuproblem bei fester Frequenz* Dissertation Münster