Effiziente Verfahren zur Regularisierung dynamischer inverser Probleme

Dissertation
zur Erlangung des Grades
des Doktors der Naturwissenschaften
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität des Saarlandes

von

UWE SCHMITT

Saarbrücken
2001

Tag des Kollquiums:	4. Juli 2001
Dekan:	Univ.-Prof. Dr. R. Schulze-Pillot-Ziemen
Berichterstatter:	Univ.-Prof. Dr. A. K. Louis
	Univ.-Prof. Dr. S. Rjasanow

Inhaltsverzeichnis

Vorwort und Einleitung **1**

Symbolverzeichnis **5**

1 Dynamische inverse Probleme **9**

1.1 Einführung 9

1.2 Der mathematische Rahmen 11

2 Mathematische Hilfsmittel **13**

2.1 Operator-Matrizen 13

2.2 Operatormatrizen von Operatormatrizen 16

2.3 Das Rechnen mit Blockmatrizen 18

2.4 Das verallgemeinerte Kroneckerprodukt 20

2.5 Die Minimum-Norm Lösung 23

2.6 Das Tikhonov-Phillips-Verfahren 23

2.7 Zur numerischen Lösung von Operatormatrixgleichungen 25

2.8 Die reelle Schurtransformation 27

2.9 Die "continuous time"-Sylvestergleichung 28

2.9.1 Das Verfahren 29

2.9.2 Zur Laufzeit 31

2.10 Die verallgemeinerte "discrete time"-Sylvestergleichung 32

2.10.1 Das Verfahren 33

2.10.2 Zur Laufzeit 36

3 Das Verfahren ST1C **39**

3.1 Die Minimierungsaufgabe 39

3.2 Ein effizienteres Verfahren im unterbestimmten Fall 40

3.3 Effizienzsteigerung im Falle von Operatormatrizen 41

4 Das Verfahren ST2 **43**

4.1 Die Aufgabenstellung 43

4.2 Umformung des Gleichungssystems 45

4.3 Das Verfahren ST2 47

4.4 Der Fall eines zeitunabhängigen Vorwärtsmodells 48

5 Die Verfahren ST3 und ST3C **49**

5.1 Die Minimierungsaufgabe 49

5.2 Berechnung von x^α 51

5.3 Der Grenzübergang $\alpha \to \infty$ 52

5.4 Das Verfahren ST3 53

5.5 Die Grenzfälle $\mu \to 0$ und $\mu \to \infty$ 54

5.6 Das Verfahren ST3C 58

5.7 Zur Effizienz 59

6 Dynamische Computertomographie **61**

6.1 Allgemeines zur Computertomographie 61

6.2 Das mathematische Modell der CT 62

6.3 Das mathematische Modell der dynCT 63

6.4 Anwendung des Verfahrens ST3 auf dynCT 64

6.5 Beispielrekonstruktionen 72

6.5.1 Erstes Beispiel 73

6.5.2 Zweites Beispiel 75

6.5.3 Abschließende Bewertung, Ausblick 79

7 Dynamische Impedanz-Tomographie 81

7.1 Allgemeines zur Impedanz-Tomographie 81

7.2 Das mathematische Modell der EIT 82

7.3 Numerische Berechnung des Vorwärtsmodells der EIT 84

7.4 Linearisierung des Vorwärtsmodells 85

7.5 Anwendung des Verfahrens ST3 auf die dynEIT 87

7.6 Kalman-Glätter zur Lösung des dynEIT-Problems 89

7.6.1 Beschreibung des Kalman-Glätters 89

7.6.2 Anwendung des Kalman-Glätters auf das Problem der dynEIT . . . 91

7.7 Beispielrekonstruktionen 92

7.7.1 Erstes Beispiel 93

7.7.2 Zweites Beispiel 99

7.7.3 Abschließende Bewertung 102

8 Temporale Stromdichterekonstruktion 103

8.1 Allgemeines zur Stromdichterekonstruktion 103

8.2 Das EEG/MEG-Vorwärtsmodell 105

8.3 Die Leadfield-Matrix 106

8.4 Bestehende CDR-Methoden 108

8.5 Spatio-temporale Stromdichterekonstruktionen 108

8.6 Simulationsrechnungen 109

8.6.1 Das Volumenleiter-Modell 109

8.6.2 Beispielrechnungen 110

8.6.3 Abschließende Bewertung 115

Literaturverzeichnis 117

Vorwort und Einleitung

Wer das erste Knopfloch verfehlt,
kommt mit dem Zuknöpfen nicht zu Rande.

Johann Wolfgang von Goethe

Inverse Probleme und deren Behandlung gewinnen zunehmend an Bedeutung. Viele inverse Probleme wurden durch den Zuwachs an verfügbarer Rechnerleistung während der letzten Jahre erst in akzeptabler Zeit lösbar. Solche Probleme tauchen in vielen Anwendungsgebieten wie Medizintechnik, zerstörungsfreiem Prüfen, Geologie, Signalverarbeitung und Akustik auf.

Inverse Probleme bestehen meistens darin, aus indirekten Beobachtungen eines Systems auf die Eingangsdaten dieses Systems zu schließen. Ein Beispiel ist das "deblurren" (entzerren) von Himmelsbildern. Das System ist hierbei die Atmosphäre oder eine fehlerhafte Linse welche die Eingabe "Sternenbild" verzerrt und auf der Erde als "Himmelsbild" beobachtet wird. Das inverse Problem besteht hierbei darin, von dem auf der Erde aufgenommenen verzerrten Bild auf das wirkliche Sternenbild zurückzuschließen. Ein wichtiges Beispiel hierfür ist das Entzerren der seit 1990 vom Hubble-Teleskop aufgenommenen Bilder aus der Tiefe des Universums [Ado95]. Das Hubble-Teleskop befindet sich auf einem Satelliten auf der Erdumlaufbahn, mit dem Ziel atmosphärische Verzerrungen zu umgehen. Leider musste man kurz nach Beginn des Betriebs feststellen, daß die verwendete Linse fehlerhaft ist.

Bei vielen inversen Problemen hat man es mit einem Meßvorgang zu tun, welcher eine nicht vernachlässigbare Zeit in Anspruch nimmt. Als Beispiel sei die Röntgen-Computertomographie genannt. Die das Objekt bestrahlende Röntgenquelle umfährt während einer Zeitspanne das zu untersuchende Objekt. Die meisten bestehenden Verfahren gehen davon aus, daß sich dieses Objekt während dieser Zeit nicht ändert. In dieser Arbeit werden aufbauend auf einem abstrakten Konzept neue Verfahren vorgestellt, die es zulassen, daß sich das zu untersuchende System zeitlich ändern darf. Durch die Hinzunahme der a-priori Information "zeitliche Glattheit" gelangt man so zu funktionsfähigen Verfahren um die sogenannten "dynamischen inversen Probleme" sinnvoll zu lösen.

Inverse Probleme sind im Sinne von Hadamard meist "schlecht gestellt". Hadamard führte anfang des letzten Jahrhunderts diesen Begriff ein und ging davon aus, daß solche schlecht gestellten Probleme in der Naturwissenschaft und ihren Anwendungen nicht von Bedeutung seien. Die heutige Praxis mit einer Vielzahl von inversen und schlecht gestellten Problemen widerlegt diese Behauptung deutlich.

Schlecht gestellte Probleme bedürfen in ihrer Behandlung besonderer Verfahren und Techniken. Die sogenannten "Regularisierungsverfahren" gehören zu diesen. Diese zeichnen sich dadurch aus, daß man Zusatzinformationen, welche nicht aus den Daten extrahiert werden können, ins Spiel bringt. Das in dieser Arbeit vorgestellte Konzept der "zeitlichen Glattheit" führt ebenfalls zu einem solchen Verfahren.

Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden wir die hier benutzten Begriffe formal in der Sprache der Mathematik fassen. Die Darstellung fällt hierbei recht knapp aus, der interessierte Leser findet in [Lou89], [EHN96] und [CK92] tiefgreifende Abhandlungen.

Die im Hauptteil dieser Arbeit benötigten mathematischen Hilfsmittel aus den Bereichen Funktionalanalysis, Optimierung, Tikhonov-Phillips-Regularisierung und Numerik werden im zweiten Kapitel vorgestellt und erarbeitet.

Die folgenden Kapitel drei bis fünf stellen jeweils ein abstraktes Verfahren vor, um dynamische inverse Probleme zu lösen. Wert wurde hierbei darauf gelegt, zu effizienten Verfahren zu gelangen. Diese Verfahren sind im Vergleich zu "naiven" Verfahren, welche auf Normalengleichungen beruhen, um mehrere Zehnerpotenzen schneller. So läßt sich das später vorgestellte Problem der spatio-temporalen Stromdichterekonstruktion mit einem Einflußraum von 5000 Einflußpunkten, 32 Meßwerten und 100 Zeitschritten um den Faktor 10^7 beschleunigen. Damit werden dynamische inverse Probleme auch auf "kleinen" Rechnern in akzeptabler Zeit lösbar.

Die Kapitel sechs bis acht stellen jeweils ein in der Praxis wichtiges dynamisches inverses Problem vor, zeigen, wie man diese mit den in dieser Arbeit erarbeiteten Verfahren lösen kann, stellen Ergebnisse vor, und vergleichen diese mit bestehenden Verfahren (falls vorhanden). Um die Universalität der erarbeiteten Verfahren zu demonstrieren„ wurden die drei Beispielanwendungen so gewählt, daß man sowohl diskrete als auch kontinuierliche Modellierungen betrachtet; eins der Beispiele ist ein nichtlineares Problem.

Es war mir wichtig, die erarbeiteten Verfahren auf ein robustes mathematisches Fundament zu stellen, und diese später mittels praktisch relevanten Problemstellungen zur Anwendung zu bringen.

Die Geschichte dieser Arbeit beginnt mit meiner Teilnahme am Saarbrücker Projekt "Inverse Quellrekonstruktionen" in Zusammenarbeit mit Prof. Hellmut Buchner aus Aachen. Die in diesem Projekt physiologisch motivierte a-priori Information "zeitliche Glattheit" führte zu robusteren Verfahren auf dem Gebiet der Stromdichterekonstruktionen, wie sie in dieser Arbeit im achten Kapitel vorgestellt werden. Zusammen mit Carsten Wolters aus Leipzig hatte ich die Idee, diese Rechentechniken auf das Problem der dynamischen Impedanztomographie anzuwenden. Die am Lehrstuhl von Prof. A. K. Louis intensiv untersuchten Verfahren aus dem Gebiet der Röntgen-Computertomographie kamen in ihrer dynamischen Formulierung als drittes Anwendungsgebiet hinzu. Um diese drei Anwendungen einheitlich behandeln zu können, mußte ich das Konzept der Operatormatrizen wie in Kapitel zwei vorgestellt einführen und mir Gedanken über die numerische Behandlung der damit verbundenen Operatorgleichungen machen. Ich denke, daß die am Ende dieser Arbeit vorgestellten Anwendungen diesen abstrakten Rahmen erst wertvoll und sinnvoll machen.

Insgesamt bin ich der Meinung, daß die vorgestellten und untersuchten Verfahren dazu geeignet sind, unter der recht allgemeinen a-priori Information "zeitliche Glattheit" zu sinnvollen und verwertbaren Ergebnissen zu gelangen.

Mein Dank gilt außer Prof. A. K. Louis, Prof. Buchner und Carsten Wolters, insbesondere Marco Vauhkonen aus Helsinki, welcher mir wichtige Software aus dem Bereich der Impedanztomographie zur Verfügung stellte, außerdem danke ich Prof. Louis und allen Mitarbeitern des Lehrstuhls von Prof. A. K. Louis für das gute und produktive Arbeitsklima und der mir zugekommenen Unterstützung. Roman Müller und Axel Binder waren mir bei der Korrektur dieser Arbeit sehr behilflich, wofür ich ihnen herzlich danke. Letztlich möchte ich noch meinen Eltern und meinem engeren Freundeskreis danken, die mich auch in schwierigen Zeiten sehr gut unterstützt haben, und ohne deren Hilfe diese Arbeit bestimmt nicht zustande gekommen wäre.

Symbolverzeichnis

Das Buch der Natur ist mit
mathematischen Symbolen geschrieben.

Galileo Galilei

Symbol	Erläuterung	Abschnitt
A	Operator, meist zwischen Hilberträumen, $A : X \to Y$	1.1
X, Y	Topologische, Banach- oder Hilberträume	1.1
x	gesuchte Größe	1.1
b, g	Daten	1.1
A^{-1}	Inverse des Operators A	1.1
$A^{\dagger}$	Verallgemeinerte Inverse des Operators A	1.1
λ	Regularisierungsparameter, meist räumlich.	1.1
T_λ	Regularisierungsoperator	1.1
$\mathbb{R}$	reelle Zahlen	1.1
$\mathbb{R}_+$	positive reelle Zahlen	1.1
$\mathcal{D}(\cdot)$	Definitionsbereich eines Operators	1.1
g^ϵ	gestörte Daten	1.1
ϵ	Rauschniveau	1.1
A_i	Vorwärtsoperator zum Zeitpunkt t_i	1.1
t_i	Zeitpunkte, $1 \leq i \leq T$	1.1
T	Anzahl Zeitpunkte	1.1
$\|\cdot\|$	Norm	1.1
$\mathcal{L}(H, G)$	Menge der linearen Operatoren von H nach G	1.2
$\mathbb{K}$	Grundkörper, entweder $\mathbb{C}$ oder $\mathbb{R}$	1.2
$M_1 \times M_2$	kartesisches Produkt der Mengen M_1 und M_2	2.1
$H_1 \oplus H_2$	Hilbertraumsumme der Hilberträume H_1 und H_2	2.1
$\langle \cdot, \cdot \rangle_H$	Skalarprodukt des Hilbertraumes H	2.1
$\|\cdot\|_H$	Norm des Hilbertraumes H	2.1
$[A]$	der zur Operatormatrix $(A_{i,j})$ assoziierte Operator	2.1

Fortsetzung...

Symbol	Erläuterung	Abschnitt
P_i	kanonische Projektion, $P_i : H_1 \oplus \cdots \oplus H_N \to H_i$	2.1
E_j	kanonische Einbettung, $E_j : H_j \to H_1 \oplus \cdots \oplus H_N$	2.1
A^*	Adjungierte des Operators A	2.1
$\mathcal{A}_{i,j}$, $\mathcal{B}_{i,j}$, $\mathcal{C}_{i,j}$	Blöcke von Matrizen A, B, C	2.3
$p(i,j), q(i,j)$	Abbildung von Block/Unterblock-Index (i,j) auf absoluten Index $p(i,j)$ bzw. $q(i,j)$	2.3
$\otimes$	(verallgemeinertes) Kroneckerprodukt	2.4
$\mathrm{Mat}_n(x)$	Umordnung eines Vektors x zu einer Matrix mit n Zeilen	2.4
$R(A)$	Bildbereich (Range) von A	2.5
$N(A)$	Nullraum (Kern) von A	2.5
$M^\perp$	orthogonales Komplement von M	2.5
DF	Frechét-Ableitung des Operators F	2.6
$\Psi(x)$	Funktional	2.6
X_h	endlichdimensionaler Unterraum von X mit "Feinheit" h	2.7
Y^*	Dualraum von Y	2.7
Y_h^*	endlichdimensionaler Unterraum von Y^*	2.7
f_h	Approximation der Lösung f	2.7
$\mathrm{span}\{\cdots\}$	lineare Hülle	2.7
$M^\top$	Transponierte der Matrix M	2.9
μ	zeitlicher Regularisierungsparameter	3.1
I_H	Identität auf Hilberraum H	3.1
D	diskreter Differentialoperator auf $\mathbb{R}^n$	3.1
B	diskreter Differentialoperator auf Hilbertraum H^n	3.1
$\nabla\Phi$	(verallgemeinerter) Gradient des Funktionales Φ	3.1
$\mathrm{diag}(x_1 \ldots, x_n)$	$n \times n$ Diagonalmatrix mit diagonalen Einträgen $x_1, \ldots, x_n$	3.1
R	Wichtungsmatrix	4.3
R^∞	Wichtungsmatrix	5.4
$\mathcal{O}$	Landausymbol	5.4
$L(s,\omega)$	Gerade senkrecht zu $\omega \in S^1$ mit Abstand s zum Ursprung	6.2
S^1	Rand der zweidimensionalen Einheitskugel	6.2
$I(s,\omega)$	in Position (s,ω) gemessene Intensität eines Röntgenstrahls	6.2
$g(s,\omega)$	modifizierte Daten zur Position (s,ω)	6.2
Ω	Gebiet	6.2
$L^2(M)$	Menge der quadratintegrblen Funktionen auf M	6.2
$\mathcal{R}$	Radontransformation	6.2

Fortsetzung...

Symbol	Erläuterung	Abschnitt
$\mathcal{R}_i$	Radontransformtion zur Richtung ω_i	6.3
I_l	Stommuster	7.1
U_l	Spannungsmuster	7.1
L	Anzahl Elektroden	7.1
σ	elektrische Leitfähigkeit	7.1
$H^1(\Omega)$	Sobolevraum der Ordnung eins auf Ω	7.2
e_k	k-te Elektrode, $e_k \subset \partial\Omega$	7.2
z_l	Kontaktimpedanz der l-ten Elektrode	7.2
div	verallgemeinerte Divergenz	7.2
$\mathbb{H}$	$H^1(\Omega) \oplus \mathbb{R}^L$	7.2
$\dot{\mathbb{H}}$	$\mathbb{H}/\mathbb{R}$	7.2
$B(\cdot,\cdot)$	Bilinearform	7.2
u^h	elektrische Spannung an Elektrode h	7.3
U^h	diskretisierte elektrische Spannung in Ω	7.3
T	Vorwärtsoperator zu $I = (I_l)$, $T : (\rho, I) \to u^h$	7.3
ρ	elektrischer Widerstand, $\rho = 1/\sigma$	7.3
Δ_m	m-tes Element der FEM-Diskretisierung	7.4
χ_m	charakteristische Funktion von Δ_m	7.4
$J(\rho)$	Linearisierung von T in ρ	7.4
$A_t(\rho)$	Vorwärtsoperator der EIT zum Zeitpunkt t	7.5
o	Landausymbol	7.5
$p(x\|z)$	bedingte Wahrscheinlichkeit	7.6.1
$\hat{x}$	Schätzer für Zufallsvariable x	7.6.1
$x \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	x ist normalverteilt mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2	7.6.1
Φ_k	Operatoren des "message modell"	7.6.1
H_k	Operatoren des "measurment modell"	7.6.1
$\mathrm{cov}\{\cdot\}$	Kovarianz	7.6.1
$\hat{x}(j\|k)$	Schätzer für x_j unter Kenntnis der Messwerte $z_1 \ldots z_k$	7.6.1
a_1, a_2, α	Parameter des Kalmanglätters zur Lösung des Problems der dynEIT	7.6.2
j	Stromdichte	8.2
Γ_1, Γ_2	Meßflächen ffür EEG/MEG	8.2
A_E	Vorwärtsoperator für EEG-Daten	8.2
A_M	Vorwärtsoperator für MEG-Daten	8.2
S	Operator zur schwachen Lösung der Poissongleichung	8.2
γ	Spuroperator	8.2
T	Vorwärtsoperator Magnetfeld	8.2

Fortsetzung...

Symbol	Erläuterung	Abschnitt
B	magnetischer Fluß	8.2
$\bar{e}_k$	k-ter Einheitsvektor	8.3
L	Leadfieldmatrix	8.3
$G(\cdot,\cdot)$	Greensche Funktion	8.3
$\mathrm{vol}(M)$	Maß/Volumen von M	8.3
δ_p	Deltadistribution um Punkt p	8.3
Δ	Laplace-Operator	8.4
$\triangle$	diskretisierter Laplace-Operator	8.4
$\mathrm{blockdiag}(\ldots)$	Blockdiagonal-Matrix mit vorgegebenen Diagonaleinträgen	8.5
$q(t)$	Aktivitätsverlauf	8.6.2

1 Dynamische inverse Probleme

Wer klare Begriffe hat, kann befehlen.
Johann Wolfgang von Goethe

1.1 Einführung

In diesem Abschnitt wollen wir zuerst erläutern, was wir unter einem inversen Problem und dann, was wir unter statischen und dynamischen inversen Problemen verstehen. Gute Einführungen in das im folgenden skizzierte Themengebiet der inversen Probleme und deren Regularisierung findet man in [Lou89, EHN96].

Ist die direkte Messung der Eigenschaften eines Objektes nicht möglich, sondern muß man von indirekten Beobachtungen auf diese Eigenschaften zurückschließen, so sprechen wir von einem **inversen Problem**. Inverse Probleme treten in der Regel als Umkehr eines direkten Problemes auf. Diese direkten Probleme verhalten sich meist "gutartig", das heißt, daß die Lösung des direkten Problems unter recht allgemeinen Voraussetzungen eindeutig existiert und stetig von den Eingangsdaten des Problems abhängt. Mathematisch exakt formuliert nennen wir ein solches Problem **gut gestellt**:

Definition 1.1.1 Sei $A : X \to Y$ eine Abbildung zwischen topologischen Räumen X und Y. Das Problem $Ax = b$ heißt **gut gestellt**, wenn

1. für alle b eine Lösung x existiert,
2. diese Lösung eindeutig ist, und
3. die Lösung x stetig von den Daten b abhängt.

Ist eine dieser Bedingungen verletzt, so sprechen wir von einem **schlecht gestellten** Problem. Die meisten inversen Probleme sind schlecht gestellt. Oft kommt die Schlechtgestelltheit durch einen kompakten Operator A ins Spiel. Kompakte Operatoren mit einer unendlichdimensionalen Urbildmenge sind nämlich nicht stetig invertierbar [Lou89], das heißt in Definition 1.1.1 ist Punkt 3 verletzt.

Sind im Falle, daß es sich bei X und Y um Hilberträume handelt, die Bedingungen eins oder zwei in der obigen Definition nicht erfüllt, so müssen wir den Lösungsbegriff verallgemeinern, wir ersetzen die nicht existierende Inverse A^{-1} durch die verallgemeinerte Inverse $A^\dagger$ [Lou89]. Aber selbst diese verallgemeinerte Inverse wird im allgemeinen nicht stetig sein.

Die stetige Invertierbarkeit ist für praktische Verfahren allerdings von zentraler Bedeutung. Ist diese verletzt, so kann sich Rauschen in den Meßwerten b übermäßig stark auf die Lösung x des Problems auswirken, die Lösung ist in der Regel unbrauchbar.

Mathematisch formuliert wird man zur Lösung eines schlecht gestellten Problems die nicht stetige Inverse $A^\dagger$ durch einen stetigen Operator T_λ approximieren. Einen solchen Operator wird man als **Regularisierung** des Problems bezeichnen:

Definition 1.1.2 Eine **Regularisierung** von $A^\dagger$ ist eine Familie von Operatoren

$$\{T_\lambda\}_{\lambda>0}, \quad T_\lambda : Y \to X$$

mit folgender Eigenschaft:

Es existiert eine Abbildung $\lambda : \mathbb{R}_+ \times Y \to \mathbb{R}_+$, so daß für alle $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ und für alle gestörten Daten $g^\epsilon \in Y$ mit Rauschniveau ϵ, das heißt $\|g - g^\epsilon\| \leq \epsilon$, gilt

$$\lim_{\epsilon \to 0,\, g^\epsilon \to g} T_{\lambda(\epsilon, g^\epsilon)} g^\epsilon = A^\dagger g$$

Um solche Regularisierungen konstruieren zu können, müssen wir **Zusatzinformationen** über die Lösung x ins Spiel bringen.

Ausgangspunkt der Unterscheidung zwischen **dynamischen** und **statischen** inversen Problemen ist ein Meßverfahren, welches zu T Zeitschritten $t_i, 1 \leq i \leq T$ Meßwerte m_i liefert. Der Zusammenhang zwischen den zu bestimmenden Eigenschaften x des zu untersuchenden Objektes und den Meßwerten wird zu jedem Zeitpunkt durch einen Operator A_i mittels $A_i x = m_i$ hergestellt. Die Aufgaben $A_i x = m_i$ werden im allgemeinen schlecht gestellt sein.

In dieser Situation sprechen wir nun von einem **statischen inversen Problem**, da sich die Eigenschaften x des Objektes über dem gesamten Zeitraum $[1, t_T]$ nicht ändern.

Umgekehrt sprechen wir von einem **dynamischen inversen Problem**, wenn sich das zu untersuchende Objekt über die Zeit verändern kann, das heißt wir haben den Zusammenhang $A_i\, x_i = m_i$.

Im Fall von zwei Anwendungsbeispielen (nämlich Röntgen-CT und Impedanz-Tomographie) wird es so sein, daß die Messung zum Zeitpunkt t_i nicht genug Informationen über die Eigenschaften x_i des Objektes zu diesem Zeitpunkt liefert. Wir sind daher auf weitere Zusatzinformationen angewiesen. In dieser Arbeit werden wir die Information **"zeitliche Glattheit"** als Zusatzinformation einführen und darauf aufbauend Verfahren zum Lösen von dynamischen inversen Problemen herleiten. Zeitliche Glattheit heißt, daß sich das

Objekt von Zeitschritt t_i zu Zeitschritt t_{i+1} nur geringfügig ändern darf. Wir werden diese Glattheit im allgemeinen in der Form $\sum_i \|x_{i+1} - x_i\|^2$ mathematisch formulieren.

In einem dritten Anwendungsbeispiel (Stromdichterekonstruktion) wird die Rekonstruktion von x_i aus den Meßwerten m_i möglich sein. Da in diesem Falle die Probleme $A_i\, x_i = m_i$ aber exponentiell schlecht gestellt sind (dies bedeutet, sie sind "sehr schlecht gestellt", siehe [Lou89]), wird die Lösung x_i besonders empfindlich auf Rauschen in den Daten m_i reagieren. Hier werden wir die zeitliche Glattheit benutzen, um ein in Bezug auf Rauschen stabileres Verfahren zu gewinnen.

All diesen Anwendungen liegt die Aufgabe

$$A_1\, x_1 = m_1 \quad \ldots \quad A_T\, x_T = m_T$$

unter der Nebenbedingung

$$\sum_i \|x_{i+1} - x_i\|^2 \to \min$$

zugrunde.

Die hergeleiteten Verfahren werden wir mit ST1C, ST2, ST3 und ST3C bezeichnen. "ST" steht hierbei für spatio-temporale Regularisierung, der Buchstabe "C" bezieht sich auf den Spezialfall, daß sich der Operator A_i über die Zeit nicht ändert, d.h. $A_i = A_0\ \forall i$.

1.2 Der mathematische Rahmen

Wir werden die im letzten Abschnitt benutzten Objekte nun genauer spezifizieren.

Im folgenden betrachten wir T Zeitschritte zu Zeitpunkten $t_i, 1 \leq i \leq T$.

Die Operatoren A_i seien aus $\mathcal{L}(H, G_i)$, H und G_i seien Hilberträume über $\mathbb{K}$. Sind die A_i von i unabhängig, d.h. $A_i = A_0\ \forall i$, so betrachten wir den Operator $A_0 \in \mathcal{L}(H, G_0)$. Auch G_0 ist ein Hilbertraum.

Alle beteiligen Operatoren sind im unendlichdimensionalen Fall kompakt oder im endlichdimensionalen Fall schlecht konditioniert[1].

Die zu rekonstruierenden Größen bezeichnen wir mit $x, x_i \in H$, die zugrundeliegenden Meßwerte mit $m_i \in G_i$.

Wir werden außerdem nur Verfahren für unterbestimmtes A_i explizit angeben. Was im überbestimmten Fall zu tun ist, werden wir jeweils kurz kommentieren. Im allgemeinen ist es so, daß die Gesamtheit der Operatoren A_i ein inverses statisches Problem beschreiben, welches überbestimmt oder "schwach" unterbestimmt ist. Daher sind die einzelnen A_i meist "relativ stark" unterbestimmt. Dies spiegelt die Tatsache wieder, daß jeder einzelne

[1] im endlichdimensionalen Fall sind die Operatoren automatisch kompakt.

Meßschritt relativ wenige Informationen über das zu bestimmende Objekt liefert, die Gesamtheit der Meßschritte bestimmen aber im statischen Fall das Objekt recht gut. Einen Operator A werden wir als **unterbestimmt** bezeichnen, wenn es sich hierbei um

- eine Matrix über $\mathbb{K}$ handelt, welche mehr Spalten als Zeilen hat, oder
- um einen Operator handelt, welcher von einem unendlichdimensionalen Hilbertraum in $\mathbb{K}^n$ abbildet, oder
- um einen Operator handelt, welcher von einem Funktionenraum auf einer Mannigfaltigkeit in einen Funktionenraum auf einer niederdimensionaleren Mannigfaltigkeit abbildet. Dieser Operator geht bei geeigneter Diskretisierung meist in eine unterbestimmte Matrix über.

2 Mathematische Hilfsmittel

Natur und Geist finden ihren reinen Ausdruck und ihre wahre Einheit nur im Abstrakten.

Piet Mondrian, niederländische Maler

In dem folgenden Kapitel legen wir den Grundstein für das Lösen von Least-squares Problemen in Hilberträumen. Genauer gesagt, beschäftigen wir uns mit Tikhonov-Phillips- und Minimum-Norm-Lösungen von Operatorgleichungen.

Dazu stellen wir die Begriffe Operatormatrix und (verallgemeinertes) Kroneckerprodukt vor und beweisen Eigenschaften derselben. Der Begriff der Operatormatrix verallgemeinert hierbei den bekannten Begriff der Matrix über einem Grundkörper $\mathbb{K}$. Der Terminus "Operatormatrix" wird zwar gelegentlich in der Mathematik verwendet, insbesondere im Rahmen von Integralgleichungen [Eng93, Nag89], eine grundlegende Einführung, welche die in den nächsten Abschnitten dargestellte Theorie abdeckt, konnte ich nicht finden.

Wir zeigen im folgenden, daß man mit Operatormatrizen wie mit den bekannten Matrizen über Körpern rechnen darf. In einem eigenen Abschnitt werden wir darauf eingehen, wie man Operatorgleichungen, welche auf Operatormatrizen beruhen, numerisch lösen kann.

Liegt linearen Problemen eine "Kronecker-Struktur" zugrunde, so können wir diese unter gewissen Voraussetzungen in äquivalente Gleichungen vom Typ "Sylvester-Gleichung" umformen. Wie man solche Gleichungen wiederum effizient lösen kann, werden wir in den beiden letzten Abschnitten dieses Kapitels sehen.

2.1 Operator-Matrizen

Vorausgesetzt seien Hilberträume $H_i, 1 \leq i \leq M$ über einem Körper $\mathbb{K}$. Die dazugehörenden Skalarprodukte und Normen seien $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H_i}$ bzw. $\| \cdot \|_{H_i}$. Das Produkt $H_1 \times \cdots \times H_M$ wird vermöge

$$\langle x, y \rangle := \sum_i \langle x_i, y_i \rangle_{H_i}$$

selbst zu einem Hilbertraum $H_1 \oplus \cdots \oplus H_M$ über $\mathbb{K}$. Man bezeichnet diesen als die sogenannte **Hilbertraumsumme** der Hilberträume $H_1, \ldots, H_M$. Die zugehörige Norm ist dann

$$\|x\|^2 := \sum_i \|x_i\|^2_{H_i}.$$

Wir definieren nun den Begriff der Operatormatrix und des damit assoziierten Operators.

Definition 2.1.1 Unter einer **Operatormatrix** verstehen wir eine Familie von Operatoren $A_{i,j} : H_j \to G_i, 1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq M$ wobei $N, M \in \mathbb{N}$. Wir bezeichnen diese Familie auch als $(A_{i,j})$. Auf der Menge dieser Operatormatrizen definieren wir die Multiplikation $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ auf die gewohnte Art und Weise:

$$(A \cdot B)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}.$$

Vorausgesetzt sei, daß die Urbild– und Bildmengen der entsprechenden Operatoren "passen".

Einer Operatormatrix ordnen wir wie folgt einen Operator

$$[\mathbf{A}] = [A_{i,j}] : H_1 \oplus \cdots \oplus H_M \to G_1 \oplus \cdots \oplus G_N$$

zu.

$$([A]x)_i := \sum_{j=1}^{M} A_{i,j} x_j \qquad \text{für} \quad 1 \leq i \leq N.$$

Wir bezeichnen diesen Operator als **den der Operatormatrix** $(A_{i,j})$ **assoziierten oder zugeordneten Operator**[2].

Im folgenden beweisen wir einige Eigenschaften von Operatormatrizen, welche es uns später ermöglichen, mit diesen Matrizen auf gewohnte Art und Weise zu rechnen.

Satz 2.1.2 Die Abbildung $A \mapsto [A]$ ist ein Isomorphismus von der Menge der Operatormatrizen in die Menge der linearen Operatoren von $H_1 \oplus \cdots \oplus H_M$ nach $G_1 \oplus \cdots \oplus G_N$ vermöge $[A] \circ [B] = [A \cdot B]$ und $[A] + [B] = [A + B]$.

Beweis: Wir beweisen $[A] \circ [B] = [A \cdot B]$.

[2] Wir haben auf diese Art und Weise den bekannten Begriff der Matrix über einem Körper $\mathbb{K}$ erweitert. Betrachtet man die Menge $\mathcal{L}(\mathbb{K}, \mathbb{K})$ der linearen Operatoren von einem Körper in sich selbst, so ist diese isomorph zum dem Körper $\mathbb{K}$ vermöge $a \mapsto L_a, L_a x = a \cdot x$. Somit kann man die Matrizen über Körpern den Operatormatrizen unterordnen.

Es gilt $([B]x)_i = \sum_j B_{i,j}x_j$. Daher ist

$$\begin{aligned}(([A]\circ[B])x)_k = ([A]([B]x))_k &= \sum_i A_{k,i}\sum_j B_{i,j}x_j \\ &= \sum_j \left(\sum_i A_{k,i}B_{i,j}\right) x_j \\ &= \sum_j (A\cdot B)_{k,j}x_j \\ &= ([A\cdot B]x)_k.\end{aligned}$$

Das heißt $([A]\circ[B])(x) = [A\cdot B]x$.

Als nächstes zeigen wir die Injektivität der Abbildung $A \mapsto [A]$:

$$\begin{aligned}[A] = 0 &\Rightarrow ([A]x)_i = 0 \qquad \forall x, i \\ &\Rightarrow A_{i,j}x_j = 0 \qquad \forall i, j \qquad (\text{wähle } x = (0,\dots,x_j,\dots,0)) \\ &\Rightarrow A_{i,j} = 0 \qquad \forall i, j\end{aligned}$$

Zum Schluß die Surjektivität: Es sei ein linearer Operator $B : H_1\oplus\cdots\oplus H_M \to G_1\oplus\cdots\oplus G_N$ gegeben. Wir definieren die kanonischen Projektionen

$$P_j : H_1 \oplus \cdots \oplus H_m \to H_j, \quad (x_i) \mapsto x_j$$

und die kanonischen Einbettungen

$$E_j : H_j \to H_1 \oplus \cdots \oplus H_m, \quad x \mapsto (0,\dots,\underbrace{x}_{j-\text{te Stelle}},\dots,0).$$

Nun definieren wir

$$A_{i,j} := P_iBE_j.$$

Dann gilt:

$$([A]x)_i = \sum_j A_{i,j}x_j = P_iB\sum_j E_jx_j = P_iBx = (Bx)_i.$$

Das heißt $[A] = B$. ∎

Definition 2.1.3 Unter $(A^*_{i,j})^\top$ verstehen wir die Operatormatrix, welche entsteht, wenn man die einzelnen Operatoren adjungiert und diese an der Hauptdiagonalen gespiegelt anordnet. Der dazugehörende Operator wird mit $[A^*_{i,j}]^\top$ bezeichnet.

Satz 2.1.4 Es gilt $[A_{i,j}]^* = [A^*_{i,j}]^\top$.

Beweis:

$$\begin{aligned}
\langle [A_{i,j}]x, y\rangle &= \sum_i \sum_j \langle A_{i,j}x_j, y_i\rangle = \sum_i \sum_j \langle x_j, A^*_{i,j}y_i\rangle \\
&= \sum_j \langle x_j, \sum_i A^*_{i,j}y_i\rangle = \sum_j \langle x_j, \sum_i (A^*_{i,j})^\top_{j,i}y_i\rangle \\
&= \langle x, [A^*_{i,j}]^\top y\rangle.
\end{aligned}$$

■

Das heißt, wir erhalten die Adjungierte einer Operatormatrix, indem wir die beteiligten Operatoren transponiert anordnen und selbst jeweils adjungieren.

2.2 Operatormatrizen von Operatormatrizen

Da Operatormatrizen selbst wieder Operatoren darstellen, kann man auch Operatormatrizen von Operatormatrizen betrachten. Im folgenden zeigen wir, daß man durch das "Weglassen der inneren Klammern" einen auf kanonische Art und Weise isomorphen Operator erhält.

Wir betrachten nun eine Operatormatrix $(C^{i,j}), 1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J$ von Operatoren, welche selbst durch eine Operatormatrix $(C^{i,j}_{k,l})_{k,l}$ dargestellt werden. D.h. man hat Hilberträume $H_{j,l}$ und $G_{i,k}$ zusammen mit Operatoren $C^{i,j}_{k,l} : H_{j,l} \to G_{i,k}$. Wenn man diese bezüglich der unteren Indizes gruppiert, erhält man Operatoren

$$[C^{i,j}] : H_{j,1} \oplus \cdots \oplus H_{j,n_j} \to G_{i,1} \oplus \cdots \oplus G_{i,m_i}.$$

Das heißt, man hat Blöcke der Größe $n_j \times m_i$. Der Operator $[C]$ bildet nun wie folgt ab:

$$\begin{aligned}
[C] : (H_{1,1} \oplus \cdots \oplus H_{1,n_1}) \oplus \cdots \oplus (H_{J,1} \oplus \cdots \oplus H_{J,n_J}) \\
\to (G_{1,1} \oplus \cdots \oplus G_{1,m_1}) \oplus \cdots \oplus (G_{I,1} \oplus \cdots \oplus G_{I,m_I}).
\end{aligned}$$

Beispiel 2.2.1 Wir betrachten die Operatormatrix

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} C^{1,1}_{1,1} & C^{1,1}_{1,2} \\ C^{1,1}_{2,1} & C^{1,1}_{2,2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} C^{1,2}_{1,1} \\ C^{1,2}_{2,1} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C^{2,1}_{1,1} & C^{2,1}_{1,2} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} C^{2,2}_{1,1} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

Hier gilt

$$\begin{aligned}
C^{1,1} &: H_{1,1} \oplus H_{1,2} \to G_{1,1} \oplus G_{1,2} \\
C^{1,2} &: H_{2,1} \to G_{1,1} \oplus G_{1,2} \\
C^{2,1} &: H_{1,1} \oplus H_{1,2} \to G_{2,1} \\
C^{2,2} &: H_{2,1} \to G_{2,1}
\end{aligned}$$

und $n_1 = 2, n_2 = 1, m_1 = 2$ und $m_2 = 1$.

Wir "lösen nun die inneren Klammern auf" und erhalten eine Operatormatrix $(\tilde{C}_{i,j})$ gemäß

$$\tilde{C}_{p(k,l),q(i,j)} := C^{k,i}_{l,j},$$

wobei

$$q(k,l) = \sum_{i=1}^{k-1} n_i + l$$
$$p(k,l) = \sum_{i=1}^{k-1} m_i + l.$$

Das heißt p bzw. q bilden die Indizes "vor dem Auflösen der Klammern" auf den Index "nach dem Auflösen der Klammern" ab. Genauer gesagt bildet p die Menge $\{(k,l)|1 \leq k \leq J, 1 \leq k \leq n_k\}$ bijektiv ab auf $\{1 \dots m = \sum_i m_i\}$. Analoges gilt für q. In diesem Zusammenhang setzen wir $n = \sum_i n_i$.

Mit dem Vektor $x = (x^1, \dots, x^J) = ((x^1_1, \dots x^1_{n_1}), \dots, (x^J_1, \dots x^J_{n_J}))$ verfahren wir auf die gleiche Art und Weise wie mit C:

$$\tilde{x}_{q(i,j)} := x^i_j.$$

Es gilt:

Satz 2.2.2 Die mit den Operatormatrizen $(C^{i,j})$ und $(\tilde{C}_{i,j})$ assoziierten Operatoren sind mittels "weglassen von Klammern" isomorph. Die Abbildung $[C] \mapsto [\tilde{C}]$ ist eine Isometrie.

Beweis: Es gilt $([C]x)_k = \sum_i C^{k,i}x^i$ und somit $(([C]x)_k)_l = \sum_i (C^{k,i}x^i)_l = \sum_i \sum_j C^{k,i}_{l,j} x^i_j$. Weiterhin gilt

$$\begin{aligned}\sum_i \sum_j C^{k,i}_{l,j} x^i_j &= \sum_i \sum_j \tilde{C}_{p(k,l),q(i,j)} \tilde{x}_{q(i,j)} \\ &= \sum_{r=1}^{n} \tilde{C}_{p(k,l),r} \tilde{x}_r \\ &= (\tilde{C}\tilde{x})_{p(k,l)}.\end{aligned}$$

Also gilt die Aussage über die Isomorphie:

$$(([C]x)_k)_l = (\tilde{C}\tilde{x})_{p(k,l)}.$$

Aus dieser Rechnung folgt weiterhin

$$\begin{aligned}\|[C]x\|^2 &= \sum_k \sum_l \|(([C]x)_k)_l\|^2 = \sum_k \sum_l \|(\tilde{C}\tilde{x})_{p(k,l)}\|^2 \\ &= \sum_i \|(\tilde{C}\tilde{x})_i\|^2 = \|\tilde{C}\tilde{x}\|^2.\end{aligned}$$

Beachtet man nun $\|x\| = \|\tilde{x}\|$, so folgt $\|[C]\| = \|[\tilde{C}]\|$.

∎

2.3 Das Rechnen mit Blockmatrizen

Im folgenden partitionieren wir Operatormatrizen zu Blockmatrizen. Wir zeigen nun, daß man Matrizen sowohl auf gewohnte Art und Weise multiplizieren kann, als auch blockweise.

Lemma 2.3.1 Wir partitionieren die Matrix $A = (A_{i,j})$ zu

$$A = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 \\ \hline \vdots \\ \hline \mathcal{A}_M \end{pmatrix}$$

und $B = (B_{i,j})$ zu

$$B = \left(\mathcal{B}_1 | \quad \dots \quad | \mathcal{B}_N\right).$$

Die $\mathcal{A}_i$ haben jeweils m_i Zeilen, die $\mathcal{B}_j$ haben jeweils n_j Spalten. Partitionieren wir nun $C = AB$ wie folgt

$$C = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_{1,1} & \dots & \mathcal{C}_{1,N} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathcal{C}_{M,1} & \dots & \mathcal{C}_{M,N} \end{pmatrix},$$

so gilt

$$\mathcal{C}_{\alpha,\beta} = \mathcal{A}_\alpha \mathcal{B}_\beta.$$

Beweis: Wir definieren

$$q(\alpha, i) = \sum_{k=1}^{\alpha-1} n_k + i$$

und

$$p(\beta, j) = \sum_{k=1}^{\beta-1} m_k + j.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}(\mathcal{C}_{\alpha,\beta})_{i,j} = (C)_{p(\alpha,i),q(\beta,j)} &= \sum_k (A)_{p(\alpha,i),k} (B)_{k,q(\beta,j)} \\ &= \sum_k (\mathcal{A}_\alpha)_{i,k} (\mathcal{B}_\beta)_{k,j} = (\mathcal{A}_\alpha \mathcal{B}_\beta)_{i,j}.\end{aligned}$$

Das heißt $\mathcal{C}_{\alpha,\beta} = \mathcal{A}_\alpha \mathcal{B}_\beta$.

∎

Lemma 2.3.2 Wir partitionieren die Matrix $A = (A_{i,j})$ zu

$$A = \left(\mathcal{A}_1 | \quad \dots \quad | \mathcal{A}_M\right)$$

und $B = (B_{i,j})$ zu

$$B = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_1 \\ \hline \vdots \\ \hline \mathcal{B}_M \end{pmatrix}.$$

Die $\mathcal{A}_i$ haben jeweils m_i Spalten, die $\mathcal{B}_j$ haben jeweils m_j Zeilen. Dann gilt für $C = AB$:

$$C = \sum_{\gamma=1}^{M} \mathcal{A}_\gamma \mathcal{B}_\gamma.$$

Beweis: Wir definieren $p(\alpha, i) = \sum_{k=1}^{\alpha-1} m_k + i$ und können nun die Zahlen $1 \dots m$ unterteilen gemäß

$$1 \dots m = p(1,1) \dots p(1, m_1) p(2,1) \dots p(2, m_2) p(3,1) \dots p(M, m_M)$$

Das heißt

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= \sum_{k=1}^{m} A_{i,k} B_{k,j} = \sum_{\gamma=1}^{M} \sum_{k=p(\gamma,1)}^{p(\gamma,m_\gamma)} A_{i,k} B_{k,j} = \sum_{\gamma=1}^{M} \sum_{k=1}^{m_\gamma} A_{i,k+p(\gamma,1)-1}, B_{k+p(\gamma,1)-1,j} \\ &= \sum_{\gamma=1}^{M} \sum_{k=1}^{m_\gamma} A_{i,p(\gamma,k)}, B_{p(\gamma,k),j} = \sum_{\gamma=1}^{M} \sum_{k=1}^{m_\gamma} (\mathcal{A}_\gamma)_{i,k} (\mathcal{B}_\gamma)_{k,j} = \sum_{\gamma=1}^{M} (\mathcal{A}_\gamma \mathcal{B}_\gamma)_{i,j} \\ &= \left(\sum_{\gamma=1}^{M} \mathcal{A}_\gamma \mathcal{B}_\gamma \right)_{i,j}. \end{aligned}$$

■

Mit Hilfe dieser beiden Lemmata können wir nun den folgenden Satz beweisen. Er besagt, daß man das Matrixprodukt auch blockweise ausführen darf.

Satz 2.3.3 Die Matrizen A und B seien wie folgt partitioniert:

$$A = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{1,1} & \dots & \mathcal{A}_{1,s} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathcal{A}_{q,1} & \dots & \mathcal{A}_{q,s} \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{1,1} & \dots & \mathcal{B}_{1,r} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathcal{B}_{s,1} & \dots & \mathcal{B}_{s,r} \end{pmatrix}.$$

Der Block $\mathcal{A}_{i,j}$ hat dabei die Größe $m_i \times p_j$, der Block $\mathcal{B}_{i,j}$ hat die Größe $p_i \times n_j$.

Partitioniert man $C = AB$ gemäß

$$C = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_{1,1} & \dots & \mathcal{C}_{1,r} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathcal{C}_{q,1} & \dots & \mathcal{C}_{q,r} \end{pmatrix},$$

so daß der Block $\mathcal{C}_{i,j}$ die Größe $m_i \times n_j$ hat, so gilt

$$\mathcal{C}_{\alpha,\beta} = \sum_{\gamma} \mathcal{A}_{\alpha,\gamma} \mathcal{B}_{\gamma,\beta}.$$

Beweis: Wir fassen die Blöcke der Matrix A spaltenweise und die der Matrix B zeilenweise zusammen:

$$A = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 | & \dots & | \mathcal{A}_s \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_1 \\ \hline \vdots \\ \hline \mathcal{B}_s \end{pmatrix}$$

mit

$$\mathcal{A}_\gamma = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{1,\gamma} \\ \vdots \\ \mathcal{A}_{q,\gamma} \end{pmatrix} \qquad \mathcal{B}_\gamma = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{\gamma,1} & \dots & \mathcal{B}_{\gamma,r} \end{pmatrix}.$$

Dann gilt mit Lemma 2.3.1 und Lemma 2.3.2

$$\mathcal{C}_{\alpha,\beta} = \left(\sum_{\gamma} \mathcal{A}_\gamma \mathcal{B}_\gamma \right)_{\alpha,\beta} = \sum_{\gamma} (\mathcal{A}_\gamma \mathcal{B}_\gamma)_{\alpha,\beta} = \sum_{\gamma} \mathcal{A}_{\alpha,\gamma} \mathcal{B}_{\gamma,\beta}.$$

■

2.4 Das verallgemeinerte Kroneckerprodukt

Wir verallgemeinern das aus der linearen Algebra bekannte Kroneckerprodukt auf Operatormatrizen. Außerdem zeigen wir noch wichtige Rechenregeln, von denen wir später rege Gebrauch machen werden.

Definition 2.4.1 Sei $M = (M_{i,j})$ eine $n \times m$-Matrix über $\mathbb{K}$. B sei ein beliebiger Operator $B : H \to G$, wobei G, H Hilberträume über $\mathbb{K}$ seien. Dann bezeichnet $\mathbf{M} \otimes \mathbf{B}$ den folgenden Operator:

$$M \otimes B := \begin{bmatrix} M_{1,1}B & \dots & M_{1,n}B \\ \vdots & & \vdots \\ M_{m,1}B & \dots & M_{m,n}B \end{bmatrix}$$

Wir bezeichnen die Verknüpfung $\otimes$ als **verallgemeinertes Kroneckerprodukt**.

Satz 2.4.2 Die Verknüpfungen $\otimes$ und $+$ sind distributiv. Außderdem gelten

$$\begin{gathered}(M \otimes A)(N \otimes B) = (MN) \otimes (AB) \\ (M \otimes A)^{-1} = M^{-1} \otimes A^{-1} \\ (M \otimes B)^* = M^* \otimes B^*\end{gathered}$$

Beweis: Die Distributivität ist offensichtlich. Wir beweisen nun $(M \otimes A)(N \otimes B) = (MN) \otimes (AB)$:

$$\begin{aligned}((M \otimes A)(N \otimes B))_{i,j} &= \sum_k (M \otimes A)_{i,k} (N \otimes B)_{k,j} = \sum_k m_{i,k} A n_{k,j} B \\ &= (MN)_{i,j} AB = ((MN) \otimes (AB))_{i,j}\end{aligned}$$

Geht man von $M \in \mathbb{K}^{m \times m}$ aus, dann ist $\mathrm{Id}_{H^m} = \mathrm{Id}_m \otimes \mathrm{Id}_H$. Mit Hilfe der ersten Rechenregel folgt sofort $(M \otimes A)^{-1} = M^{-1} \otimes A^{-1}$.

Die letzte Behauptung folgt aus Satz 2.1.4. ∎

Im Falle, daß es sich bei dem zweiten Argument der Verknüpfung $\otimes$ um eine Operatormatrix handelt[3], benutzen wir Satz 2.2.2 und, lassen die inneren Klammern weg. In diesem Fall gibt es eine im folgenden oft benutzte Rechenregel, welche es erlaubt Gleichungssysteme mit Kronecker-Struktur in Form von Matrixgleichungen effizient zu lösen. Diese werden wir jetzt herleiten.

Gegeben sei eine Operatormatrix $(B_{i,j})$ mit

$$[B] : \underbrace{H_1 \oplus \cdots \oplus H_n}_{H} \to \underbrace{G_1 \oplus \cdots \oplus G_n}_{G}$$

sowie eine Matrix $A \in \mathbb{K}^{m \times m}$. Das heißt

$$A \otimes [B] : H^m \to G^m.$$

Einem Vektor $x \in H^m$, d.h. $x = (x^1, \ldots, x^m) = (x_1^1, \ldots, x_n^1, x_1^2, \ldots, x_n^2, \ldots, x_n^m)$ ordnen wir die folgende Matrix zu

$$\mathrm{Mat}_n(x) := \begin{bmatrix} x_1^1 & \ldots & x_1^m \\ \vdots & & \vdots \\ x_n^1 & \ldots & x_n^m \end{bmatrix}.$$

Setzen wir schließlich

$$x \cdot \alpha := \alpha \cdot x \qquad x \in H_i, \alpha \in \mathbb{K},$$

[3]das ist wie bereits in 2.1 erwähnt der Fall, wenn es sich um eine Matrix über $\mathbb{K}$ handelt.

sowie

$$[B]X = ([B]x_1 | \ldots | [B]x_n),$$

so können jetzt den folgenden Satz formulieren und beweisen:

Satz 2.4.3 Es seien $A, [B]$ wie oben. $x \in H^m, y \in G^m$. Wir setzen $X := \mathrm{Mat}_n(x)$ und $Y := \mathrm{Mat}_n(y)$. Dann ist die Gleichung

$$(A \otimes [B])x = y$$

äquivalent zu

$$[B]XA^\top = Y.$$

Beweis: Im folgenden bezeichnet $(M)_k$ die k-te Spalte der Matrix M. Es gilt

$$(A \otimes [B])\, x = \begin{bmatrix} a_{1,1}[B] & \cdots & a_{1,m}[B] \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1}[B] & \cdots & a_{m,m}[B] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x^1 \\ \vdots \\ x^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^1 \\ \vdots \\ y^m \end{pmatrix}.$$

Das heißt

$$y^k = \sum_l a_{k,l}\, [B]x^l = \sum_l (A^\top)_{l,k}\, [B]x^l.$$

Außerdem haben wir

$$[B]x^l = [B] \left(\left[x^1 \,|\ldots|\, x^m\right] \right)_l = ([B]X)_l,$$

und

$$(MN)_k = \sum_i (N)_{i,k} (M)_i.$$

Das alles zusammen liefert

$$y^k = \sum_l (A^\top)_{l,k}\, ([B]X)_l = ([B]XA^\top)_k.$$

Somit erhalten wir

$$Y = \left[y^1 \,|\ldots|\, y^m\right] = \left[([B]XA^\top)_1 \,|\ldots|\, ([B]XA^\top)_m\right] = [B]XA^\top.$$

■

Wir werden diesen Satz später für der Spezialfall $\mathbb{K} = H = G = \mathbb{R}$ benutzen. In diesem Fall ist die Operatormatrix $[B]$ nichts anderes als eine gewöhnliche Matrix über $\mathbb{R}$. Mit Hilfe des letzten Satzes kann man im allgemeinen recht große Gleichungssysteme der Form $(A \otimes B)x = y$ effizient lösen.

2.5 Die Minimum-Norm Lösung

Im folgenden betrachten wir eine Gleichung der Form $Ax = b$. Hierbei sind H, G Hilberträume, $x \in H$, $y \in G$, $A \in \mathcal{L}(H, G)$ mit $R(A) = G$.

Satz und Defnition 2.5.1 Die Aufgabe

$$Ax = b \qquad \text{und} \qquad \|x\| \to \min$$

hat eine eindeutige Lösung, die sogenannte **Minimum-Norm Lösung**. Diese ist genau die eindeutige Lösung von

$$Ax = b \qquad \text{und} \qquad x \in R(A^*).$$

Beweis: Gegeben seien zwei Lösungen x_1 und x_2 von $Ax = b$. Diese haben eine eindeutige Zerlegung $x_1 = y_1 + z_1$ und $x_2 = y_2 + z_2$ mit $y_i \in N(A)^\perp$ und $z_i \in N(A)$. Dann gilt $0 = A(x_1 - x_2) = A(y_1 - y_2)$. Da $y_1 - y_2 \in N(A)^\perp$ folgt $y_1 - y_2 = 0$, d.h. $y_1 = y_2$.

Insgesamt gilt also: Alle Lösungen von $Ax = b$ haben die Form $x = y + z$. Hierbei ist $y \in N(A)^\perp$ eindeutig und fix, $z \in N(A)$ ist beliebig.

Für die Lösungen $x = y + z$ des linearen Gleichungssystems gilt nach dem Satz von Pythagoras:

$$\|x\|^2 = \|y\|^2 + \|z\|^2$$

Das heißt die Lösung minimaler Norm von $Ax = b$ ist y. Dieses ist eindeutig bestimmt. Da $N(A)^\perp = R(A^*)$ gilt, ist das Lemma bewiesen. ■

Es folgt sofort

Korollar 2.5.2 Die eindeutige Lösung der Aufgabe

$$Ax = b \qquad \text{und} \qquad \|x\| \to \min$$

erhält man, indem man $AA^*u = b$ löst und $x = A^*u$ setzt.

2.6 Das Tikhonov-Phillips-Verfahren

Ausgangspunkt zum Verfahren von Tikhonov-Phillips ist die Minimierungsaufgabe

$$\|Ax - b\|^2 + \lambda^2 \|Bx\|^2 \to \min \tag{2.1}$$

Hierbei wählen wir A, x, b wie im vorherigen Abschnitt mit der Ausnahme, daß $R(A)$ beliebig sein kann, $B \in \mathcal{L}(H, \tilde{G})$, so daß B^*B positiv definit ist. $\tilde{G}$ sei hierbei ein weiterer Hilbertraum über $\mathbb{K}$.

Die hierdurch induzierte Abbildung $T_\lambda : b \mapsto x$ ist die sogenannte **Tikhonov-Phillips-Regularisierung** von $A^\dagger$ [Lou89].

Lemma 2.6.1 Die Frechet-Ableitung $DF(x)$ von $F(x) = \|Ax - b\|^2$ erfüllt

$$DF(x)h = \langle 2A^*(Ax - b), h \rangle.$$

Beweis:

$$\begin{aligned} F(x+h) - F(x) &= \|A(x+h) - b\|^2 - \|A\,x - b\|^2 \\ &= \langle A(x+h) - b, A(x+h) - b\,\rangle - \langle A\,x - b, A\,x - b\,\rangle \\ &= 2\langle A\,h, A\,x - b\,\rangle + \langle A\,h, A\,h\,\rangle \\ &= \langle 2A^*(A\,x - b), h\rangle + \mathcal{O}\left(\|h\|^2\right) \end{aligned}$$

■

Korollar 2.6.2 Die Lösung der Minimierungsaufgabe (2.1) erhält man, indem man das Gleichungssystem

$$(A^*A + \lambda^2 B^*B)\,x = A^*b$$

löst.

Beweis: Das Tikhonov-Phillips-Funktional

$$\Psi(x) = \|A\,x - b\|^2 + \lambda^2\|Bx\|^2$$

ist konvex. Daher folgt die Behauptung, indem man Lemma 2.6.1 auf beide Summanden von (2.1) anwendet. ■

Falls ein positiv definites E existiert, so daß

$$B^*BA^* = A^*E \tag{2.2}$$

gilt, so erhalten wir die folgende Verallgemeinerung der Formel (1.6) aus Kapitel 4 aus [Nat86]:

Lemma 2.6.3 Man erhält die Lösung von (2.1) auch indem man

$$(AA^* + \lambda^2 E)\,u = b$$

löst und

$$x = A^*u$$

setzt.

Beweis: Die Operatoren AA^* und A^*A sind positiv semidefinit. Daher sind $AA^* + \lambda^2 E$ und $A^*A + \lambda^2 B^*B$ regulär. Die Behauptung ist daher bewiesen, wenn man

$$(A^*A + \lambda^2 B^*B)^{-1} A^* = A^*(AA^* + \lambda^2 E)^{-1}$$

zeigt. Diese Gleichung ist äquivalent zu

$$A^*(AA^* + \lambda^2 E) = (A^*A + \lambda^2 B^*B)\, A^*$$

und diese Aussage ist wegen (2.2) wahr. ∎

Hat man es mit einem unterbestimmten Operator A zu tun, so liefert Lemma 2.6.3 ein effizienteres Verfahren als das aus Korollar 2.6.2.

Interessant ist auch der Fall $A \in \mathcal{L}(H, \mathbb{K}^n)$. Dann ist $(AA^* + \lambda E)\, u = b$ eine Matrix-Vektorgleichung über $\mathbb{K}$.

2.7 Zur numerischen Lösung von Operatormatrixgleichungen

Im folgenden werden wir, wie in [Lou89] ausgeführt, Operatorgleichungen mittels **Projektionsverfahren** numerisch lösen. Dazu suchen wir eine Funktion f als Lösung der Operatororgleichung $Af = g$ in einem endlichdimensionalen Teilraum und verlangen die Gleichheit nur in Bezug auf endlich viele Testfunktionale.

Genauer: Seien X, Y Banachräume und $A : X \to Y$ linear, stetig und injektiv. Dann betrachten wir die Operatorgleichung $Af = g$. Wir lösen diese Gleichung nun approximativ, indem wir X durch einen endlichdimensionalen Teilraum X_h ersetzen. Wir suchen nun $f_h \in X_h$. Statt der Gleichheit

$$Af_h = g$$

fordern wir

$$\Psi A f_h = \Psi g \quad \text{für alle} \quad \Psi \in Y_h^*.$$

Y_h^* ist dabei ein endlichdimensionaler Teilraum von Y^*. Ist $X_h = \operatorname{span}\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ und $Y_h^* = \operatorname{span}\{\psi_1 \ldots, \psi_m\}$, so erhält man f_h in der Form $f_h = \sum_i \alpha_i \phi_i$, indem man die im folgenden hergeleitete Matrix-Vektor Gleichung für die Koeffizienten α_i löst:

$$\begin{aligned} & \psi_i A \sum_j \alpha_j \phi_j = \psi_i g \quad \forall i \\ \Leftrightarrow \quad & \sum_j \alpha_j \psi_i A \phi_j = \psi_i g \quad \forall i \\ \Leftrightarrow \quad & A_h \alpha = g_h \end{aligned}$$

Hierbei ist $(A_h)_{i,j} = \psi_i A\phi_j$ und $(g_h)_i = \psi_i g$.

Unter gewissen Voraussetzungen konvergiert die so erhaltene Lösung gegen die exakte Lösung, falls der Ansatzraum und der Raum der Testfunktionen groß genug gewählt werden. Siehe dazu [Lou89].

Wir wollen nun erörtern, wie man eine spezielle Klasse von Operatorgleichungen numerisch lösen können. Bei dieser Klasse handelt es sich um die mit Operatormatrizen assoziierten Operatoren. Wir wollen nun erörtern, wie man eine spezielle Klasse von Operatorgleichungen numerisch lösen können. Bei dieser Klasse handelt es sich um die mit Operatormatrizen assoziierten Operatoren. Zur Situation: Wir haben Operatoren $C_{i,j} : H_j \to G_i$ mit Banachräumen $H_j, 1 \leq j \leq m$ und $G_i, 1 \leq i \leq n$. Die Räume H_i approximieren wir durch endlichdimensionale Teilräume

$$H_i^h = \operatorname{span}\{\phi_{i,j} \,|\, 1 \leq j \leq m_i\} \subset H_i.$$

Als Testfunktionale für den Raum G_i haben wir

$$(G_i^*)^h = \operatorname{span}\{\psi_{i,j} \,|\, 1 \leq j \leq n_i\} \subset G_i^*.$$

Wir betrachten nun die Operatorgleichung

$$[C]f = g.$$

Hierbei ist

$$[C] : \underbrace{H_1 \times \cdots \times H_m}_{H} \to \underbrace{G_1 \times \cdots \times G_n}_{G}.$$

Ausgehend von den gegebenen Teilräumen H_i^h und $(G_i^*)^h$ bilden wir die Teilräume H^h und $(G^*)^h$ wie folgt:

Wir definieren

$$p(i,j) = \sum_{l=1}^{i-1} n_l + j \quad \text{und} \quad q(i,j) = \sum_{l=1}^{i-1} m_l + j.$$

p bildet $\{(i,j) \,|\, 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m_i\}$ bijektiv auf $\{1 \ldots \sum m_i\}$ ab. Diese Abbildung dient dazu, den Index des j-ten Elements im i-ten Raum H_i auf einen absoluten Index in H abzubilden. q hat analoge Eigenschaften.

Nun nehmen wir

$$\Phi_{q(i,j)} = (0, \ldots, \underbrace{\phi_{i,j}}_{i-\text{te Stelle}}, \ldots, 0)$$

als Ansatzfunktionen in H sowie

$$\Psi_{p(i,j)}(y_1, \ldots, y_n) = \psi_{i,j}(y_i)$$

als Testfunktionen in G^*. Das heißt wir wählen

$$H^h = \operatorname{span}\{\Phi_l \,|\, 1 \leq l \leq \textstyle\sum m_i\} \quad \text{und} \quad (G^*)^h = \operatorname{span}\{\Psi_l \,|\, 1 \leq l \leq \textstyle\sum n_i\}.$$

Wir bilden nun die Matrix A als Diskretisierung von $[C]$ und $B_{i,j}$ als Diskretisierung von $C_{i,j}$. Also

$$A_{i,j} = \Psi_i[C]\Phi_j \quad \text{und} \quad (B_{i,j})_{k,l} = \psi_{i,k} C_{i,j} \phi_{j,l}.$$

Dann gilt

Lemma 2.7.1 Unter den oben gemachten Voraussetzungen gilt: Die Disrektisierungsmatrix A von $[C]$ entsteht, indem man die Diskretisierungsmatrizen $B_{i,j}$ von $C_{i,j}$ blockweise zusammensetzt.

Beweis: Es gilt

$$\begin{aligned} A_{p(i,k),q(j,l)} &= \Psi_{p(i,k)}[C]\Phi_{q(j,l)} = \Psi_{p(i,k)}(C_{1,j}\phi_{j,l}, C_{2,j}\phi_{j,l}, \ldots C_{n,j}\phi_{j,l}) \\ &= \psi_{i,k} C_{i,j} \phi_{j,l} = (B_{i,j})_{k,l} \end{aligned}$$

■

2.8 Die reelle Schurtransformation

Wir fassen in diesem Kapitel einige Aussagen über die sogenannte "reelle Schurtransformation" zusammen. Diese wird in den folgenden Kapiteln über die numerische Lösung von Gleichungen des Sylvester-Typs eine zentrale Rolle spielen. Wir geben im folgenden Sätze und Algorithmen ohne Beweise bzw. detaillierte Herleitungen an. Der interessierte Leser findet alle notwendigen Details in den Kapiteln 7.4 und 7.5 von [GvL96].

Definition 2.8.1 Eine Blockmatrix mit oberer Dreiecksstruktur und 1×1 oder 2×2-Blöcken auf der Diagonalen bezeichnet man als **obere quasi-trianguläre Matrix**.

Satz und Defnition 2.8.2 Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so daß

$$Q^\top A Q = \begin{pmatrix} R_{1,1} & R_{1,2} & \cdots & R_{1,m} \\ 0 & R_{2,2} & \cdots & R_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R_{m,m} \end{pmatrix},$$

wobei jedes $R_{i,i}$ entweder eine 1×1 Matrix oder eine 2×2 Matrix mit konjugiert komplexen Eigenwerten ist. Diese Transformation bezeichnet man als **reelle Schurtransformation**.

Im folgenden skizzieren wir einen effizienten Algorithmus zur Schur-Transformation einer gegebenen Matrix A. Vorher benötigen wir noch die folgende

Definition 2.8.3 Eine Matrix A hat **Hessenbergform** genau dann, wenn $a_{i,j} = 0$ für $i \geq j + 1$, das heißt unterhalb der Subdiagonalen befinden sich nur Nulleinträge.

Der Algorithmus hat dann die folgende Struktur:

1. Transformiere $H_0 = U_0^\top A U_0$. Hierbei ist U_0 orthogonal und H_0 hat Hessenbergform.
2. für $k = 1, 2, \dots$
   (a) Zerlege H_{k-1} mittels QR-Faktorsierung zu $H_{k-1} = U_k R_k$.
   (b) Bilde $H_k = R_k U_k$

Der erste Schritt dieses Verfahrens ist mittels Householder-Reflexionen mit einem Aufwand von $\frac{14}{3}n^3$ FLOPS[4] möglich.

Durch die Transformation auf Hessenberggestalt sind die QR-Iterationen (Schritt 2 in obigem Algorithmus) mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ statt $\mathcal{O}(n^3)$ möglich.

Einen detaillierten Algorithmus mit einem sinnvollen Abbruchkriterium für die Iteration in Schritt 2 findet man als Algorithmus 7.5.2 in [GvL96]. Der oben angegebene Algorithmus hat einen Gesamtaufwand von $25n^3$ FLOPS.

2.9 Die "continuous time"-Sylvestergleichung

Im folgenden leiten wir einen effizienten Algorithmus her, um die **"continuous-time"-Sylvestergleichung**

$$AX + XB^\top = M$$

numerisch zu lösen[5]. Hierbei ist $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $B \in \mathbb{R}^{m\times m}$. M und X sind dann notwendigerweise aus $\mathbb{R}^{n\times m}$. Wie wir in der Laufzeitanalyse sehen werden ist es sinnvoll, daß $n \geq m$ ist. Ansonsten betrachten wir das durch Transposition entstehende Problem

$$BX^\top + X^\top A^\top = M^\top.$$

Die im diesem und dem folgenden Kapitel angegebenen Verfahren orientieren sich an den Ideen des Artikels [GLAM92], in welchem ein allgemeines Verfahren für Gleichungen der Form $AXB^\top + CXD^\top = E$ angegeben wird. Wegen der Allgemeinheit dieses Verfahrens, kann man in den im folgenden aufgeführten Spezialfällen Laufzeitverbesserungen erzielen.

[4]FLOPS=Floating Point Operations. Wir zählen jede Grundrechenart mit einem FLOP.

[5]Wir führen die folgenden Rechnungen lediglich für Matrizen über $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ aus. Die Änderungen für den Fall $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ werden wir jeweils in Form von Fußnoten kommentieren.

Sylvestergleichungen entstehen aus Gleichungen mit Kroneckerprodukt-Struktur. So ist das System

$$(I_m \otimes A + B \otimes I_n)x = m$$

gemäß Satz 2.4.3 zu der oben angegebenen "continuous time"-Sylvestergleichung äquivalent. Löst man dieses System mit Kroneckerstruktur, so hat man nach [GvL96] einen Aufwand von $\mathcal{O}(n^3m^3)$ Operationen. Wie wir sehen werden, ist die dazu äquivalente Sylvestergleichung mit einem Aufwand von $\mathcal{O}((n+m)^3)$ wesentlich effizienter lösbar.

2.9.1 Das Verfahren

Wir werden zunächst die Matrizen A und B mittels Ähnlichkeitstransformationen auf eine "einfache" Gestalt transformieren. Hierbei sind orthogonale Transformationen das Mittel der Wahl, da diese bestmöglich konditioniert sind. Bei diesen Transformationen geht das ursprüngliche Problem in ein genauso gut konditioniertes, einfacheres Problem über. Das daraus resultierende, einfachere Problem läßt sich aufgrund seiner Struktur rekursiv lösen.

Schritt 1: Wir benutzen die reelle Schurtransformation[6] für B (siehe Kapitel 2.8) und erhalten

$$B = UTU^\top.$$

Hierbei sind U und T aus $\mathbb{R}^{m\times m}$. T ist quasi-triangulär, d.h. auf der Hauptdiagonalen sind $1\times 1-$ oder $2\times 2-$ Blöcke. U ist orthogonal. Außerdem transformieren wir A gemäß

$$A = VSV^\top,$$

wobei S Hessenberg-Form hat, d.h. die Einträge unterhalb der Subdiagonalen sind alle Null. Hierbei sind S und V aus $\mathbb{R}^{n\times n}$, V ist orthogonal. Wie man diese Transformationen numerisch berechnet, findet man in Kapitel 2.8.

Wir erhalten dann durch Umformung die Gleichung

$$SY + YT^\top = F.$$

Hierbei haben wir $Y = V^\top XU$ und $F = V^\top MU$ gesetzt.

Schritt 2: Wir betrachten die k-te Spalte der letzten Gleichung. Sei $Y = [y_1|\dots|y_m]$ und $F = [f_1|\dots|f_m]$. Dann gilt

$$Sy_k + \sum_{i=k-1}^{m} t_{k,i}y_i = f_k. \tag{2.3}$$

Diese Rekursion kann wie folgt aufgelöst werden[7]:

[6] Für komplexe Matrizen führen wir die allgemeine Schurtransformation aus: $B = UTU^H$. Hierbei ist T eine obere Dreiecksmatrix. Siehe Kapitel 2.8.

[7] Im komplexen Fall tritt nur Fall 1 in Kraft, da es sich bei T um eine obere Dreiecksmatrix handelt.

1. Fall: $t_{k,k-1} = 0$

Aus Gleichung (2.3) folgt

$$Sy_k + t_{k,k}y_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i}y_i =: r_k. \tag{2.4}$$

Diese Gleichung kann mittels des Gauß-Verfahrens nach y_k aufgelöst werden. Da S unterhalb der Subdiagonalen gleich Null ist, kann dies mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ geschehen.

2. Fall: $t_{k,k-1} \neq 0$

Dann folgt wegen der quasi-Triangulität von T, daß $t_{k-1,k-2} = 0$ gilt.

Man erhält

$$Sy_k + t_{k,k-1}y_{k-1} + t_{k,k}y_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i}y_i = r_k \tag{2.5}$$

$$Sy_{k-1} + t_{k-1,k-1}y_{k-1} + t_{k-1,k}y_k = f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i}y_i =: \hat{r}_k. \tag{2.6}$$

In Matrix-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} S + t_{k,k}I_n & t_{k,k-1}I_n \\ t_{k-1,k}I_n & S + t_{k-1,k-1}I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_k \\ y_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_k \\ \hat{r}_k \end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

Dieses System der Größe $2n \times 2n$ kann mittels des Gauß-Verfahrens gelöst werden. Nach Tauschen der Spalten und Zeilen gemäß der Permutation $(1, n+1, 2, n+2, \dots, 2n)$ erhält man ein System, bei dem lediglich die ersten drei Subdiagonalen sowie der Teil überhalb der Diagonalen ungleich Null sind. Auch hier ist daher das Lösen mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ möglich. Mehr dazu in der unten folgenden Laufzeitanalyse.

Insgesamt erhalten wir folgendes Verfahren:

1. **Eingabe**: Matritzen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}, B \in \mathbb{R}^{m\times m}, M \in \mathbb{R}^{n\times m}$ mit $n \geq m$.
2. Berechne die reelle Schurtransformation $B = UTU^\top$, und transformiere A mittels orthogonalem V auf Hessenberg-Gestalt, d.h. $A = VSV^\top$. Setze $F = V^\top MU$.
3. k:=m
4. Berechne $r_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} y_i$.
5. (a) Fall 1, $t_{k,k-1} = 0$:
   Löse $\quad (S + t_{k,k} I_n)\, y_k = r_k$.
   Setze $k := k - 1$.

   (b) Fall 2, $t_{k,k-1} \neq 0$:
   Berechne $\hat{r}_k = f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i} y_i$.
   Löse
   $$\begin{pmatrix} S + t_{k,k} I_n & t_{k,k-1} I_n \\ t_{k-1,k} I_n & S + t_{k-1,k-1} I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_k \\ y_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_k \\ \hat{r}_k \end{pmatrix}.$$
   Setze $k := k - 2$.
6. Falls $k \geq 1$ gehe zu Schritt 4.
7. **Ausgabe:** $\quad X = VYU^\top$.

2.9.2 Zur Laufzeit

Wir analysieren im folgenden die Laufzeiten der einzelnen Schritte, um am Schluß eine obere Schranke für die benötigten FLOPS zu erhalten.

Die Transformation von A auf Hessenberg-Gestalt benötigt nach Kapitel 2.8 $\frac{14}{3} n^3$ FLOPS, die Schurtransformation von B auf quasi–trianguläre Gestalt hat nach Kapitel 2.8 7.5 einen Aufwand von $25m^3$ FLOPS. Die Berechnung von $F = V^\top MU$ benötigt $2(n^2 m + nm^2)$ FLOPS.

Die Berechnung von r_k im Schritt 4 schlägt mit $n + 2n(m - k)$ FLOPS zu Buche.

Wir analysieren nun den Schritt 5(a): Das System hat eine Größe von $n \times n$ wobei alle Elemente unterhalb der Subdiagonalen gleich Null sind. Die Transformation dieses Systems auf obere Dreiecksgestalt benötigt $\sum_{k=2}^{n}(2(n - k + 2) + 2) = n^2 + 3n - 4$ FLOPS, das anschließende Lösen via Rücksubstituion hat einen Aufwand von $n^2 + n - 1$ FLOPS.

Nun folgt die Analyse von Schritt 5(b): Die Berechnung von $\hat{r}_k$ hat einen Aufwand von

$n + 2n(m - k)$ FLOPS, das sind maximal $2nm - n$ FLOPS. Nun folgt nach Tauschen von Zeilen und Spalten mittels der Permutation $(1, n+1, 2, n+2, \ldots, 2n)$ das Lösen des $2m \times 2m$–Systems mit maximal drei Subdiagonalen ungleich Null. Man hat einen Aufwand von $\sum_{k=4}^{2n}(2n(2n-k+4)+2)$, um die unterste Subdiagonale ungleich Null zu eliminieren, einen Aufwand von $\sum_{k=3}^{2n}(2n(2n-k+3)+2)$, um die darauf folgende Subdiagonale ungleich Null zu eliminieren und schließlich einen Aufwand von $\sum_{k=2}^{2n}(2n(2n-k+2)+2)$, um das System auf obere Dreiecksgestalt zu bringen. Dann braucht man noch $(2n)^2 + 2n - 1$ FLOPS um das System via Rücksubstitution zu lösen. Das macht einen Gesamtaufwand von $16n^2 + 20n - 33$ FLOPS.

Der letzte Schritt, nämlich die Transformation von $X = VYU^\top$, schlägt zum Ende noch mit $2(n^2m + nm^2)$ FLOPS zu Buche.

Geht man davon aus, daß tm mal der Fall 5(b) auftritt $(0 \leq t \leq 0.5)$ und $(1-2t)m$ mal Fall 5(a), so erhält man für Schritt 5 einen Gesamtaufwand von $2n^2m + 4nm - 5m + t(2nm^2 + 11nm - 23m + 12n^2m)$ FLOPS, welcher sich nach oben durch $8n^2m + nm^2 + \frac{19}{2}nm - \frac{33}{2}m$ FLOPS abschätzen lässt.

Nimmt man die Kosten der restlichen Schritte hinzu, so hat man einen maximalen Aufwand von $\frac{14}{3}n^3 + 25m^3 + 6nm^2 + 12n^2m + \frac{19}{2}nm - \frac{33}{2}m$ FLOPS. Hier wird auch einsichtig, warum wir im Vorfeld $n \geq m$ verlangt haben. Dieser Aufwand kann nach oben mittels $25(n+m)^3$ FLOPS abgeschätzt werden. Man benötigt also $\mathcal{O}((n+m)^3)$ Operationen zur Lösung der "continuous-time"-Sylvestergleichung.

2.10 Die verallgemeinerte "discrete time"-Sylvestergleichung

Nachdem wir uns mit der "continuous time"-Sylvestergleichung befasst haben, untersuchen wir nun die sogenannte verallgemeinerte "discrete time"-Sylvestergleichung[8]

$$AXB^\top + \lambda X = M.$$

Hierbei ist $A \in \mathbb{R}^{n\times n}, B \in \mathbb{R}^{m\times m}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$. M und X sind dann notwendigerweise aus $\mathbb{R}^{n\times m}$. Wie wir in der Laufzeitanalyse sehen werden, ist es sinnvoll, $n \geq m$ anzunehmen, ansonsten betrachten wir das durch Transposition entstehende Problem

$$BX^\top A^\top + \lambda X^\top = M^\top.$$

[8]Auch hier werden wir, wie bei der 'continuous time'-Sylvestergleichung, nur den Fall reeller Matrizen ausführen. Die Änderungen für den komplexen Fall sind analog zum 'continuous time'–Fall: anstelle der rellen Schurtransformation $B = VTV^\top$ mit quasi-triangulärem T benutzen wir die komplexe Schurtransformation $B = VTV^H$, wobei T eine oberne Dreiecksmatrix ist. Dadurch wird im folgenden nur der 1. Fall im Schritt 2 auftreten.

Wie bei der "continuous time"-Sylvestergleichung gesehen, ist die "discrete time"-Sylvestergleichung äquivalent zu einem größeren Gleichungssystem, welches gemäß Satz 2.4.3 Kroneckerstruktur hat. Das naive Lösen dieses Gleichungssystems benötigt einen Aufwand von $\mathcal{O}(n^3m^3)$. Wie wir sehen werden, ist das Lösen der dazu äquivalenten Sylvestergleichung mit einem Aufwand von $\mathcal{O}((n+m)^3)$ wesentlich effizienter.

Ausgangspunkt für das im folgenden hergeleitete Verfahren ist die Arbeit [GLAM92].

2.10.1 Das Verfahren

Wie bei der "continuous time"-Sylvestergleichung beschrieben, benutzen wir auch hier orthogonale Transformationen, um das ursprüngliche Problem in ein gleich gut konditioniertes, einfacheres Problem zu überführen. Das einfachere Problem ist dann rekursiv auflösbar.

Schritt 1: Wir benutzen die reelle Schurtransformation für B und die Hessenbergtransformation für A:

$$A = USU^\top \qquad B = VTV^\top$$

Hierbei sind U und V orthogonal, T ist quasi-triangulär, d.h. auf der Hauptdiagonale befinden sich $1\times 1-$ oder $2\times 2-$ Blöcke. S hat Hessenberggestalt, d.h. die Einträge unterhalb der Subdiagonalen sind gleich Null. Die Matritzen U, S sind aus $\mathbb{R}^{n\times n}$, V, T aus $\mathbb{R}^{m\times m}$. Wie sich diese Transformationen berechnen läßt, findet man in Kapitel 2.8.

Unsere Aufgabe kann dann umgeformt werden:

$$USU^\top XVT^\top V^\top + \lambda X = M,$$

und mit $Y = U^\top XV$ erhält man

$$USYT^\top V^\top + \lambda UYV^\top = M$$

bzw.

$$SYT^\top + \lambda Y = U^\top MV =: F.$$

Zu lösen ist also

$$SYT^\top + \lambda Y = F. \tag{2.8}$$

Schritt 2: Wir betrachten die k-te Spalte der letzten Gleichung. Sei $Y = [y_1|\dots|y_m]$ und $F = [f_1|\dots|f_m]$. Dann gilt

$$S\sum_{i=k-1}^{m} t_{k,i}y_i + \lambda y_k = f_k. \tag{2.9}$$

Diese Rekursion kann bei $k = m$ beginnend wie folgt aufgelöst werden:

1. Fall, $t_{k,k-1} = 0$:

Dann folgt

$$(t_{k,k}S + \lambda I)\, y_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} S y_i.$$

Das Lösen dieses Gleichungssystems der Größe $n \times n$ kann mit Hilfe des Gauß-Verfahrens geschehen. Da S Hessenberg-Gestalt hat, kann das Gleichungssystem mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ gelöst werden. Genauere Angaben über die benötigte Anzahl Flops folgen später.

2. Fall, $t_{k,k-1} \neq 0$:

Da T quasi-triangulär ist, ist notwendigerweise $t_{k-1,k-2} = 0$. Dann kann man die rekursive Gleichung (2.9) wie folgt lösen: diese Gleichung liefert die zwei Gleichungen

$$St_{k,k-1}y_{k-1} + St_{k,k}y_k + \lambda y_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} S y_i \tag{2.10}$$

$$St_{k-1,k-2}y_{k-2} + St_{k-1,k-1}y_{k-1} + \lambda y_{k-1} = f_{k-1} - \sum_{i=k}^{m} t_{k-1,i} S y_i. \tag{2.11}$$

Aus den Gleichungen (4.26) und (4.27) folgt dann

$$t_{k,k-1}Sy_{k-1} + t_{k,k}Sy_k + \lambda y_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} S y_i \tag{2.12}$$

$$t_{k-1,k-1}Sy_{k-1} + t_{k-1,k}Sy_k + \lambda y_{k-1} = f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i} S y_i. \tag{2.13}$$

In Matrix-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} t_{k,k}S + \lambda I & t_{k,k-1}S \\ t_{k-1,k}S & t_{k-1,k-1}S + \lambda I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_k \\ y_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} S y_i \\ f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i} S y_i \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

Dieses System der Größe $2n \times 2n$ kann mittels des Gauß-Verfahrens gelöst werden. Wendet man die Permutation $(1, n+1, 2, n+2, \ldots, 2n)$ sowohl zeilen- als auch spaltenweise an, so entsteht eine Block-Diagonalmatrix mit maximal 4×4 Blöcken auf der Diagonalen. Das heißt man hat maximal drei Subdiagonale ungleich Null. Auch hier ist der Aufwand für das Lösen des Gleichungssystems $\mathcal{O}(n^2)$.

Verbesserungen:

Wir setzen im folgenden $p_i = Sy_i$. Desweiteren kürzen wir die auftretenden rechten Seiten wie folgt ab:

$$r_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i} p_i \tag{2.15}$$

$$\hat{r}_k = f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i} p_i \tag{2.16}$$

Wir berechnen nun die p_i synchron zu den y_i:

Im ersten Fall ergibt sich

$$p_k = Sy_k = \frac{1}{t_{k,k}} \left(r_k - \lambda y_k \right). \tag{2.17}$$

Im zweiten Fall erhält man nach einiger Rechnung

$$p_{k-1} = \frac{t_{k-1,k}(r_k - \lambda y_k) - t_{k,k}(\hat{r}_k - \lambda y_{k-1})}{t_{k,k-1} t_{k-1,k} - t_{k,k} t_{k-1,k-1}} \tag{2.18}$$

$$p_k = \frac{1}{t_{k,k}}(r_k - \lambda y_k - t_{k,k-1} p_{k-1}). \tag{2.19}$$

Wie wir bei der Laufzeitanalyse sehen werden, erreichen wir so die Berechnung der p_i mit einer Laufzeit von $\mathcal{O}(n)$ (anstelle von $\mathcal{O}(n^2)$, wenn wir p_i mittels Multiplikation von S und y_i berechnen würden).

Insgesamt erhalten wir folgendes Verfahren:

1. **Eingabe**: Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}, B \in \mathbb{R}^{m\times m}, M \in \mathbb{R}^{n\times m}$ mit $n \geq m$. Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$.
2. Berechne reelle Schurtransformation $B = VTV^\top$, Hessenbergtransformation $A = USU^\top$ sowie $F = U^\top MV$.
3. k:=m
4. Berechne $r_k = f_k - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k,i}p_i$.
5. (a) Fall 1, $t_{k,k-1} = 0$:
   Löse $(t_{k,k}S + \lambda I)\, y_k = r_k$.
   Setze $p_k = \frac{1}{t_{k,k}}\,(r_k - \lambda y_k)$.
   Sowie $k := k - 1$.

   (b) Fall 2, $t_{k,k-1} \neq 0$:
   Berechne $\hat{r}_k = f_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{m} t_{k-1,i}p_i$.
   Löse
   $$\begin{pmatrix} t_{k,k}S + \lambda I & t_{k,k-1}S \\ t_{k-1,k}S & t_{k-1,k-1}S + \lambda I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_k \\ y_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_k \\ \hat{r}_k \end{pmatrix}.$$
   Setze
   $$\begin{aligned} p_{k-1} &= \frac{t_{k-1,k}(r_k - \lambda y_k) - t_{k,k}(\hat{r}_k - \lambda y_{k-1})}{t_{k,k-1}t_{k-1,k} - t_{k,k}t_{k-1,k-1}} \\ p_k &= \frac{1}{t_{k,k}}(r_k - \lambda y_k - t_{k,k-1}p_{k-1}). \end{aligned}$$
   Sowie $k := k - 2$.
6. Falls $k > 0$ gehe zu Schritt 4.
7. **Ausgabe:** $X = UYV^\top$.

2.10.2 Zur Laufzeit

Wir analysieren im folgenden die Laufzeiten der einzelnen Schritte, um am Schluß eine obere Schranke für die benötigten FLOPSzu erhalten.

Die Transformation von A auf Hessenberg-Gestalt benötigt nach Kapitel 2.8 $\frac{14}{3}n^3$ FLOPS, die Schurtransformation von B auf quasi–trianguläre Gestalt hat nach Kapitel 2.8 einen Aufwand von $25m^3$ FLOPS. Die Berechnung von $F = U^\top MV$ benötigt $2(n^2m + nm^2)$

FLOPS.

Die Berechnung von r_k im Schritt 4 schlägt mit $n + 2n(m-k)$ FLOPS zu Buche.

Wir analysieren nun den Schritt 5(a): Das System hat eine Größe von $n \times n$ wobei alle Elemente unterhalb der Subdiagonalen gleich Null sind. Die Transformation dieses Systems auf obere Dreiecksgestalt benötigt $\sum_{k=2}^{n}(2(n-k+2)+2) = n^2 + 3n - 4$ FLOPS, das anschließende Lösen via Rücksubstituion hat einen Aufwand von $n^2 + n - 1$ FLOPS. Die nun folgende Berechnung von p_k benötigt in der angegebenen Form $2n+1$ FLOPS. Würde man p_k via $p_k = Sy_k$ berechnen hätte man hier einen größeren Aufwand von $2n^2$ FLOPS.

Nun folgt die Analyse von Schritt 5(b): Die Berechnung von $\hat{r}_k$ hat einen Aufwand von $n + 2n(m-k)$ FLOPS, das sind maximal $2nm - n$ FLOPS. Nun folgt nach Tauschen von Zeilen und Spalten mittels der Permutation $(1, n+1, 2, n+2, \ldots, 2n)$ das Lösen des $2m \times 2m$–Systems mit maximal drei Subdiagonalen ungleich Null. Man hat einen Aufwand von $\sum_{k=4}^{2n}(2n(2n-k+4)+2)$, um die unterste Subdiagonale ungleich Null zu eliminieren, einen Aufwand von $\sum_{k=3}^{2n}(2n(2n-k+3)+2)$, um die darauf folgende Subdiagonale ungleich Null zu eliminieren und schließlich einen Aufwand von $\sum_{k=2}^{2n}(2n(2n-k+2)+2)$, um das System auf obere Dreiecksgestalt zu bringen. Dann braucht man noch $(2n)^2 + 2n - 1$ FLOPS um das System via Rücksubstitution zu lösen. Das macht einen Gesamtaufwand von $16n^2 + 20n - 33$ FLOPS. Die Berechnungen von p_{k-1} und p_k benötigen schließlich $10n + 6$ FLOPS. Hätte man hier p_k und p_{k-1} mittels $p_k = Sy_k$ berechnet, so hätte man einen höheren Aufwand von $4n^2$ FLOPS.

Der letzte Schritt, nämlich die Transformation von $X = UYV^\top$, schlägt zum Ende noch mit $2(n^2m + nm^2)$ FLOPS zu Buche.

Geht man davon aus, daß tm mal der Fall 5(b) auftritt $(0 \leq t \leq 0.5)$, und $(1-2t)m$ mal Fall 5(a), so erhält man für Schritt 5 einen Gesamtaufwand von $2n^2m + 6nm - 4m + t(2nm^2 + 12n^2m + 17nm - 19m)$ FLOPS, welcher sich nach oben durch $nm^2 + 8n^2m + \frac{29}{2}nm - \frac{27}{2}m$ FLOPS abschätzen lässt.

Nimmt man die Kosten der restlichen Schritte hinzu, so hat man einen maximalen Aufwand von $\frac{14}{3}n^3 + 25m^3 + 6nm^2 + 12n^2m + \frac{29}{2}nm - \frac{27}{2}m$ FLOPS. Hier wird wiederum einsichtig, warum wir im Vorfeld $n \geq m$ verlangt haben. Dieser Aufwand kann nach oben mittels $25(n+m)^3$ FLOPS abgeschätzt werden. Man benötigt also $\mathcal{O}((n+m)^3)$ Operationen zur Lösung der "discrete-time"-Sylvestergleichung.

3 Das Verfahren ST1C

Die Wissenschaft reduziert sich auf drei Punkte: den Beweis der alten Wahrheiten, die Reihenfolge ihrer Darlegung, die Entdeckung neuer Wahrheiten.

Jean-Fran cois Marmontel, französischer Schriftsteller

Nach dem wir im letzten Kapitel die mathematischen Grundlagen zu Behandlung dynamischer inverser Probleme gelegt haben, befassen wir uns nun mit der Herleitung geeigneter Verfahren.

Für den Fall, daß das Vorwärtsmodell zeitunabhängig ist, d.h. $A_i = A_0, 1 \leq i \leq T$, können wir wie im folgenden beschrieben, für den unterbestimmten Fall ein effizientes Verfahren herleiten. Hierbei ist $A_0 \in \mathcal{L}(H, G)$ ein linearer Operator zwischen den Hilberträumen H und G über $\mathbb{K}$. Was im überbestimmten Fall zu tun ist werden wir kurz angeben.

3.1 Die Minimierungsaufgabe

Wir wollen nun zu T Zeitschritten Aufgaben $A\, x_i = y_i, 1 \leq i \leq T$ unter Berücksichtigung der Minimierung der zeitlichen Glattheit in Form von $\sum \|x_{i+1} - x_i\|^2$ lösen. Ausgangspunkt ist daher die Aufgabe

$$\sum_{i=1}^{T} \|A_0 x_i - y_i\|^2 + \sum_{i=1}^{T} \lambda_i^2 \|x_i\| + \mu^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|x_{i+1} - x_i\|^2 \to \min . \tag{3.20}$$

Dies ist eine Erweiterung der Tikhonov-Phillips Minimierungsaufgabe: die erste Summe fordert die Einhaltung der Gleichungen $A_0\, x_i = y_i$, der zweite Summand ist eine "räumliche" Tikhonov-Phillips Regularisierung und der letzte Summand bringt die Zusatzinformation "zeitliche Glattheit" ins Spiel. Wir haben hier die Möglichkeit offen gelassen die λ_i jeweils verschieden zu wählen. Dies macht Sinn, wenn der Anteil des Rauschens in den Daten mit der Zeit schwankt.

Die Aufgabe (3.20) ist äquivalent zu

$$\|Ax - y\|^2 + \|\Lambda x\|^2 + \mu^2 \|Bx\|^2 \to \min . \tag{3.21}$$

Hierbei haben wir die folgenden Bezeichnungen benutzt:

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{diag}(A_0) \in \mathcal{L}(H^T, G^T) \\ x &= (x_1, \ldots, x_T) \in H^T \\ \Lambda &= \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_T) \otimes I_H \in \mathcal{L}(H^T, H^T) \end{aligned}$$

Wobei $H^T = H \oplus \cdots \oplus H$ (T mal), G^T analog.

$$B = \begin{bmatrix} I_H & -I_H & & & \\ & I_H & -I_H & & \\ & & \ddots & & \\ & & & I_H & -I_H \end{bmatrix} = D \otimes I_H$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(T-1)\times T}.$$

Das Funktional $\Psi(x) = \|Ax - y\|^2 + \|\Lambda x\|^2 + \mu\|Bx\|^2$ ist konvex, das heißt man erhält die eindeutige Lösung der Minimierungsaufgabe, indem man $\nabla\Phi(x) = 0$ löst. Dies führt zusammen mit Lemma 2.6.1 zu der Normalengleichung

$$(A^*A + \Lambda^2 + \mu^2 B^*B)\, x = A^*y. \tag{3.22}$$

3.2 Ein effizienteres Verfahren im unterbestimmten Fall

Bei unterbestimmten A_0 ist A^*A sehr groß. Den beim Lösen des dazugehörigen Gleichungssytems entstehende Aufwand können wir analog zu Lemma 2.6.3 wie folgt senken. Wichtig sind dabei die im folgenden Lemma angegebenen zu (2.2) analogen Vertauschungseigenschaften.

Lemma 3.2.1 Es gilt

$$B^*BA^* = A^*\tilde{B}^*\tilde{B}$$

mit $\tilde{B} = D \otimes I_G$. Sowie

$$\Lambda^2 A^* = A^*\tilde{\Lambda}^2$$

mit $\tilde{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_i) \otimes I_G$.

Beweis: Wegen $I_H A_0^* = A_0^* I_G$ gilt unter Ausnutzung der Rechenregeln für das verallgemeinerte Kroneckerprodukt

$$\begin{aligned} B^*BA^* &= ((D^\top D) \otimes I_H)(I_T \otimes A_0^*) \\ &= (D^\top D) \otimes A_0^* \\ &= (I_T \otimes A_0^*)((D^\top D) \otimes I_G) \\ &= A^* \tilde{B}^* \tilde{B}. \end{aligned}$$

Die zweite Aussage beweist man analog. ■

Lemma 3.2.2 Es gilt

$$(A^*A + \Lambda^2 + \mu^2 B^*B)^{-1} A^* = A^*(AA^* + \tilde{\Lambda}^2 + \mu^2 \tilde{B}^* \tilde{B})^{-1}.$$

Beweis: Die Matrizeninversen existieren, da die beteiligten Matrizen strikt positiv definit und somit regulär sind. Daher ist die Aussage des Lemmas äquivalent zu

$$A^*(AA^* + \tilde{\Lambda}^2 + \mu^2 \tilde{B}^* \tilde{B}) = (A^*A + \Lambda^2 + \mu^2 B^*B)A^*.$$

Dies ist wegen Lemma 3.2.1 wahr. ■

Das heißt, wir lösen das System

$$(AA^* + \tilde{\Lambda}^2 + \mu^2 \tilde{B}^* \tilde{B})\, u = y, \tag{3.23}$$

und setzen $x = A^*u$.

Wir wählen nun, je nachdem ob A über- oder unterbestimmt ist, Gleichung (3.22) oder (3.23) und bezeichnen dieses Verfahren mit `ST1C`.

3.3 Effizienzsteigerung im Falle von Operatormatrizen

Handelt es sich bei A_0 um eine Operatormatrix der Größe $n \times m$ (wie schon erwähnt ist dies der Fall, falls A_0 eine Matrix über $\mathbb{K}$ ist), so lassen sich (3.22) und (3.23) aufgrund ihrer Struktur zu "continuous-time" Sylvestergleichungen umformen. Diese lassen sich sehr effizient lösen.

Wir führen nur den unterbestimmten Fall aus. Im unterbestimmten Fall ist die Normalengleichung (3.23) äquivalent zu

$$\left(I_T \otimes (A_0 A_0^*) + \mathrm{diag}(\lambda_i^2) \otimes I_G + \mu^2 (D^\top D) \otimes I_G\right)\, u = y. \tag{3.24}$$

Satz 2.4.3 führt dann zu der "continuous-time" Sylvestergleichung

$$(A_0 A_0^*)U + U\left(\mathrm{diag}(\lambda_i^2) + \mu^2 D^\top D\right) = \mathrm{Mat}_n(y) =: Y. \tag{3.25}$$

Diese läßt sich im Falle von Matrizen über $\mathbb{K}$, wie in Abschnitt 2.9 beschrieben, sehr effizient lösen. Genauer gesagt hat man nun einen Aufwand von $\mathcal{O}((n+T)^3)$ statt $\mathcal{O}(n^3T^3)$ wie in (3.23).

Dieser Unterschied ist sehr drastisch, für $n = T = 16$ beispielsweise ist n^3T^3 192 mal größer als $(n+T)^3$. Das ist wesentlich mehr als der Geschwindigkeitsunterschied zwischen einem handelsüblichen PC und einem sehr teuren Hochleistungsrechner. Geht man von mehr Meßwerten n oder mehr Zeitschritten T aus, so wird diese Unterschied wegen des kubischen Wachstums noch drastischer. Das heißt also, daß man mit Hilfe eines effizienten Verfahrens auf einem langsamen Rechner Probleme lösen kann, die durch ineffiziente Verfahren auf Hochleistungsrechnern nicht behandelbar sind.

4 Das Verfahren ST2

Man muß die Dinge so einfach wie möglich machen.
aber nicht einfacher.
Albert Einstein

Im folgenden werden wir ein effizientes Verfahren für den allgemeinen Fall zeitabhänigiger unterbestimmter Vorwärtsmodelle A_i herleiten. Effizient heißt, daß Gleichungssysteme mit Blöcken der Form $A_i A_j^*$ statt $A_i^* A_j$ zu lösen sind. Leider versagt die in Kapitel 2.10.2 angewandte Technik. Diese beruht auf den in Lemma 3.2.1 bewiesenen Vertauschungseigenschaften. Eine solche Vertauschungseigenschaft läßt sich im Falle beliebiger A_i nicht allgemein beweisen[9]. Wir müssen daher einen anderen Weg beschreiten.

4.1 Die Aufgabenstellung

Zu lösen sind nun die T Gleichungen

$$A_1\, x_1 = y_1, \ldots, A_T\, x_T = y_T \tag{4.26}$$

unter der Zusatzbedingung, daß die zeitliche Entwicklung der x_i "glatt" sein soll. Hierbei ist $A_i \in \mathcal{L}(H, G_i)$ ein linearer Operator zwischen den Hilberträumen H und G_i.

Um die Forderung nach zeitlicher Glattheit der x_i einzubringen, führt man zusätzliche Variablen d_i ein und erhält das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_1\, x_1 &= y_1, \ldots, A_T\, x_T = y_T \\ d_1 &= x_2 - x_1, \ldots, d_{T-1} = x_T - x_{T-1}. \end{aligned} \tag{4.27}$$

Für die d_i fordert man in einem später genauer spezifizierten Sinne:

$$\sum_i \|d_i\|^2 \to \min .$$

[9]das liegt daran, daß die Rechtsmultiplikation mit $A^* = \mathrm{diag}(A_i^*)$ einer spaltenweisen Multiplikation entspricht, die Linksmultiplikation mit A^* aber einer zeilenweisen Multiplikation.

Führt man transformierte Variable

$$\delta_i = \mu d_i$$

ein, und benutzt

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{diag}(A_i) \in \mathcal{L}(H^T, G_1 \oplus \cdots \oplus G_T) \\ x &= (x_1, \ldots, x_T) \in H^T \\ \delta &= (\delta_1, \ldots, \delta_{T-1}) \in H^{T-1} \\ y &= (y_1, \ldots, y_T) \in G_1 \oplus \cdots \oplus G_T \end{aligned}$$

(H^T definiert wie im letzten Kapitel) so ist (4.27) äquivalent zu dem Gleichungssystem

$$M \begin{pmatrix} j \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & \mu^{-1} I \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{4.28}$$

Hierbei gilt $I = I_{T-1} \otimes I_H$ und

$$B = \begin{bmatrix} I_H & -I_H & & & \\ & I_H & -I_H & & \\ & & \ddots & & \\ & & & I_H & -I_H \end{bmatrix} = D \otimes I_H \quad \text{mit} \quad D = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(T-1)\times T}.$$

Das obige Gleichungssystem (4.28) ist unterbestimmt. Eine Möglichkeit, Abhilfe zu schaffen ist nach Korollar 2.5.2 die Forderung

$$\begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} \in N(M)^\perp = R(M^*) \Leftrightarrow \left\| \begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} \right\|_2 \to \min. \tag{4.29}$$

Das heißt, man löst

$$MM^* u = \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{4.30}$$

und setzt

$$\begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} = M^* u.$$

Da man nur x benötigt, reduziert sich dies auf

$$x = \begin{bmatrix} A^* \, B^* \end{bmatrix} u \tag{4.31}$$

Diese Lösung erfüllt also (4.27) und (4.29), d.h. zu jedem Zeitpunkt gilt $A_i \, x_i = y_i$ und die x_i sind mittels

$$\begin{aligned} \left\| \begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} \right\|^2 &= \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|_H^2 + \sum_{i=1}^{T-1} \|\delta_i\|_H^2 \\ &= \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|_H^2 + \mu^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|x_{i+1} - x_i\|_H^2 \to \min \end{aligned} \tag{4.32}$$

gekoppelt. Dies ist die Forderung nach zeitlicher Glattheit.

Letztere Minimierung ist äquivalent zu

$$\lambda^2 \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|_H^2 + \lambda^2 \mu^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|x_{i+1} - x_i\|_H^2 \to \min.$$

Setzt man $\tau = \lambda\mu$, so hat man einen räumlichen Regularisierungsparameter λ und einen zeitlichen Regularisierungsparameter τ. Der Wert von μ ergibt sich anhand dieser Parameter mittels $\mu = \frac{\tau}{\lambda}$.

4.2 Umformung des Gleichungssystems

Als erstes berechnen wir MM^*:

$$MM^* = \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & \mu^{-1} I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^* & B^* \\ 0 & \mu^{-1} I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} AA^* & AB^* \\ BA^* & BB^* + \mu^{-2} I \end{bmatrix} \tag{4.33}$$

Das heißt

$$MM^* \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}$$

ist äquivalent zu

$$\begin{aligned} AA^*\, u + AB^*\, v &= y \\ BA^*\, u + (BB^* + \mu^{-2} I)\, v &= 0 \end{aligned} \tag{4.34}$$

mit $u \in G_1 \times \cdots \times G_T$ und $v \in H^{T-1}$.

Das heißt

$$v = -\left(BB^* + \mu^{-2} I\right)^{-1} BA^*\, u, \tag{4.35}$$

und somit

$$A \left(I - B^* \left(BB^* + \mu^{-2} I\right)^{-1} B \right) A^*\, u = y. \tag{4.36}$$

Der Term $(BB^* + \mu^{-2} I)^{-1}$ kann umgeformt werden zu

$$\begin{aligned} \left(BB^* + \mu^{-2} I\right)^{-1} &= \left((D \otimes I_H)(D^\top \otimes I_H) + (\mu^{-2} I_{T-1} \otimes I_H)\right)^{-1} \\ &= \left((DD^\top + \mu^{-2} I_{T-1}) \otimes I_H\right)^{-1} \\ &= (DD^\top + \mu^{-2} I_{T-1})^{-1} \otimes I_H \\ &= Q \otimes I_H. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} I - B^* \left(BB^* + \mu^{-2} I\right)^{-1} B &= I_T \otimes I_H - (D^\top \otimes I_H)(Q \otimes I_H)(D \otimes I_H) \\ &= (I_T - D^\top Q D) \otimes I_H \\ &= R \otimes I_H \end{aligned} \tag{4.38}$$

mit $Q \in \mathbb{R}^{(T-1)\times(T-1)}$ und $R \in \mathbb{R}^{T\times T}$.

Die Gleichung (4.36) ist daher äquivalent zu

$$A(R \otimes I_H)A^*\, u = y. \tag{4.39}$$

Dabei ist

$$A(R \otimes I_H)A^* = \left[r_{i,j} A_i A_j^*\right]_{i,j} =: C. \tag{4.40}$$

Das heißt man löst

$$C\, u = y. \tag{4.41}$$

Da C schlecht gestellt ist, löst man statt dessen die regularisierte Gleichung

$$(C + \gamma^2 I_{G_1 \oplus \cdots \oplus G_T})\, u = y. \tag{4.42}$$

Wir bezeichen γ als numerischen Regularisierungsparameter.

v erhält man dann gemäß

$$\begin{aligned} v &= -\left(BB^* + \mu^{-2} I\right)^{-1} BA^*\, u \\ &= -(Q \otimes I_H)(D \otimes I_H)A^*\, u \\ &= -(QD \otimes I_H)A^*\, u. \end{aligned} \tag{4.43}$$

x ergibt sich mittels

$$\begin{aligned} x &= A^*\, u + B^*\, v \\ &= A^*\, u + (D^\top \otimes I_H)\, v \\ &= A^*\, u - (D^\top \otimes I_H)(QD \otimes I_H)A^*\, u \\ &= \left[I_T \otimes I_H - (D^\top Q D) \otimes I_H\right] A^*\, u \\ &= \left[(I_T - D^\top Q D) \otimes I_H\right] A^*\, u \\ &= \left[R \otimes I_H\right] A^* u. \end{aligned} \tag{4.44}$$

Das heißt

$$x_i = \sum_j r_{i,j} A_j^* u_j. \tag{4.45}$$

4.3 Das Verfahren ST2

Aufbauend auf den vorhergehenden Ausführungen erhält man das folgende Verfahren ST2:

1. **Eingabe**: Daten y, räumlicher Regularisierungsparameter λ, zeitlicher Regularisierungsparameter τ, numerischer Regularisierungsparamter γ.
2. Ausgehend von D berechnet man Q und R gemäß (4.38) und (4.37):
$$Q = (DD^\top + \frac{\lambda^2}{\tau^2} I_{T-1})^{-1} \in \mathbb{R}^{(T-1)\times(T-1)}$$
$$R = I_T - D^\top Q D \in \mathbb{R}^{T\times T}.$$
3. C ergibt sich gemäß $C = [r_{i,j} A_i A_j^*]_{i,j}$.
4. Man löst das regularisierte Gleichungssystem
$$(C + \gamma^2 I_{G_1 \oplus \cdots \oplus G_T})\, u = y.$$
5. Nach (4.45) ergibt sich x durch
$$x_i = \sum_j r_{i,j} A_j^* u_j.$$
Aus Effizienzgründen bietet es sich an, die $A_j^* u_j$ vorzuberechnen, und dann erst die x_i zu bilden.

4.4 Der Fall eines zeitunabhängigen Vorwärtsmodells

Wir verzichten hier darauf den Spezialfall eines zeitunabhängigen Vorwärtsmodells, d.h. $A_i = A_0\ \forall i$ zu betrachten. Wie wir im nächsten Kapitel sehen werden, führt ein anderer Ansatz zu einem analogen Verfahren ST3. Dort werden wir dann auch ein Verfahren ST3C im Falle eines zeitunabhängigen Operators angeben.

5 Die Verfahren ST3 und ST3C

Zum Entdecken gehört Glück, zum Erfinden Geist,
und beide können beides nicht entbehren.

Johann Wolfgang von Goethe

Wir werden in diesem Kapitel zu einem Verfahren ST3 gelangen, welches sich als Spezialfall des in Kapitel 3.3 vorgestellten Verfahrens ST2 herausstellen wird. Genauer gesagt, wird das Verfahren ST3 von einem Parameter weniger als das Verfahren ST2 abhängen[10]. Da sich dieser Parameter nur schlecht motivieren läßt, ist das folgende Verfahren ST3 dem Verfahren ST2 vorzuziehen. Die Herleitung des Verfahrens ST2 ist aber dahingehend von Interesse, daß ein anderer Ansatz benutzt wurde, um "zeitliche Glattheit" zu modellieren.

Es sei darauf hingewiesen, daß die zum Beweis von Lemma 2.6.3 benutzte Technik im Falle von zeitabhängigen A_i nicht greift, und ein anderer Weg beschritten werden muß, um zu einem effizienten Verfahren zu gelangen.

5.1 Die Minimierungsaufgabe

Wie bereits angegeben haben wir T Meßwerte y_i, T Vorwärtsoperatoren A_i und T Unbekannte $x_i, 1 \leq i \leq T$. Diese sollen $A_i\, x_i = y_i$ erfüllen unter der Nebenbedingung, daß die zeitliche Entwicklung der x_i "glatt" sein soll. Es gilt $A_i \in \mathcal{L}(H, G_i), x_i \in H$ und $y_i \in G_i$. H und G_i sind Hilberträume.

Um ein Verfahren zu gewinnen, beginnen wir mit der Minimierungsaufgabe

$$\Phi(x,d) = \sum_{i=1}^{T} \|A_i x_i - y_i\|^2 + \lambda^2 \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|^2 + \mu^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|d_i\|^2 \to \min \tag{5.46}$$

unter der Nebenbedingung

$$x_{i+1} - x_i = d_i. \tag{5.47}$$

[10] Es handelt sich um den im Abschnitt 4.2 eingeführten numerischen Regularisierungsparameter γ.

Diese fordert ein näherungsweises Einhalten der Beziehung $A_i x_i = y_i$ unter der räumlichen Regularisierungsbedingung $\sum_i \|x_i\|^2 \to \min$ und der zeitlichen Regularisierungsbedingung $\sum_i \|x_{i+1} - x_i\|^2 \to \min$.

Wir können die Nebenbedingung (5.47) mittels eines Strafterms

$$\|x_{i+1} - x_i - d_i\|^2$$

in die Minimierungsaufgabe (5.46) einbringen:

$$\begin{aligned}\Phi_\alpha(x,d) = \sum_{i=1}^{T} \|A_i x_i - y_i\|^2 + \lambda^2 \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|^2 + \mu^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|d_i\|^2 \\ + \alpha^2 \|x_{i+1} - x_i - d_i\|^2 \to \min .\end{aligned} \tag{5.48}$$

Für $\alpha \to \infty$ konvergiert die Lösung x^α von (5.48) gegen die Lösung x von (5.46) und (5.47). Wir formen die Minimierungsaufgabe weiter um, um schließlich zu einer linearen Gleichung zu gelangen, welche uns x liefert.

Wir skalieren $d_i = \frac{\lambda}{\mu}\delta_i$. Damit dies eine gültige Skalierung ist, müssen wir $\lambda, \mu \neq 0$ voraussetzen. Dann gilt

$$\begin{aligned}\Phi_\alpha(x,r) = \sum_{i=1}^{T} \|A_i x_i - y_i\|^2 + \lambda^2 \sum_{i=1}^{T} \|x_i\|^2 + \lambda^2 \sum_{i=1}^{T-1} \|\delta_i\|^2 \\ + \alpha^2 \|x_{i+1} - x_i - \frac{\lambda}{\mu}\delta_i\|^2 \to \min .\end{aligned} \tag{5.49}$$

Wir setzen

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{diag}(A_i) \in \mathcal{L}(H^T, G_1 \oplus \cdots \oplus G_T) \\ x &= (x_1, \ldots, x_T) \in H^T \\ \delta &= (\delta_1, \ldots, \delta_{T-1}) \in H^{T-1} \\ y &= (y_1, \ldots, y_T) \in G_1 \oplus \cdots \oplus G_T, \end{aligned}$$

H^T, B und D wählen wir wie in Abschnitt 4.1.

Nun ist (5.49) äquivalent zu

$$\left\| \underbrace{\begin{bmatrix} A & 0 \\ \alpha B & \alpha\frac{\lambda}{\mu} I \end{bmatrix}}_{M_\alpha} \begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} \right\|^2 + \lambda^2 \left\| \begin{pmatrix} x \\ \delta \end{pmatrix} \right\|^2 \to \min . \tag{5.50}$$

Dies ist eine Tikhonov-Phillips-Regularisierung.

Daher gilt für die Lösung $(x^\alpha, \delta^\alpha)$ von (5.50) nach Lemma 2.6.3:

$$\begin{pmatrix} x^\alpha \\ \delta^\alpha \end{pmatrix} = M_\alpha^* \left(M_\alpha M_\alpha^* + \lambda^2 I \right)^{-1} \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{5.51}$$

Fassen wir zusammen: Die Lösung von (5.46) erhalten wir, indem wir zuerst die Lösung x^α von (5.51) bestimmen. Dann berechnet sich die Lösung x von (5.46) mittels

$$x = \lim_{\alpha\to\infty} x^\alpha.$$

5.2 Berechnung von x^α

Um (5.51) zu berechnen, lösen wir zuerst die Gleichung

$$\left(M_\alpha M_\alpha^* + \lambda^2 I\right)\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{5.52}$$

Es gilt

$$M_\alpha M_\alpha^* + \lambda^2 I = \begin{bmatrix} AA^* & \alpha AB^* \\ \alpha BA^* & \alpha^2(BB^* + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I) \end{bmatrix} + \lambda^2 I. \tag{5.53}$$

Die Gleichung (5.52) liefert dann

$$AA^*\, u + \alpha AB^* \qquad\qquad v + \lambda^2\, u = y \tag{5.54}$$

$$\alpha BA^*\, u + \alpha^2(BB^* + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I)\, v + \lambda^2\, v = 0. \tag{5.55}$$

Aus (5.55) folgt

$$v = -\frac{1}{\alpha}\left(BB^* + \left(\frac{\lambda^2}{\mu^2} + \frac{\lambda^2}{\alpha^2}\right) I\right)^{-1} BA^*\, u. \tag{5.56}$$

In (5.54) eingesetzt liefert dies

$$A\Bigg(I - \underbrace{B^*\left(BB^* + \left(\frac{\lambda^2}{\mu^2} + \frac{\lambda^2}{\alpha^2}\right) I\right)^{-1} B}_{N^\alpha}\Bigg)A^*\, u + \lambda^2\, u = y. \tag{5.57}$$

N^α vereinfacht sich zu

$$\begin{aligned}
N^\alpha &= (D^\top \otimes I_H)\left[(D \otimes I_H)(D^\top I_H) + \left(\frac{\lambda^2}{\mu^2} + \frac{\lambda^2}{\alpha^2}\right)(I_{T-1} \otimes I_H)\right]^{-1}(D \otimes I_H) \\
&= (D^\top \otimes I_H)\Bigg[\underbrace{\left(DD^\top + \left(\frac{\lambda^2}{\mu^2} + \frac{\lambda^2}{\alpha^2}\right) I_{T-1}\right)^{-1}}_{Q^\alpha} \otimes I_H\Bigg](D \otimes I_H) \\
&= (D^\top \otimes I_H)\,[Q^\alpha \otimes I_H]\,(D \otimes I_H) \\
&= (D^\top Q^\alpha D) \otimes I_H.
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Dann ist (5.57) äquivalent zu

$$A\left[I_T \otimes I_H - (D^\top Q^\alpha D) \otimes I_H\right] A^*\, u + \lambda^2\, u = y, \tag{5.59}$$

bzw.

$$A\Big(\big(\underbrace{I_T - D^\top Q^\alpha D}_{R^\alpha}\big) \otimes I_H\Big) A^*\, u + \lambda^2\, u = y. \tag{5.60}$$

Das heißt, wir setzen

$$C^\alpha := A(R^\alpha \otimes I_H)A^* = \left[r^\alpha_{i,j} A_i A_j^*\right]_{i,j}, \tag{5.61}$$

und lösen

$$(C^\alpha + \lambda^2 I_{G_1 \oplus \cdots \oplus G_T})\, u = y. \tag{5.62}$$

v ergibt sich nun wegen (5.56) und analoger Rechnung zu

$$v = -\frac{1}{\alpha}\left[(Q^\alpha D) \otimes I_H\right] A^* u. \tag{5.63}$$

Nun gilt wegen (5.51)

$$\begin{pmatrix} x^\alpha \\ r^\alpha \end{pmatrix} = M_\alpha^* \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \tag{5.64}$$

Also

$$\begin{aligned} x^\alpha &= A^*\, u - B^*\left[(Q^\alpha D) \otimes I_H\right] A^*\, u \\ &= A^*\, u - \left[\big(D^\top Q^\alpha D\big) \otimes I_H\right] A^*\, u \\ &= \left[\big(I_T - D^\top Q^\alpha D\big) \otimes I_H\right] A^* u \\ &= \left[R^\alpha \otimes I_H\right] A^*\, u. \end{aligned} \tag{5.65}$$

5.3 Der Grenzübergang $\alpha \to \infty$

Wir müssen nun den Grenzübergang $\alpha \to \infty$ vollziehen. Das führt zuerst wegen (5.62) zu der Gleichung

$$(C^\infty + \lambda^2 I_{G_1 \oplus \cdots \oplus G_T})\, u = y \tag{5.66}$$

mit

$$C^\infty = \lim_{\alpha\to\infty} C^\alpha = A\,(\lim_{\alpha\to\infty} R^\alpha)A^* = AR^\infty A^*, \tag{5.67}$$

wobei

$$\begin{aligned} R^\infty &= I_T - D^\top Q^\infty D \\ Q^\infty &= \left(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1} \right)^{-1}, \end{aligned} \tag{5.68}$$

und dann wegen (5.65)

$$x = \lim_{\alpha\to\infty} x^\alpha = (R^\infty \otimes I_H) A^* \, u \tag{5.69}$$

gilt. Das heißt

$$x_i = \sum_j r^\infty_{i,j} \, A^*_j u_j. \tag{5.70}$$

5.4 Das Verfahren ST3

Insgesamt erhält man die Lösung der Minimierungsaufgabe (5.46) wie folgt

1. **Eingabe**: Daten y, räumlicher Regularisierungsparameter λ, zeitlicher Regularisierungsparameter μ.
2. Ausgehend von D, λ, μ berechnet man Q^∞ und R^∞ gemäß (5.68)

$$\begin{aligned} Q^\infty &= \left(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1} \right)^{-1} \\ R^\infty &= I_T - D^\top Q^\infty D = (r^\infty_{i,j})_{i,j}. \end{aligned}$$

3. C^∞ ergibt sich gemäß

$$C^\infty = [r^\infty_{i,j} A_i A^*_j]_{i,j}.$$

4. Man löst

$$(C^\infty + \lambda^2 I_{G_1 \oplus \cdots \oplus G_T}) \, u = y.$$

5. $x = (x_1, \ldots, x_T)$ berechnet man mittels

$$x_i = \sum_j r^\infty_{i,j} \, A^*_j u_j.$$

   Aus Effizienzgründen bietet es sich an, die $A^*_j u_j$ vorzuberechnen, und dann erst die x_i zu bilden.

5.5 Die Grenzfälle $\mu \to 0$ und $\mu \to \infty$

Wir betrachten im folgenden die Fälle $\mu \to 0$, d.h. den zeitlich ungekoppelten Fall und $\mu \to \infty$, das ist der statische Fall.

Dazu betrachten wir die Matrix

$$R^\infty(\lambda, \mu) = I_T - D^\top(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1})^{-1} D,$$

und bestimmen im folgenden die Grenzwerte

$$\lim_{\mu \to 0} R^\infty(\lambda, \mu) \qquad \text{und} \qquad \lim_{\mu \to \infty} R^\infty(\lambda, \mu).$$

Wir beginnen mit der Darstellung von $DD^\top$: D hat die Darstellung $(D)_{i,j} = \delta_{i,j} - \delta_{i+1,j}$. Damit ergibt sich für $DD^\top$ die Darstellung

$$\begin{aligned}(DD^\top)_{i,j} &= \sum_k (D)_{i,k}(D)_{j,k} \\ &= \sum_k (\delta_{i,k} - \delta_{i+1,k})(\delta_{j,k} - \delta_{j+1,k}) \\ &= -\delta_{i-1,j} + 2\delta_{i,j} - \delta_{i+1,j}.\end{aligned}$$

Das heißt

$$DD^\top = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ 0 & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(T-1)\times(T-1)}.$$

Nach [Smi70] hat der ν-te Eintrag eines μ-ten Eigenvektors dieser Matrix den Wert $\sin\left(\frac{\nu\mu\pi}{T}\right)$, woraus folgt, daß die normierten Eigenvektoren die Form

$$(u_\mu)_\nu = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin\left(\frac{\nu\mu\pi}{T}\right)$$

haben. Die zugehörigen Eigenwerte erfüllen

$$\lambda_\mu = 4\sin^2\left(\frac{\mu\pi}{2T}\right).$$

Da $1 \le \mu \le T-1$, sind alle Eigenwerte positiv, woraus folgt, daß $DD^\top$ regulär ist.

Aus dieser Beobachtung folgt, daß

$$\lim_{\mu \to \infty} R^\infty(\lambda, \mu) = I_T - D^\top(DD^\top)^{-1} D =: M.$$

Wir benötigen für die weiteren Rechnungen das folgende Lemma:

Lemma 5.5.1 Aus $XD^\top = 0$ und $DX = 0$ folgt, daß X eine Matrix mit konstanten Einträgen ist.

Beweis: $XD^\top = 0$ hat zur Folge, daß $x_{i,j} - x_{i,j+1} = 0$ ist. Das heißt X ist längs Zeilen konstant. Analog folgt aus $DX = 0$, daß X längs Spalten konstant ist. Insgesamt folgt, daß X eine Matrix mit konstanten Einträgen ist. ∎

Die Matrix M hat nun die Eigenschaft

$$MD^\top = D^\top - D^\top(DD^\top)^{-1}DD^\top = D^\top - D^\top = 0,$$

sowie

$$DM = D - DD^\top(DD^\top)^{-1}D = D - D = 0.$$

Aus dem Lemma folgt nun die Behauptung, daß M eine Matrix mit konstanten Einträgen ist. Um diesen konstanten Wert zu bestimmen, berechnen wir im folgenden $(M)_{1,1}$:

Aus der Definition von D folgt $(D^\top XD)_{1,1} = x_{1,1} - x_{1,2} - x_{2,1} + x_{2,2}$. Setzen wir nun $X = (DD^\top)^{-1}$, so hat X die Darstellung

$$X = \sum_{\mu=1}^{T-1} \lambda_\mu^{-1} u_\mu u_\mu^\top$$

Insgesamt folgt

$$(D^\top XD)_{1,1} = \frac{1}{2T} \sum_{\mu=1}^{T-1} \left(\frac{\sin\left(\frac{\mu\pi}{T}\right)\sin\left(\frac{\mu\pi}{T}\right)}{\sin^2\left(\frac{\mu\pi}{2T}\right)} - 2\frac{\sin\left(\frac{\mu\pi}{T}\right)\sin\left(\frac{2\mu\pi}{T}\right)}{\sin^2\left(\frac{\mu\pi}{2T}\right)} + \frac{\sin\left(\frac{2\mu\pi}{T}\right)\sin\left(\frac{2\mu\pi}{T}\right)}{\sin^2\left(\frac{\mu\pi}{2T}\right)} \right).$$

Setzt man nun $a_\mu := \frac{\mu\pi i}{2T}$, so folgt:

$$(D^\top XD)_{1,1} = \frac{1}{2T} \sum_{\mu=1}^{T-1} \left(\frac{\left(e^{2a_\mu} - e^{-2a_\mu}\right)^2}{\left(e^{a_\mu} - e^{-a_\mu}\right)^2} - 2\frac{\left(e^{2a_\mu} - e^{-2a_\mu}\right)\left(e^{4a_\mu} - e^{-4a_\mu}\right)}{\left(e^{a_\mu} - e^{-a_\mu}\right)^2} + \frac{\left(e^{4a_\mu} - e^{-4a_\mu}\right)^2}{\left(e^{a_\mu} - e^{-a_\mu}\right)^2} \right).$$

Sukzessives Anwenden von $x^2 - y^2 = (x+y)(x-y)$ und Zusammenfassen der einzelnen

Terme liefert nach einiger Rechnung

$$
\begin{aligned}
(D^\top X D)_{1,1} &= \frac{1}{2T}\sum_{\mu=1}^{T-1}\left(e^{6a_\mu} + 2 + e^{-6a_\mu}\right) \\
&= \frac{T-1}{T} + \frac{1}{2T}\sum_{\mu=1}^{T-1}\left(e^{\frac{3\mu\pi i}{T}} + e^{-\frac{3\mu\pi i}{T}}\right) \\
&= \frac{T-1}{T} + \frac{1}{2T}\sum_{\mu=1}^{T-1} e^{\frac{3\mu\pi i}{T}} + \frac{1}{2T}\sum_{\mu=1}^{T-1} e^{-\frac{3(T-\mu)\pi i}{T}} \\
&= \frac{T-1}{T} + \frac{1}{2T}\sum_{\mu=1}^{T-1} e^{\frac{3\mu\pi i}{T}} + \frac{1}{2T}e^{-3\pi i}\sum_{\mu=1}^{T-1} e^{\frac{3\mu\pi i}{T}} \\
&= \frac{T-1}{T}.
\end{aligned}
$$

Das ergibt

$$(M)_{1,1} = 1 - (D^\top X D)_{1,1} = 1 - \frac{T-1}{T} = \frac{1}{T}.$$

Insgesamt erhalten wir den folgenden

Satz 5.5.2 Es gilt

$$\lim_{\mu\to 0} R^\infty(\lambda,\mu) = (\delta_{i,j})_{i,j}$$

und

$$\lim_{\mu\to\infty} R^\infty(\lambda,\mu) = \left(\frac{1}{T}\right)_{i,j}.$$

Beweis: Den Fall $\mu \to \infty$ haben wir in der obigen Rechnung bereits bewiesen. Für den Fall $\mu \to 0$ betrachten wir

$$\left(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1}\right)^{-1} = \mu^2(\mu^2 DD^\top + \lambda^2 I_{T-1})^{-1} \to 0 \quad \text{bei} \quad \mu \to 0$$

∎

Setzen wir nun das erste Ergebnis ($\mu \to 0$, d.h. keine zeitliche Kopplung) in unser Verfahren ST3 ein, so sehen wir, daß C eine Diagonalmatrix mit Einträgen $A_i A_i^*$ ist, und sich der letzte Schritt als $x_i = A_i^* u_i$ schreibt. Insgesamt erhalten wir:

Satz 5.5.3 Im zeitlich ungekoppelten Fall $\mu = 0$ liefert das Verfahren ST3 zu jedem Zeitschritt eine Tikhonov-Phillips-Lösung des Problems $A_i\, x_i = m_i$.

Daraus folgt das

Korollar 5.5.4 Die mittels des Verfahrens ST3 induzierte Abbildung $T_{\lambda,\gamma} : m \mapsto x$ ist eine Regularisierung des Problems $A_i\, x_i = m_i \quad \forall\, i$

Beweis: Da die Regularisierungsparameter λ und μ als Faktoren vor Summanden in der zu ST3 gehörenden Minimierungsaufgabe auftauchen, kann man den Grenzprozeß $(\lambda, \mu) \to (0, 0)$ in die Teilprozesse $\mu \to 0$ gefolgt von $\lambda \to 0$ zerlegen. Wie wir gesehen haben, führt $\mu \to 0$ zu einem Tikhonov-Phillips-Verfahren. Da dieses wiederum als Regularisierung bekannt ist [Lou89], ist das Korollar bewiesen. ∎

Wir analysieren nun die Auswirkung des zweiten Ergebnisses ($\mu \to \infty$, d.h.¸wir haben ein statisches Verfahren) auf das Verfahren ST3.

Im Verfahren ST3 hat man im statischen Grenzfall das Gleichungssystem

$$\left(\left[\frac{1}{T} A_i A_j^* \right] + \lambda^2 I \right) u = m$$

zu lösen. Setzen wir $v = \frac{1}{T} u$, so ist dies äquivalent zu

$$\left(\left[A_i A_j^* \right] + \lambda^2 T I \right) v = m.$$

Der letzte Schritt von ST3 schreibt sich dann als

$$x_i = \sum_j \frac{1}{T} A_j^* u_j = \sum_j A_j^* v_j.$$

Setzen wir nun

$$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_T \end{bmatrix},$$

so haben wir im statischen Grenzfall des Verfahrens ST3 das System

$$(A A^* + \lambda^2 T\, I)\, v = m \tag{5.71}$$

zu lösen, und erhalten die x_i als

$$x_i = A^* v.$$

Dies ist allerdings nichts anderes als die Tikhonov-Phillips-Lösung des Problems

$$A\, x = m$$

mit Regularisierungsparameter $\lambda^2 T$. Berücksichtigt man, daß $A\, x = m$ äquivalent ist zu

$$A_i\, x = m_i \quad \forall\, i, \tag{5.72}$$

so erhalten wir als Gesamtergebnis:

Satz 5.5.5 Bei $\mu \to \infty$ geht das Verfahren ST3 in ein Tikhonov-Phillips-Verfahren zur Lösung des statischen Problems $A_i\, x = m_i$ über.

Das Auftauchen des Faktors T im Regularisierungsparameter $\lambda^2 T$ in (5.71) läßt sich dadurch erklären, daß beim Ansatz des Verfahrens ST3 der Regularisierungsterm $\sum_i \|x_i\|^2$ auftaucht, welcher im statischen Grenzfall ($x := x_1 = \ldots = x_T$) gleichwertig ist zu $T\|x\|^2$. Bei der Tikhonov-Regularisierung der Aufgabe (5.72) tritt hingegen nur der Regularisierungsterm $\|x\|^2$ auf.

5.6 Das Verfahren ST3C

Handelt es sich bei den A_i um ein und denselben Operator A_0, das heißt das Vorwärtsmodell ist zeitunabhängig, so hat C^∞ die folgende spezielle Struktur:

$$C^\infty = [r^\infty_{i,j} A_0 A_0^*] = R^\infty \otimes (A_0 A_0^*)$$

Ist weiterhin A_0 selbst eine Operatormatrix der Größe $n \times m$, so können wir nun das Verfahren ST3C gemäß Satz 2.4.3 wie folgt formulieren:

1. **Eingabe**: Daten y, räumlicher Regularisierungsparameter λ, zeitlicher Regularisierungsparameter μ.

2. Ausgehend von D, λ, μ berechnet man Q^∞ und R^∞ gemäß

$$Q^\infty = \left(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1} \right)^{-1}$$
$$R^\infty = I_T - D^\top Q^\infty D = (r^\infty_{i,j})_{i,j}.$$

3. Man löse

$$(A_0 A_0^*) U R^\infty + \lambda^2 U = \mathrm{Mat}_n(y) =: Y.$$

4. Bezeichne u_j die j-te Spalte von U, dann erhält man x gemäß

$$x_i = \sum_j r^\infty_{i,j}\, A_0^* u_j.$$

   Effizienter ist die Berechnung der x_i als Spalten der Matrix

$$X = A_0^* U R^\infty$$

Wir betrachten nun den Fall, daß es sich bei A_0 um eine Matrix über $\mathbb{K}$ handelt. Dann liefert das angegebene Verfahren einen direkt umsetzbaren Algorithmus. Vergleicht man diesen nun mit dem äquivalenten Verfahren ST1C, so sind beide gleich effizient. Ihre Laufzeit ist jeweils von der Ordnung $\mathcal{O}((n+T)^3)$, die Koeffizienten der Terme der Ordnung drei stimmen überein, lediglich bei linearen Termen gibt es geringfügige Unterschiede.

5.7 Zur Effizienz

Wir wollen nun für den Fall von Vorwärtsoperatoren A_i in Form von $n \times N$-Matrizen und T Zeitschritten den Aufwand in FLOPS schätzen. Wir tragen kurz die Fakten zusammen: Das Lösen eines $m \times m$-Systems mittels Gauß-Elimination hat nach [GvL96] einen Aufwand von $2/3m^3$ FLOPS. Der Aufwand der beiden in 2.9 und 2.10 vorgestellten Sylvesterlöser kann jeweils nach oben mittels $25(n+T)^3$ FLOPS abgeschätzt werden. Der Schritt fünf im Verfahren ST3 kann zerlegt werden in die Berechnung der $A_j^* u_j$ und anschließende Summierung. Der Aufwand hierfür beträgt dann $2TnN + 2T^2N = 2TN(n+T)$.

Wir betrachten nun die folgenden drei Verfahren: zum ersten den naiven Zugang über die Normalengleichung (3.22), zum anderen die Verfahren ST3 und ST3C.

Gehen wir von $n = 64$ Meßwerten, $N = 5000$ Unbekannten in jedem Zeitschritt und $T = 100$ Zeitschritten aus, so erhalten wir die in folgende Tabelle dargestellten Kosten. Diese Wahl von n, N und T ist für der in Kapitel 8 vorgestellte stCDR typisch.

	Normalengleichung	ST3	ST3C
FLOPS	$2/3(NT)^3$	$2/3(nT)^3 + 2TN(n+T)$	$25(n+T)^3 + 2TN(n+T)$
	$n = 64, N = 5000, T = 100$		
FLOPS	$8.3 \cdot 10^{16}$	$1.7 \cdot 10^{11}$	$2.7 \cdot 10^{8}$

Wie man sieht, ist der Effizienzunterschied sehr groß. Man kann mit Hilfe des Verfahrens ST3 auf einem (eventuell veralteten) PC schneller zum Ziel kommen als mit der Normalengleichung auf einem aktuellen Hochleistungsrechner.

6 Dynamische Computertomographie

Es ist nicht genug zu wissen, man muß es auch anwenden;
es ist nicht genug zu wollen, man muß es auch tun.

Johann Wolfgang von Goethe

In dem folgenden Kapitel werden wir das Problem der dynamischen Röntgen-Computertomographie (dynCT) betrachten. Es handelt sich hierbei um ein lineares Problem, auf das sich die in den vorhergehenden Kapitel beschriebenen Verfahren anwenden lassen. Im Gegensatz zu den in den folgenden Kapiteln behandelten Beispielanwendungen, liegt hier ein kontinuierlich formuliertes Vorwärtsmodell zugrunde.

Es sei darauf hingewiesen, daß Verfahren zur dynCT kaum erforscht sind, es gibt aber Arbeiten, welche versuchen Dynamiken, wie sie entstehen wenn ein Patient sich während der CT bewegt, "herauszurechnen" um dann ein *statisches* Bild zu erhalten. Siehe zum Beispiel die Arbeit [WV93].

6.1 Allgemeines zur Computertomographie

Ursprünglich in den frühen Siebzigern in der diagnostischen Radiologie eingeführt, findet die CT heute in vielen Gebieten Anwendung wie z. B. beim zerstörungsfreien Prüfen.

Die Bücher [Lou89], [Nat86] und [Her80] bieten einen guten Überblick über das Gebiet der CT. Hier werden neben mathematischen Fragestellungen auch konkrete Algorithmen besprochen. Wer mehr über den medizinischen Hintergrund erfahren will, sei auf [GGCM77] und [KS82] verwiesen.

Wir gehen nun auf den Meßvorgang bei der CT ein: Bei der Röntgen-Computertomographie (CT) mißt man die Abminderung von Röntgenstrahlen beim Durchdringen eines Objektes, um die Dichteverteilung im Innern des Objektes zu rekonstruieren. Diese Dichteverteilung liefert Aussagen über die Zusammensetzung des Objektes in seinem Inneren. Um genaue Aussagen über das Innere eines Objektes machen zu können, ist es notwendig, das Objekt aus vielen Richtungen mit Röntgenstrahlen zu durchdringen. Pro Richtung wiederum werden parallele Strahlen durch das Objekt geschickt. In diesem Fall spricht man von der *parallelen Geometrie*. Siehe hierzu Abbildung 6.1.

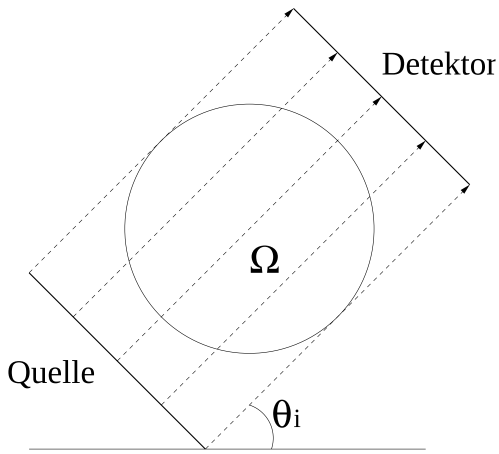

Abb. 6.1: Meßvorgang der Röngten-Computertomographie

6.2 Das mathematische Modell der CT

Um die CT mathematisch formulieren zu können, müssen wir die Strahlen parametrisieren. Dies geschieht durch einen Normalenvektor $\omega \in S^1$ und eine Abstandsangabe $s \in \mathbb{R}$. Durch diese beiden Größen wird eine Gerade in $\mathbb{R}^2$ wie folgt beschrieben

$$L(s, \omega) = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid s - x \cdot \omega = 0\}.$$

Für die CT gilt dann das folgende mathematische Modell

$$\int_{L(s,\omega)} f(x)\, dx = -\log \frac{I(s,\omega)}{I_0} =: g(s,\omega). \tag{6.73}$$

$I(s,\omega)$ sind hierbei die in der Position (s,ω) gemessene Intensität des Röntgenstrahls, I_0 ist die Intensität der Röntgenquelle. g bezeichnet man im Vergleich zu I als modifizierte Daten. f beschreibt die Dichteverteilung des Objektes Ω. Siehe hierzu Abbildung 6.2.

Eine Herleitung der Formel (6.73) findet man in [Lou89].

Wenn man $\omega^\perp$ als den um $\pi/2$ im Uhrzeigersinn gedrehten Richtungsvektor ω bezeichnet, so läßt sich $L(s,\omega)$ auch wie folgt beschreiben

$$L(s, \omega) = \{s\omega + t\omega^\perp \mid t \in \mathbb{R}\}.$$

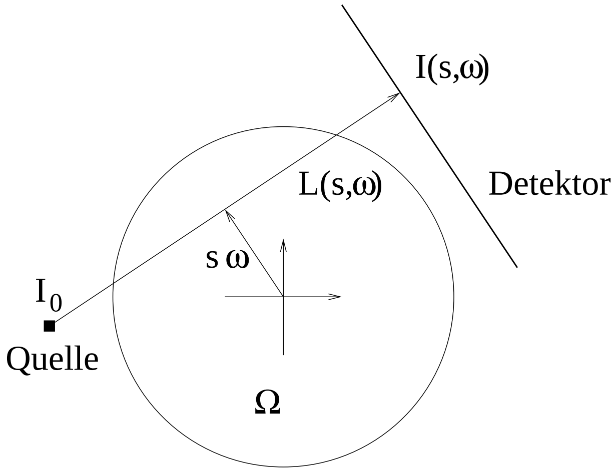

Abb. 6.2: Geometrie der Röntgen-Computertomographie

Gehen wir weiter davon aus, daß es sich bei Ω um

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid \|x\|_2 \leq 1\}$$

handelt, so hat man folgendes Vorwärtsmodell:

$$f \in L^2(\Omega) \mapsto (\mathcal{R}f)(s,\omega) = \int_{\mathbb{R}} f(s\omega + t\omega^{\perp})\, dt. \tag{6.74}$$

Die Abbildung

$$\mathcal{R} : L^2(\Omega) \to L^2([-1,1] \times S^1) \tag{6.75}$$

bezeichnet man als **2D-Radontransformation**.

Geht man von einem statischen Objekt aus, so besteht die Aufgabe der CT darin, den Operator $\mathcal{R}$ zu invertieren. Hierbei handelt es sich um ein schlecht gestelltes Problem.

6.3 Das mathematische Modell der dynCT

Bei der dynamischen CT geht man nun davon aus, daß sich der Meßvorgang durch Variation der Richtung ω über einen gewissen Zeitraum erstreckt, und daß sich das zu untersuchende Objekt während dieses Zeitraums ändern darf. Wir gehen weiterhin davon aus, daß der jeweilige Meßvorgang zu einer fixen Richtung ω keine Zeit braucht.

Die zu den t_i gehörenden Winkel θ_i seien gleichverteilt, d.h. $\theta_i = 2\pi\frac{i-1}{T}, 1 \leq i \leq T$. Für die Normalenvektoren ω_i gilt dann

$$\omega_i = (-\sin\theta_i, \cos\theta_i)^\top.$$

Dadurch erhält man zu den Zeitschritten t_i mit zugehörigen Winkeln θ_i die Vorwärtsoperatoren

$$(\mathcal{R}_i f)(s) = (\mathcal{R}_{\theta_i})(s) := (\mathcal{R}f)(s, \theta_i). \tag{6.76}$$

Das heißt

$$\mathcal{R}_i : L^2(\Omega) \to L^2([-1,1]). \tag{6.77}$$

Analog zu den in Kapitel 1.1 eingeführten Bezeichnungen besteht das Problem der dynamischen CT nun darin, zu den Meßwerten g_i Dichteverteilungen f_i zu finden, so daß

$$\mathcal{R}_i f_i = g_i \qquad 1 \le i \le T.$$

6.4 Anwendung des Verfahrens ST3 auf dynCT

Wir gehen im folgenden darauf ein, wie man das Verfahren ST3 dazu nutzen kann, das Problem der dynamischen CT zu lösen, indem man zeitliche Glattheit als a-priori Information berücksichtigt. Wir machen den Ansatz

$$(f_1, \ldots, f_T) = \text{minarg}\{\sum_i \|R_i f_i - g_i\|^2 + \lambda^2 \sum_i \|f_i\|^2 + \mu^2 \sum_i \|f_{i+1} - f_i\|^2\}.$$

Diese kann man nun mit Hilfe des Verfahrens ST3 effizient wie folgt lösen: Als erstes müssen wir klären, wie die adjungierten Operatoren $\mathcal{R}_i^*$ definiert sind. Es gilt der folgende

Satz 6.4.1 Der zu $\mathcal{R}_i$ adjungierte Operator $\mathcal{R}_i^*$ ist

$$\mathcal{R}_i^* : L^2([-1,1]) \to L^2(\Omega)$$

gemäß

$$(\mathcal{R}_i^* g)(x) = g(x \cdot \omega_i).$$

Beweis: $\mathcal{R}_i$ läßt sich auch schreiben als

$$(\mathcal{R}_i f)(s) = \int_\Omega f(x)\delta(s - x \cdot \omega_i)\, dx.$$

Das heißt

$$\begin{aligned}
\langle R_i f, g\rangle_{L^2[-1,1]} &= \int_{-1}^{1} g(s) \int_\Omega f(x)\delta(s - x\cdot\omega_i)\, dx\, ds \\
&= \int_\Omega f(x) \int_{-1}^{1} g(s)\delta(s - x\cdot\omega_i)\, ds\, dx \\
&= \int_\Omega f(x) g(x\cdot\omega_i)\, dx \\
&= \langle f, R_i^* g\rangle_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

■

Anschaulich betrachtet, setzt R_i^* das 1-D "Bild" g auf dem Detektor zu einem 2-D "Bild" im Objekt fort, und zwar so, daß diese Fortsetzung längs Geraden $L(\cdot, \omega_i)$ konstant ist.

Wenn wir das Verfahren ST3 anwenden wollen, so müssen wir zuerst abhängig von λ und μ die Wichtungsmatrix $R^\infty = (r_{i,j}^\infty)$ vorberechnen und dann den Operator $C = [r_{i,j}^\infty \mathcal{R}_i \mathcal{R}_j^*]$ bilden. Das nächste Lemma macht nun eine Aussage über die Operatoren $\mathcal{R}_i \mathcal{R}_j^*$:

Lemma 6.4.2 Es gilt

$$\mathcal{R}_i \mathcal{R}_j^* = \mathcal{R}_{(i-j) \bmod T} \mathcal{R}_0^*.$$

Beweis: Wir betrachten die mittels

$$\Phi_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

erzeugte Transformation $x \mapsto \Phi_\theta x$. Diese Transformation dreht einen Vektor x um den Winkel θ gegen den Uhrzeigersinn.

Offensichtlich gilt

$$\det \Phi_\theta = 1.$$

Außerdem gilt

$$\Phi_{\theta_j} x \cdot \omega_i = x \cdot \omega_{(i-j) \bmod T}.$$

Denn ist $x = (x_1, x_2)^\top$, so gilt

$$\begin{aligned}
\Phi_{\theta_j} x \cdot \omega_i &= (x_1 \cos\theta_j - x_2 \sin\theta_j, x_1 \sin\theta_j + x_2 \cos\theta_j)^\top \cdot \omega_i \\
&= -x_1 \cos\theta_j \sin\theta_i + x_2 \sin\theta_j \sin\theta_i + x_1 \sin\theta_j \cos\theta_i + x_2 \cos\theta_j \cos\theta_i \\
&= -x_1 \sin(\theta_i - \theta_j) + x_2 \cos(\theta_i - \theta_j) \\
&= -x_1 \sin((\theta_i - \theta_j) \bmod 2\pi) + x_2 \cos((\theta_i - \theta_j) \bmod 2\pi) x_2 \\
&= x \cdot \omega_{(i-j) \bmod T}.
\end{aligned}$$

Nun können wir die Aussage des Lemmas beweisen:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_i \mathcal{R}_j^* g(s) &= \int_\Omega g(x \cdot \omega_j) \delta(s - x \cdot \omega_i)\, dx \\
&= \int_{\Phi_{\theta_j}(\Omega)} g(x \cdot \omega_j) \delta(s - x \cdot \omega_i)\, dx \\
&= \int_\Omega g(\Phi_{\theta_j} u \cdot \omega_j) \delta(s - \Phi_{\theta_j} u \cdot \omega_i)\, du \\
&= \int_\Omega g(u \cdot \omega_0) \delta(s - u \cdot \omega_{(i-j) \bmod T})\, du \\
&= \mathcal{R}_{(i-j) \bmod T} \mathcal{R}_0^* g(s)
\end{aligned}$$

■

Anmerkung: Man kann das Vorwärtsmodell auch in Form sogenannter Streifenintegrale behandeln. Die damit verbundenen Operatoren haben dann automatisch ein endlichdimensionales Bild. In diesem Fall gilt ein Analogon zum vorhergehenden Lemma. Einen Beweis dieses Analogons, genaueres zu dieser Art des Vorwärtsmodells sowie die Theorie der damit zusammenhängenden, sogenannten direkt algebraischen Methoden findet man in [Nat86].

Um das Verfahren ST3 in einen Algorithmus umsetzen zu können, werden wir nun die Einträge

$$C_i := \mathcal{R}_i \mathcal{R}_0^* : L^2([-1,1]) \to L^2([-1,1])$$

des Operators

$$[C] = [r_{i,j}^\infty C_{(i-j) \bmod T}]$$

mittels eines Projektionsverfahrens diskretisieren, um dann Blöcke $\tilde{C}_i$ zu erhalten, welche wir mittels Lemma 2.7.1 blockweise zu einem großen Gleichungssystem zusammenfassen. Zu dieser Diskretisierung unterteilen den Detektor $[-1,1]$ mittels Punkten

$$s_i = \frac{2i-1-N}{N-1}$$

in N gleichgroße Intervalle $[s_i, s_{i+1}]$, so daß $s_1 = -1$ und $s_N = 1$.

Wir setzen nun in Kapitel 2.7 $G_j = H_j = L^2([-1,1])$ und benutzen im Urbild stückweise lineare Ansatzfunktionen ϕ_l mit $\phi_l(s_k) = \delta_{l,k}$. Im Bild benutzen wir Punktkollakation, das heißt $\psi_k = \delta_{s_k}$.

Für die Einträge der Matrix $\tilde{C}_i$ ergibt sich dann

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \psi_k C_i \phi_l = (\mathcal{R}_i \mathcal{R}_0^* \phi_l)(s_k).$$

Das heißt, man setzt die Funktion ϕ_l in das Objekt Ω fort und bildet das Linienintegral über dieser Fortsetzung längs $L(s_k, \omega_i)$. Siehe dazu Abbildung 6.3.

Anmerkung: Hätten wir im Bildbereich statt den Punktkollakationen Funktionale in Form so genannter Streifenintegrale, das heißt

$$\psi_l(f) = \int_{s_{l-1/2}}^{s_{l+1/2}} f(x)\, dx$$

gewählt, so erhielten wir ein so genanntes direkt-algebraisches Verfahren, wie in [Nat86] vorgestellt. In diesem Falle wird die Berechnung der Matrix $\tilde{C}$ durch viele Fallunterscheidungen ungleich schwerer.

Um dieses Linienintegral längs $L(s_k, \omega_i)$ berechnen zu können, muß man die in Abbildung 6.3 skizzierten Schnittpunkte

$$p_1 = L(s_{l-1}, \omega_0) \cap L(s_k, \omega_i) \quad p_2 = L(s_l, \omega_0) \cap L(s_k, \omega_i) \quad p_3 = L(s_{l+1}, \omega_0) \cap L(s_k, \omega_i)$$

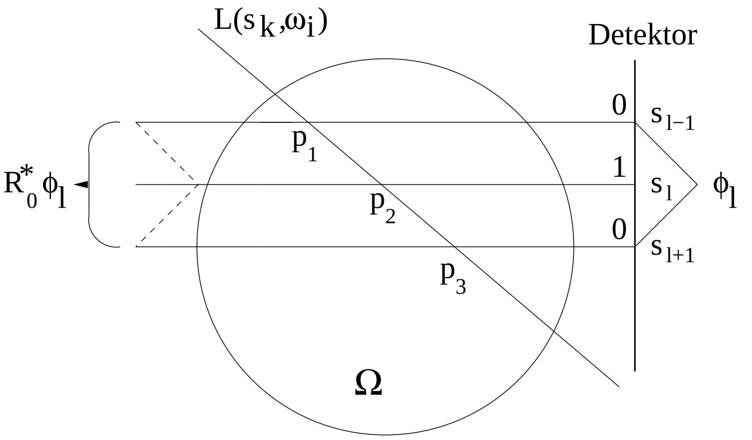

Abb. 6.3: Skizze zur Berechnung der Einträge von $\tilde{C}_i$

berechnen und lineare Funktionen α_1, α_2 bestimmen mit

$$\alpha_1(p_1) = 0 \qquad \alpha_1(p_2) = 1 \qquad \alpha_2(p_2) = 1 \qquad \alpha_2(p_3) = 0.$$

Der Matrixeintrag $(\tilde{C}_i)_{k,l} = (\mathcal{R}_i \mathcal{R}_0^* \phi_l)(s_k)$ berechnet sich dann als

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \int_{p_1}^{p_2} \alpha_1(x)\, dx + \int_{p_2}^{p_3} \alpha_2(x)\, dx.$$

Wir müssen noch die folgenden Sonderfälle berücksichtigen:

Fall 1, $i = 0$: Es ergeben sich keine Schnittpunkte, da die zu schneidenden Geraden parallel verlaufen und somit entweder gar keinen Schnittpunkt haben oder identisch sind. In diesem Spezialfall gilt

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = 2\delta_{k,l}\sqrt{1 - s_l^2}.$$

Fall 2, $i = \frac{T}{2} \in \mathbb{N}$: Wegen der Orientierung des Detektors ergeben sich die Einträge von $\tilde{C}_i$ analog zu

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = 2\delta_{N+1-k,l}\sqrt{1 - s_l^2}.$$

Fall 3, $p_1 \notin \Omega$:

Dann bestimmt man zusätzlich den Schnittpunkt $q = L(s_k, \omega_i) \cap \partial\Omega$, so daß dieser zwischen p_1 und p_2 liegt. Siehe Abbildung 6.4. Man bestimmt nun α_1 und α_2 wie oben angegeben. $(\tilde{C}_i)_{k,l}$ ergibt sich zu

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \int_{q}^{p_2} \alpha_1(x)\, dx + \int_{p_2}^{p_3} \alpha_2(x)\, dx.$$

Fall 4, $p_3 \notin \Omega$: Der Schnittpunkt p_2 liegt außerhalb des Gebietes Ω.

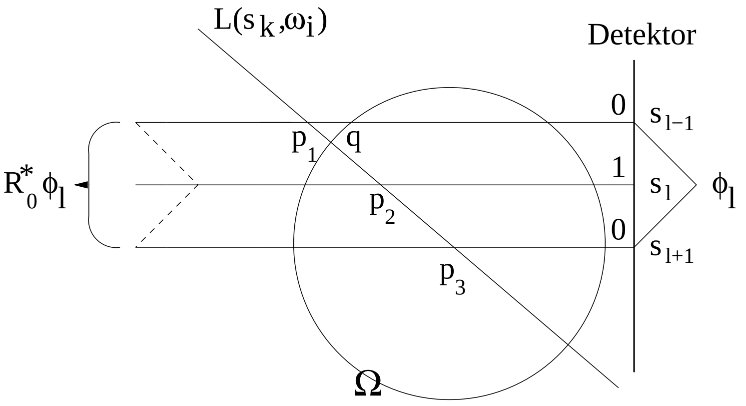

Abb. 6.4: Skizze zur Berechnung der Punkte p_i und q.

Analog zum vorherigen Punkt bestimmt man $q = L(s_k, \omega_i) \cap \partial\Omega$, so daß dieser Punkt zwischen p_2 und p_3 liegt. Man hat nun

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \int_{p_1}^{p_2} \alpha_1(x)\,dx + \int_{p_2}^{q} \alpha_2(x)\,dx.$$

Fall 5, $l = 1$: Hier müssen nur p_2 und p_3 gebildet werden. Auch die Berechnung von α_1 entfällt. Es ergibt sich

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \int_{p_2}^{p_3} \alpha_2(x)\,dx.$$

Hier muß man einen Unterfall betrachten, nämlich den, daß $p_3 \notin \Omega$. Dann muß man wie oben einen Punkt q als Schnittpunkt von $L(s_k, \omega_i)$ und $\partial\Omega$ bestimmen, so daß q zwischen p_2 und p_3 liegt. Schließlich muß man die Integrationsgrenze p_3 im obigen Integral durch q ersetzen.

Fall 6, $l = N$: Analog zum vorherigen Fall hat man nur p_1, p_2 und α_1 zu bestimmen. Man berechnet

$$(\tilde{C}_i)_{k,l} = \int_{p_1}^{p_2} \alpha_1(x)\,dx.$$

Auch hier muß man einen Unterfall betrachten, nämlich den, daß $p_1 \notin \Omega$. Dann muß man wiederum einen Punkt q bestimmen und die Integrationsgrenze p_1 durch q ersetzen.

Damit ist die Berechnung der $\tilde{C}_i$ vollständig beschrieben. Man muß diese Blöcke nun zu einer großen Matrix

$$\tilde{C} = (r_{i,j}^{\infty} \tilde{C}_{(i-j) \bmod T})$$

zusammensetzen und gemäß ST3 das System

$$(\tilde{C} + \lambda^2 I_{NT})u = g$$

für $u = (u_1, \ldots, u_T)$ und $g = (g_1, \ldots, g_T)$ lösen. Der diskreten Lösung u_i entspricht gemäß des verwendeten Projektionsverfahrens eine Funktion $\tilde{u}_i = \sum_k (u_i)_k \phi_k$.

Um das Verfahren ST3 zu Ende zu bringen, muß man noch die Formel

$$x_i = \sum_j r_{i,j}^{\infty} \mathcal{R}_j^* \tilde{u}_j \qquad 1 \leq i \leq T$$

diskretisieren.

Unterteilt man nun $[-1, 1]$ mittels $z_i = \frac{2i-n-1}{n-1}$ äquidistant in n Punkte, so daß $z_1 = -1$ und $z_n = +1$ gilt, so erhält man eine Diskretisierung von $[-1, 1]^2 \supset \Omega$ mittels

$$G_n = \{(z_i, z_j) \,|\, 1 \leq i, j \leq n\}.$$

Um x_i zu bestimmen, berechnen wir x_i nur in Punkten $p \in G_n$. Es gilt dann für $p \in \Omega \cap G_n$

$$x_i(p) = \sum_j r_{i,j}^{\infty} (\mathcal{R}_j^* \tilde{u}_j)(p) = \sum_j r_{i,j}^{\infty} \tilde{u}_j(p \cdot \omega_j).$$

Für $p \in G_n \setminus \Omega$ setzen wir $x_i(p) = 0$.

Wir können die Auswertung der obigen Summen effizient gestalten, indem wir $U_j(p) := \tilde{u}_j(p \cdot \omega_j)$ für $p \in \Omega \cap G_n$ vorberechnen und dann erst die Summen

$$x_i(p) = \sum_j r_{i,j}^{\infty} U_j(p)$$

berechnen. Um die Auswertung der $\tilde{u}$ effizient zu gestalten, kann man $\tilde{u}_j(s)$ mittels stückweiser linearer Interpolation aus dem Vektor u_j bestimmen.

Damit wäre die Implementierung des Verfahrens ST3 für das Problem der dynCT vollständig beschrieben. Der Übersicht wegen werden wir das Gesamtverfahren nochmals skizzieren:

1. **Eingabe**: Daten g, räumlicher Regularisierungsparameter λ, zeitlicher Regularisierungsparameter μ.

2. Ausgehend von D, λ, μ berechnet man Q^∞ und R^∞ gemäß

$$Q^\infty = \left(DD^\top + \frac{\lambda^2}{\mu^2} I_{T-1} \right)^{-1}$$
$$R^\infty = I_T - D^\top Q^\infty D = (r^\infty_{i,j})_{i,j}.$$

3. Man berechne die $\tilde{C}_i$ wie oben beschrieben. $\tilde{C}$ ergibt sich blockweise gemäß

$$\tilde{C} = (r^\infty_{i,j} \tilde{C}_{(i-j) \bmod T}).$$

4. Man löst

$$(\tilde{C} + \lambda^2 I_{NT})\, u = g.$$

   für $u = (u_1, \ldots, u_T)$ und $g = (g_1, \ldots, g_T)$.

5. Wir diskretisieren $[-1, 1]^2$ mittels eines Gitters G_n und bilden

$$U_j(p) = \begin{cases} \tilde{u}_j(p \cdot \omega_j) & \text{für } p \in \Omega \cap G_n, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

   $\tilde{u}_j(s)$ entsteht aus dem Vektor u_j durch stückweise lineare Interpolation.

   Die Lösungen des dynamischen Problems ergeben sich nun mittels

$$x_i(p) = \sum_j r^\infty_{i,j}\, U_j(p)$$

   für $p \in G_n$.

Anmerkung: Wenn man Schritt 5 im obigen Verfahren mit dem Verfahren der gefilterten Rückprojektion [Lou89] vergleicht, so ist Schritt 5 eine gewichtete und diskretisierte Version der Rückprojektion

$$\mathcal{R}^\sharp u(p) := \int_{S^1} u(\omega, p \cdot \omega)\, d\omega$$

6.5 Beispielrekonstruktionen

Wir werden im folgenden einige Beispielergebnisse des Verfahrens ST3 angewandt auf die dynCT vorstellen.

Allen Beispielen liegen die folgenden Eckdaten zugrunde: Es wurde mittels $n = 300$ auf einem 300×300-Gitter rekonstruiert, die Anzahl der Winkelpositionen (und somit der Zeitschritte) beträgt $T = 87$. Der Detektor hat $N = 81$ Elemente. Die Regularisierungsparameter wurde durch Probieren bestimmt, es wurden $\lambda = 0.01$ und $\mu = 1.0$ gewählt.

Die verwendeten dynamischen Objekte haben alle die gleiche Struktur. Siehe dazu Abbildung 6.5. Innerhalb dieses Objektes verhalten sich alle Teile statisch bis auf das mit einem Pfeil markierte. Dieses weist ein zeitliches Verhalten auf.

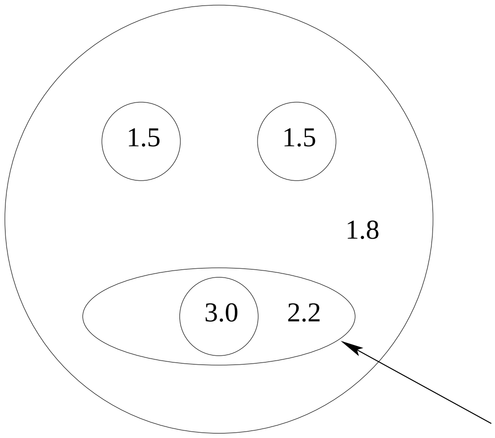

Abb. 6.5: Das den Rekonstruktionen zugrundeliegende Objekt. Die Zahlen geben die absoluten Dichten der einzelnen Teile des Objektes an. Das mittels Pfeil hervorgehobene Objekt verändert sich je nach Beispiel über die Zeit.

Die Rechenzeit der einzelnen Beispiele betrug jeweils ca. 45 Minuten, wobei 10 Minuten für das Lösen des Gleichungssystems in Schritt 4 gebraucht wurden und die restlichen 35 Minuten für die Operationen in Schritt 5. Die Beispiele wurden in MATLAB programmiert. Insbesondere die Rückprojektionen in Schritt 5 sind daher sehr ineffizient, da die dazu geschriebenen Programme nicht übersetzt, sondern interpretiert werden. Durch geschickte Vektorisierung der bei der Rückprojektion anfallenden Skalarprodukte $p \cdot \omega_i$ und der zur Interpolation auf dem Detektor notwendigen Operationen, müsste eine Geschwindigkeitssteigerung der Rückprojektionen um den Faktor 10 möglich sein.

Ab Version 6 greift MATLAB zur Lösung des Gleichungssystems in Schritt 4 auf die hochoptimierte Programmbibliothek LAPACK [And99] zurück. Für Schritt 4 ist daher keine wesentliche Effizienzsteigerung mehr zu erwarten. Leider hat das Lösen dieses Systems einen Aufwand von $\mathcal{O}(N^3T^3)$, so daß sich bereits bei Verdoppelung der Auflösung N des Detektors die Rechenzeit verachtfacht.

6.5.1 Erstes Beispiel

Zum ersten Beispiel: es spiegelt die Situation wider, daß sich ein Patient während der ersten 43 Zeitschritte zunächst ruhig verhält und sich nicht bewegt. Dann macht er innerhalb eines Zeitschritts eine Bewegung wodurch ein "Organ" verrutscht, um während der weiteren Zeitschritte ruhig zu bleiben. Abbildung 6.6 spiegelt dieses Verhalten wider.

Die zugehörige Rekonstruktion ist in Abbildung 6.7 zu sehen. Wie man sieht ist die Rekonstruktion zu Beginn und Ende des Zeitbereichs von hoher Qualität. In der Nähe des Zeitpunkt des "Rutschens" verwischt die Rekonstruktion vom ersten Zustand in den zweiten Zustand.

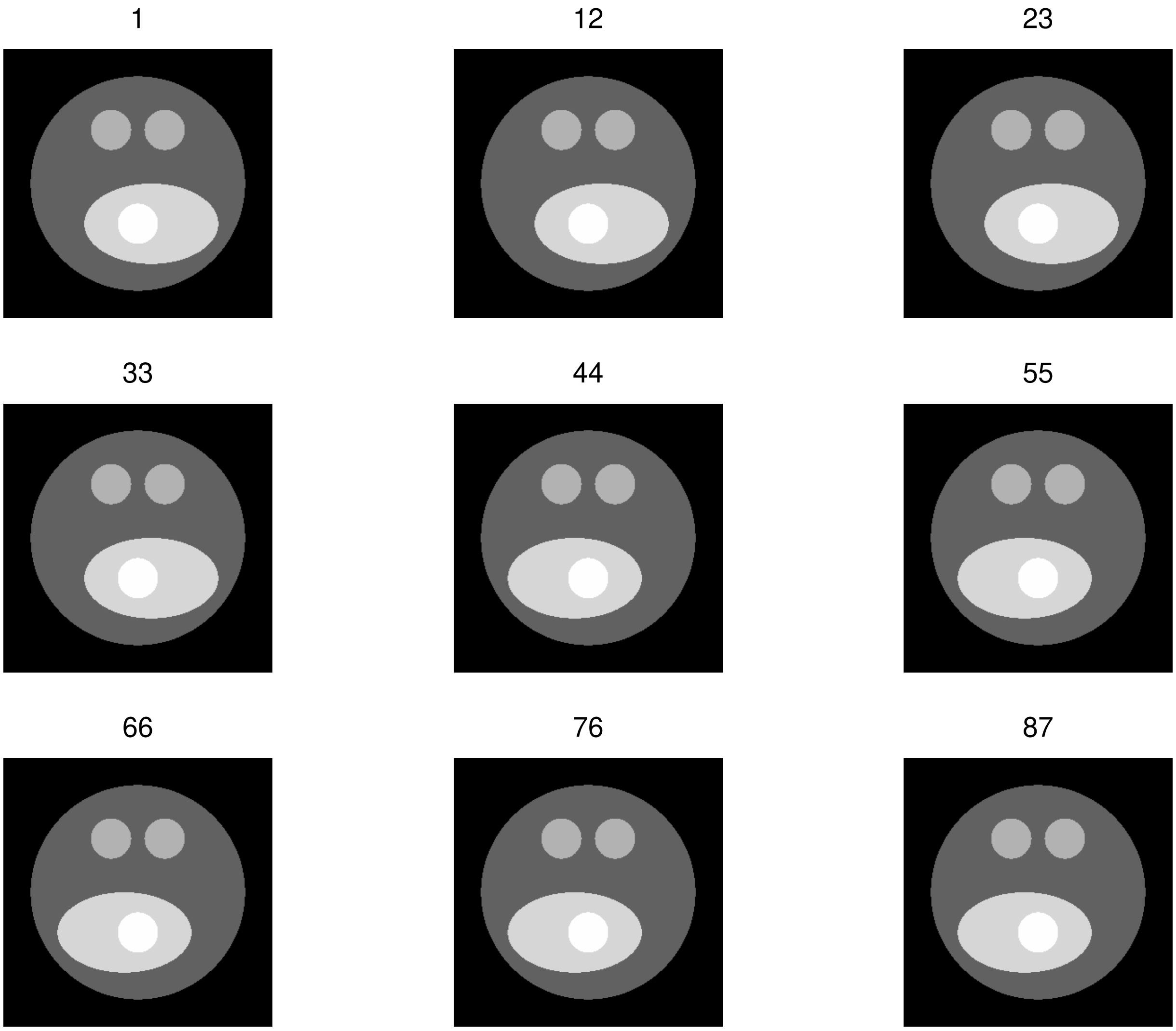

Abb. 6.6: Erstes Beispiel: das zu rekonstruierende Objekt in seinem zeitlichen Verlauf. Oberhalb der einzelnen Abbildungen ist der zugehörige Zeitschritt vermerkt.

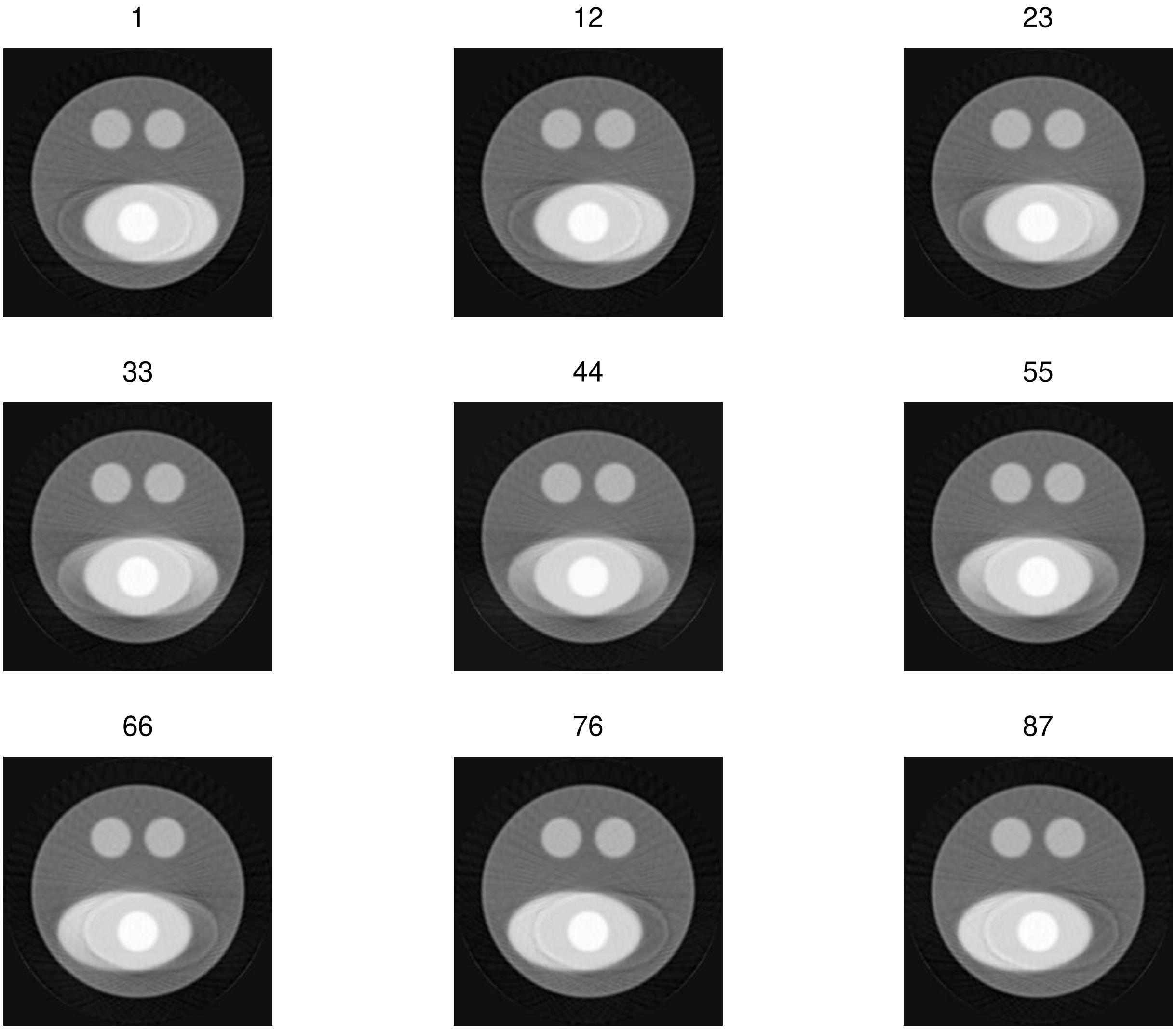

Abb. 6.7: Erste Rekonstruktion. Oberhalb der einzelnen Abbildungen ist der zu den jeweiligen Rekonstruktionen gehörende Zeitschritt angegeben.

6.5.2 Zweites Beispiel

Beim zweiten Beispiel wurde die Situation eines sich zeitlich ausdehnenden Organs simuliert, wie es zum Beispiel beim Einatmen der Fall ist. Das zugrundeliegende dynamische Objekt ist in Abbildung 6.8 zu sehen. Die zugehörige Rekonstruktion in Abbildung 6.9 weist in den statischen Teilobjekten eine gute Qualität auf. Das sich zeitlich verändernde Objekt ist mit Artefakten behaftet, die qualitative zeitliche Änderung wird aber deutlich.

Schließlich sieht man das Rekonstruktionsergebnis der gefilterten Rückprojektion angewandt auf die gleichen dynamischen Daten in Abbildung 6.10. Die statischen Anteile werden fehlerfrei rekonstruiert, über den zeitlichen Verlauf des Objektes kann man aber keine Aussage machen.

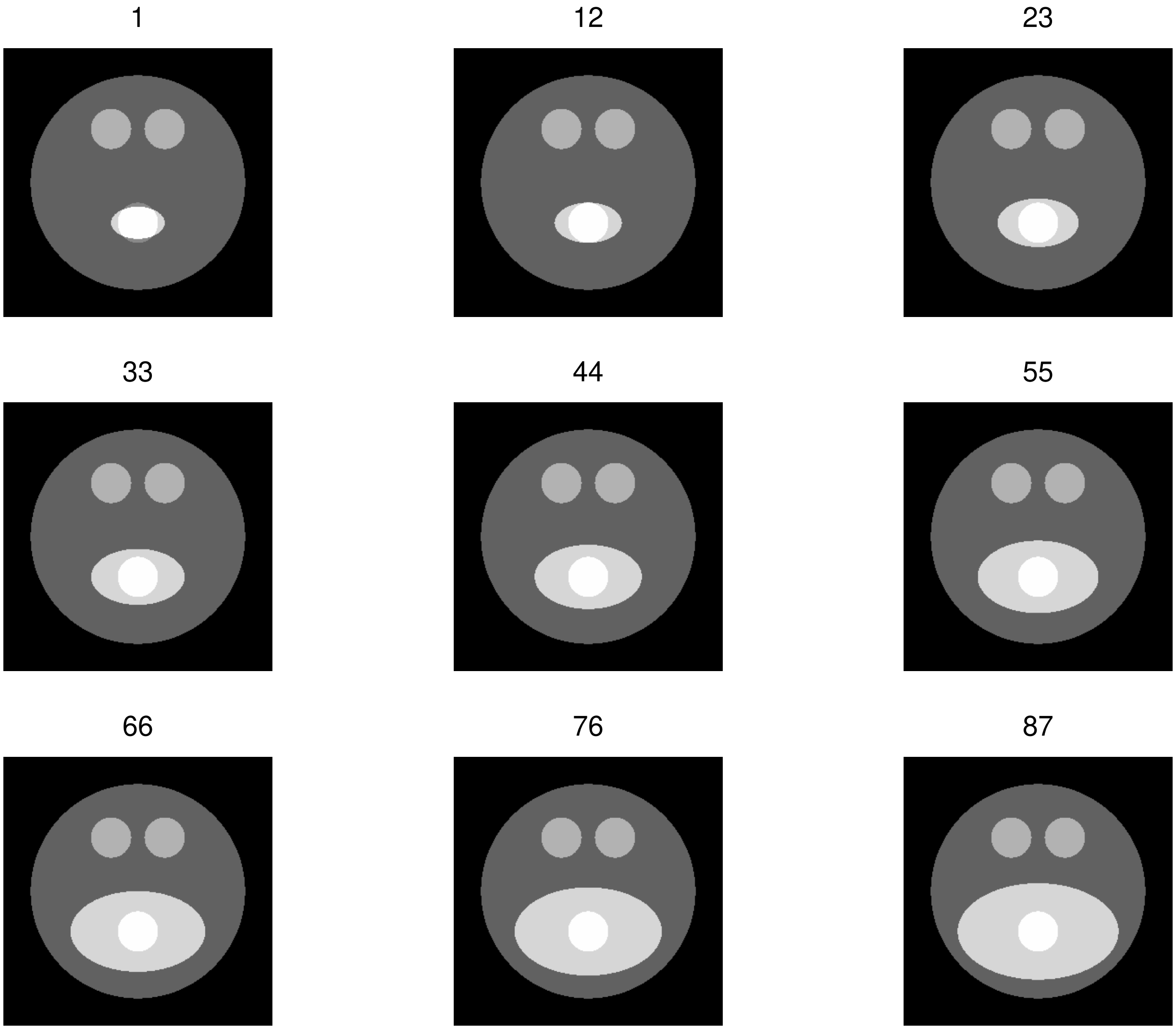

Abb. 6.8: Zweites Beispiel: das zu rekonstruierende Objekt in seinem zeitlichen Verlauf. Oberhalb der einzelnen Abbildungen ist der zugehörige Zeitschritt vermerkt.

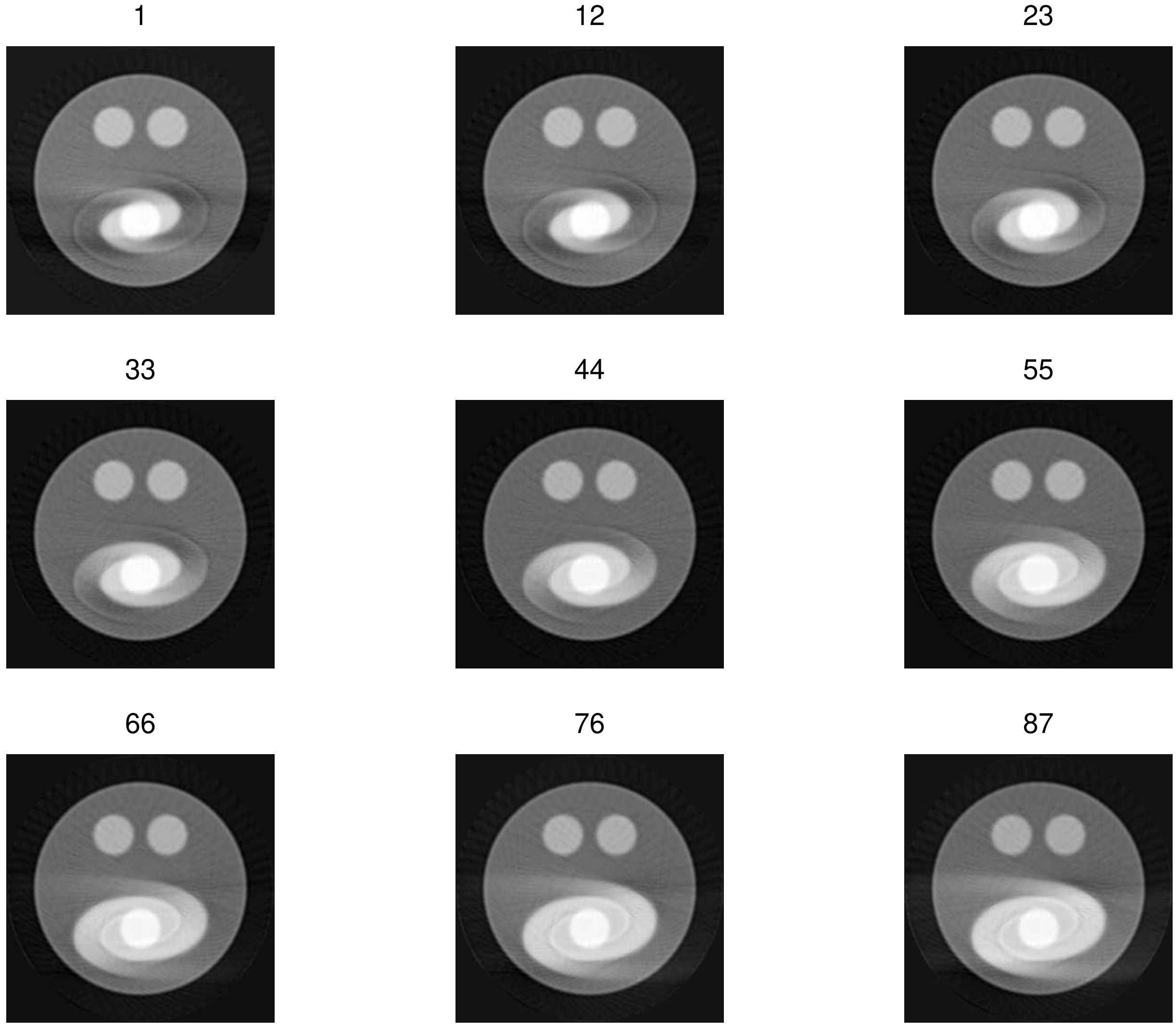

Abb. 6.9: Zweite Rekonstruktion. Oberhalb der einzelnen Abbildungen ist zu den jeweiligen Rekonstruktionen gehörende Zeitschritt angegeben.

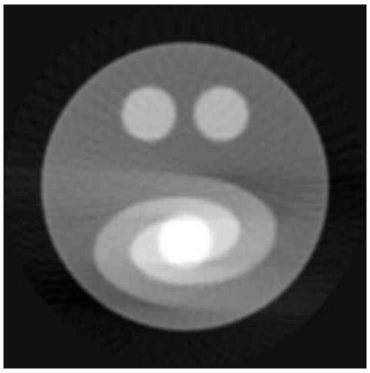

Abb. 6.10: Rekonstruktion dynamischer Daten mit dem Verfahren der gefilterten Rückprojektion. Als Filter wurde der Shepp-Logan Filter gewählt.

6.5.3 Abschließende Bewertung, Ausblick

Betrachtet man das Problem der dynCT ohne jegliche a-priori Information, so enthalten die einzelnen Meßdaten zuwenig Informationen, um überhaupt eine Rekonstruktion durchführen zu können. Versucht man z. B. das dynamische Problem

$$A\,x = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & & & \\ & \mathcal{R}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathcal{R}_T \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_T \end{pmatrix}$$

mittels Minimumnormlösung anzugehen, so liefert A^* angewandt auf die Lösung der Gleichung $AA^*u = g$ Rückprojektionen zu jedem einzelnen Zeitschritt, das heißt die entstehenden Bilder sind längs Geraden, welche senkrecht auf dem Detektor auftreffen, konstant. Solche Bilder enthalten überhaupt keine verwertbaren Informationen über das dynamische Objekt.

Da die im Verfahren ST3 eingebrachte a-priori Information der zeitlichen Glattheit keinerlei spezielle Kenntnisse des Objektes voraussetzt, und die Rekonstruktionen zumindest qualitativ das zeitliche Verhalten des zu untersuchenden Objektes widerspiegeln, kann man feststellen, daß die aufgeführten Beispielrekonstruktionen in ihrer Qualität sehr zufriedenstellend ausfallen. Wie man in Abbildung 6.11 sieht, liefert das Verfahren ST3 auch auf statische Objekte angewandt brauchbare Rekonstruktionen. Ist die Qualität dieser Rekonstruktion für den Anwender zufriedenstellend, so kann dieses Verfahren generell sowohl für statische als auch dynamische Objekte eingesetzt werden.

Interessant ist auch die folgende Anwendungsmöglichkeit: liefert ein statisches Verfahren ein Bild mit einem Organ, sowie einem Artefakt am Rande des Organs, so kann man anhand dieses Bildes nicht zwischen Bewegungsartefakt und pathologischem Befund (Entzündung, Geschwür, ...) unterscheiden. Nimmt man jedoch das hier vorgestellte dynamische Verfahren, so ergeben sich zwei Möglichkeiten: der Artefakt tritt zu allen Zeitschritten auf, oder es ist eine Bewegung erkennbar. Im ersten Fall handelt es dann wahrscheinlich um einen pathologischen Befund.

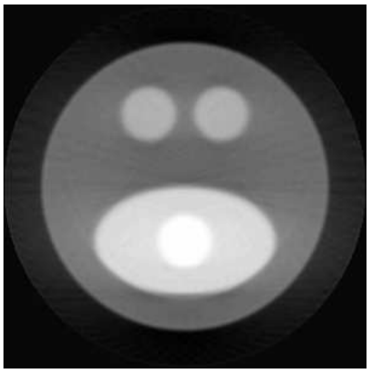

Abb. 6.11: Rekonstruktion eines statischen Objektes mittels des Verfahrens ST3. Die Regularisierungsparameter λ und μ wurden wie bei den dynamischen Beispielen gewählt.

7 Dynamische Impedanz-Tomographie

Der Sinn einer Idee ist ihre Verwirklichung, und taugt die Verwirklichung nichts, war die Idee für die Katz.

Hans Kasper, dt. Schriftsteller, Journalist und Hörspielautor

Bei der elektrischen Impedanz-Tomographie (EIT) versucht man von elektrischen Messungen auf der Oberfläche eines Objektes auf die Leitfähigkeitsverteilung im Inneren dieses Objektes zu schließen. Es handelt sich hierbei, im Gegensatz zu den anderen behandelten Beispielanwendugnen, um ein nichtlineares, schlecht gestelltes Problem, welches wir als dynamisches Problem interpretieren können. Wir werden das Verfahren ST3 auf die dynamische EIT anwenden, indem wir das zugrundeliegende Problem linearisieren.

7.1 Allgemeines zur Impedanz-Tomographie

Bei der EIT handelt es sich um ein Meßverfahren, welches sowohl in Medizin, als auch in der Industrie Anwendung findet. Da die elektrische Leitfähigkeit von der Temperatur abhängt, wird die EIT zum Beispiel im Rahmen der Hyperthermie [Der96] angewandt, um Temperaturen im Inneren des Körpers zu bestimmen. Eine andere medizinische Anwendung ist die Diagnose von Brustkrebs [O$^+$00]. Einen guten Überblick über medizinische Anwendungen findet man in [D$^+$93]. Industrielle Anwendungen sind das Detektieren von Hohlräumen, Rissen und Schichtgrenzen im Rahmen des zerstörungsfreien Prüfens [Der96, AR98, FV89, KV96]. Der Artikel [CIN99] bietet einen umfangreichen Überblick.

Ausgangspunkt für die EIT ist folgende Meßanordnung: An einem zu untersuchenden Objekt werden Elektroden angebracht, durch welche man elektrische Ströme appliziert. Um Informationen über die elektrische Beschaffenheit des Objektes zu sammeln, variiert man diese **Strommuster** I_l, und mißt jeweils die damit verbundene Spannungen U_l. Siehe Abbildung 7.12. Man erhält somit Paare $((I_l)_t, (U_l)_t), 1 \leq l \leq L, 1 \leq t \leq T$.

Die elektrische Beschaffenheit des Objektes wird durch die sogenannte **elektrische Leitfähigkeit** σ beschrieben. Dadurch, daß sich das sukzessive Anwenden von Strommustern über einen gewissen Zeitraum erstreckt, kann man das Problem der EIT als dynamisches inverses Problem formulieren, welches wir als dynEIT bezeichnen werden. Der Index t des

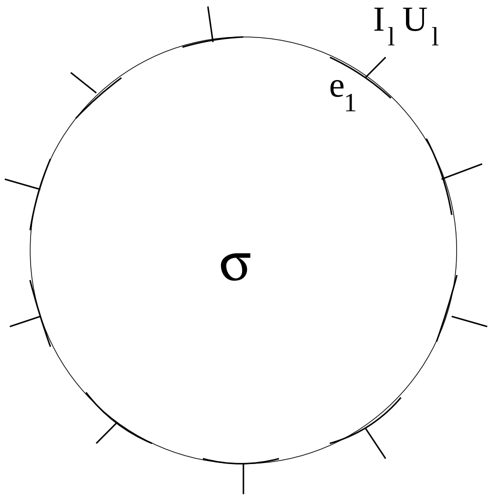

Abb. 7.12: Meßanordnung der elektrischen Impedanz-Tomographie

Strommusters $(I_l)_t$ ist in diesem Zusammenhang nichts anderes als ein zeitlicher Index. Wir gehen davon aus, daß das Messen der zum Strommuster I_l gehörenden Spannungsverteilung U_l vernachlässigbar wenig Zeit in Anspruch nimmt.

7.2 Das mathematische Modell der EIT

Wir beschreiben im folgenden das Vorwärtsproblem der EIT mit Hilfe einer elliptischen Differentialgleichung mit gemischten Randwerten. Die als "**Complete Electrode Model**" bezeichnete Formulierung wurde ursprünglich in [CING89] vorgestellt.

Ausgangspunkt zur Beschreibung des Vorwärtsproblems ist die Leitfähigkeitsverteilung $\sigma \in H^1(\Omega)$ innerhalb eines Gebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. An Elektroden $e_k \subset \partial\Omega$ werden Ströme I_l appliziert und Spannungen U_l gemessen. Zu jeder Elektrode e_l gehört eine sogenannte Kontaktimpedanz z_l.

Das im folgenden beschriebene Modell ist unter allen bekannten Modellen dasjenige, welches am besten mit der Realität übereinstimmende Meßwerte liefert [SCI92]. Modelle, welche ohne Kontaktimpedanzen auskommen, sind zwar von der Mathematik her zwar einfacher zu untersuchen, führen aber auch zu systhematische Fehlern.

Grundlage für das Vorwärtsmodell sind die folgenden Gleichungen

$$\mathrm{div}(\sigma\nabla u) = 0 \tag{7.78}$$

$$\int_{e_l} \sigma \frac{\partial u}{\partial n} dS = I_l \qquad 1 \le l \le L \tag{7.79}$$

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\partial\Omega\setminus\cup e_l} = 0 \tag{7.80}$$

$$\left(u + z_l \sigma \frac{\partial u}{\partial n}\right)\Big|_{e_l} = U_l \qquad 1 \le l \le L. \tag{7.81}$$

Gegeben sind I_l, z_l, σ. Gesucht sind u und U_l. Gleichung (7.78) beschreibt das elektrische Feld im Inneren des Objektes, (7.79) beschreibt die Ströme durch die Elektroden, (7.80) besagt, daß außerhalb der Elektroden keine Ströme durch den Rand des Objektes fließen und die letzte Gleichung (7.81) beschreibt das Zustandekommen der mittels der Elektroden gemessenen Spannungen. Um die Eindeutigkeit und Existenz der Lösung u zu erhalten, braucht man die Erhaltungsgleichung der Ströme

$$\sum_{l=1}^{L} I_l = 0.$$

Siehe hierzu [SCI92]. Dort wird auch auf die Gutgestelltheit des Vorwärtsproblems eingegangen.

Da das Messen von elektrischen Spannungen von einer Referenzelektrode abhängt, wählen wir

$$\sum_{l=1}^{L} U_l = 0. \tag{7.82}$$

Wie in [SCI92] gezeigt, ist das obige Gleichungssystem äquivalent zu der im folgenden beschriebenen Variationsgleichung. Um diese Gleichung formulieren zu können, führen wir die Hilbertraumsumme

$$\mathbb{H} = H^1(\Omega) \oplus \mathbb{R}^L$$

und den Quotientenraum

$$\dot{\mathbb{H}} = \mathbb{H}/\mathbb{R}$$

ein. Das heißt $(u, U) \in \mathbb{H}$ und $(v, V) \in \mathbb{H}$ sind äquivalent in $\dot{\mathbb{H}}$, falls

$$u - v = U_1 - V_1 = \cdots = U_L - V_L.$$

Nun ist das Gleichungssystem (7.78) – (7.81) äquivalent zur Variationsaufgabe

$$B_\sigma((u, U), (v, V)) = \sum_{l=1}^{L} I_l V_l \qquad \forall (v, V) \in \dot{\mathbb{H}}.$$

Die Bilinearform B_σ ist gegeben durch

$$B_\sigma((u,U),(v,V)) = \int \sigma \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \sum_l \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (u - U_l)(v - V_l) \, dS.$$

Man beachte, daß diese Bilinearform auf $\dot{\mathbb{H}}$ wohldefiniert ist.

7.3 Numerische Berechnung des Vorwärtsmodells der EIT

Um die oben angegebene Variationsgleichung nun numerisch zu lösen, benutzen wir die sogenannte Finite-Elemente-Methode (FEM). Eine ausführliche Beschreibung der folgenden Herleitung findet man in [Vau97].

Ausgangspunkt der numerischen Behandlung der Variationsaufgabe ist die Approximation von u in einem endlichdimensionalen Teilraum $Q_h = \operatorname{span}\{\phi_i \,|\, 1 \leq i \leq N\} \subset H^1(\Omega)$, das heißt

$$u^h = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \phi_i.$$

Desweiteren wählen wir

$$U^h = \sum_{j=1}^{L-1} \beta_j \eta_j.$$

wobei $\eta_1 = (1, -1, 0, \ldots, 0)^\top, \eta_2 = (0, 1, -1, \ldots, 0)^\top \in \mathbb{R}^L$ usw. Diese Wahl der η_j stellt sicher, daß Gleichung (7.82) erfüllt wird. Setzen wir diese Darstellungen von u^h und U^h in die obige Variationsaufgabe ein, und testen zuerst mit $(\phi_i, 0)$ und dann mit $(0, \eta_i)$, so erhalten wir das Gleichungssytem [BS94]

$$Ax = I.$$

Hierbei ist

$$I = (\mathbf{0}, I_1 - I_2, I_1 - I_3, \ldots, I_1 - I_L) \qquad \text{mit} \quad \mathbf{0} \in \mathbb{R}^N$$

$$x = (\alpha_1, \ldots, \alpha_N, \beta_1, \ldots, \beta_{L-1})$$

Die Matrix A, welche man auch als **Steifigkeitsmatrix** bezeichnet, hat die Form

$$A = \begin{pmatrix} B & C \\ C^\top & D \end{pmatrix},$$

mit den Submatrizen

$$B(i,j) = \int_\Omega \sigma \nabla\phi_i \cdot \nabla\phi_j \, dx + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} \phi_i \phi_j \, dS \qquad 1 \le i,j \le N$$

$$C(i,j) = -\left(\frac{1}{z_1} \int_{e_1} \phi_i \, dS - \frac{1}{z_{j+1}} \int_{e_{j+1}} \phi_i \, dS \right) \qquad 1 \le i \le N, 1 \le j \le L-1$$

$$D(i,j) = \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (\eta_i)_l (\eta_j)_l \, dS = \frac{|e_1|}{z_1} + \delta_{i,j} \frac{|e_{j+1}|}{z_{j+1}} \qquad 1 \le i,j \le L-1.$$

Hat man die ϕ_i nun so gewählt, daß sie kleinen Träger haben, so ist die Matrix A dünn besetzt.

Die U_i^h erhält man aus den β_l mittels

$$\begin{aligned} U_1^h &= \sum_{l=1}^{L-1} \beta_l \\ U_2^h &= -\beta_1 \\ &\vdots \\ U_L^h &= -\beta_{L-1}. \end{aligned}$$

Im folgenden verwenden wir anstelle der Leitfähigkeit σ den elektrischen Widerstand $\rho = \frac{1}{\sigma}$. Der durch die Lösung des obigen Gleichungssystems induzierte Vorwärtsoperator

$$T : (\rho, I) \mapsto U^h$$

ist diskret und nichtlinear.

7.4 Linearisierung des Vorwärtsmodells

Um das Problem der dynamischen EIT später folgend formulieren und lösen zu können, werden wir den oben angegebenen Operator T linearisieren. Wir gehen von der Darstellung

$$\rho = \sum_{m=1}^{M} \rho_m \chi_m$$

aus. Die χ_m sind charakteristische Funktionen der sogenannten Elemente Δ_m. Diese Δ_m bilden eine disjunkte Zerlegung von Ω. Das heißt wir wählen ρ stückweise konstant. Diese Elemente werden wegen der Schlechtgestelltheit des Problems im allgemeinen gröber gewählt als die zur Berechnung des Vorwärtsmodells herangezogenen.

Ziel der folgenden Rechnungen ist es, die Jacobimatrix

$$J(\rho) = D_\rho T(\rho, I) = \left(\frac{\partial U_n^h}{\partial \rho_m}\right)_{n,m} \tag{7.83}$$

zu berechnen.

Zuerst beachten wir, daß

$$U^h = (\mathbf{0}|C)\, x =: \tilde{C}x,$$

wobei $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{L\times N}$ ist, und C die Gestalt

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 \end{pmatrix}$$

hat. x läßt sich wiederum darstellen als

$$x = A^{-1}I.$$

Wegen $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial \rho_m} = 0$ und $\frac{\partial I}{\partial \rho_m} = 0$ folgt unter zweimaliger Anwendung der Multiplikationsregel für Ableitungen

$$\frac{\partial U^h}{\partial \rho_m} = \tilde{C}\frac{\partial x}{\partial \rho_m} = \tilde{C}\frac{\partial A^{-1}I}{\partial \rho_m} = \tilde{C}\frac{\partial A^{-1}}{\partial \rho_m}I.$$

Benutzt man $\mathrm{Id} = A^{-1}A$ und wendet die Multiplikationsregel für Ableitungen erneut an, so erhält man für den letzten Term

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial \rho_m} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial \rho_m}A^{-1}.$$

Insgesamt erhält man für die m-te Spalte der Jacobimatrix (7.83)

$$\frac{\partial U^h}{\partial \rho_m} = -\tilde{C}A^{-1}\frac{\partial A}{\partial \rho_m}A^{-1}I = -\tilde{C}A^{-1}\frac{\partial A}{\partial \rho_m}x.$$

Wegen der Struktur der Steifigkeitsmatrix A ergibt sich

$$\frac{\partial A}{\partial \rho_m} = \begin{pmatrix} \frac{\partial B}{\partial \rho_m} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei

$$\frac{\partial B(i,j)}{\partial \rho_m} = -\frac{1}{\rho_m^2} \int_{\Delta_m} \nabla\phi_i \cdot \nabla\phi_j \, dx \qquad 1 \le i,j \le N$$

gilt.

7.5 Anwendung des Verfahrens ST3 auf die dynEIT

Ausgehend von T Strommustern $I_t = (I_l)_t, 1 \le l \le L, 1 \le t \le T$ erhalten wir mittels der oben skizzierten FEM die diskreten Vorwärts-Operatoren

$$A_t(\rho) = T(\rho, I_t),$$

welche sich mittels

$$A_t(\rho) = T(\rho^0, I_t) + J_t(\rho^0)(\rho - \rho^0) + o(\|\rho - \rho^0\|)$$

linearisieren lassen.

Um ein funktionsfähiges Verfahren für das nichtlineare Problem der dynEIT herleiten zu können, müssen wir außer der zeitlichen Glattheit noch eine weitere a-priori Information ins Spiel bringen. Diese lautet in unserem Fall

$$\rho \approx \rho^0$$

für ein bekanntes ρ^0.

Ein solches ρ^0 läßt sich nach [JS97] wie folgt schätzen. Es sei $R(\sigma, z) = \tilde{C}A^{-1}(\sigma, z)$, das heißt es gilt $U^h = R(\sigma, z)I$. Setzt man nun ρ als räumlich konstant voraus, das heißt $\rho = \rho^0(1, \dots, 1)^\top$, und die z_i als $z_i = z_0 \ \forall i > 0$, so gilt

$$R\left(\frac{1}{\rho^0}, z_0\right) = \rho^0 R\left(1, \frac{z_0}{\rho^0}\right).$$

Das Verhältnis $\xi = \frac{z_0}{\rho^0}$ läßt sich z. B. in medizinischen Anwendungen angeben. Berechnet man nun

$$U_0^h = R(1, \xi)I,$$

und hat man Spannungsmessungen V gegeben, so läßt sich die skalare Größe ρ^0 nun schätzen als Lösung von

$$\|\rho^0 U_0^h - V\| \to \min.$$

Das heißt, man erhält ρ^0 als

$$\rho^0 = \frac{\langle U_0^h, V\rangle}{\|U_0^h\|^2}.$$

Ausgehend von dieser Zusatzinformation wollen wir das Problem der dynEIT lösen, indem wir das Funktional

$$\Phi(\rho_1, \ldots, \rho_T) = \sum_t \|A_t(\rho_t) - U_t\|^2 + \lambda^2 \sum_t \|\rho_t - \rho^0\|^2 + \mu^2 \sum_t \|\rho_{t+1} - \rho_t\|^2 \tag{7.84}$$

minimieren. Wir sind hierbei von Meßwerten $U_t = (U_i)_t, 1 \leq i \leq N, 1 \leq t \leq T$ ausgegangen. Außerdem identifizieren wir ρ_0 mit dem konstanten Vektor $\rho_0(1, \ldots, 1)^\top$. Setzen wir

$$\begin{aligned} \rho &= (\rho_1, \ldots, \rho_T)^\top \\ U &= (U_1, \ldots, U_T)^\top \\ A &= \operatorname{diag}(A_t), \end{aligned}$$

und benutzen die Notationen aus Kapitel 3.3, so schreibt sich Φ als

$$\Phi(\rho) = \|A(\rho) - U\|^2 + \lambda^2 \|\rho - \rho^0\|^2 + \mu \|B\rho\|^2.$$

Um dieses Funktinal näherungsweise minimieren zu können, approximieren wir A durch Linearisierung, d.h. wir lösen

$$\|A(\rho^0) + J(\rho^0)(\rho - \rho^0) - U\|^2 + \lambda^2 \|\rho - \rho^0\|^2 + \mu \|B\rho\|^2 \to \min$$

mit

$$J = \operatorname{diag}(J_t(\rho_t)).$$

Gehen wir davon aus, daß ein so bestimmtes ρ dichter als ρ^0 an der Lösung von (7.84) liegt, und eine Linearisierung um dieses ρ den Operator A besser approximiert, so erhalten wir ein iteratives Verfahren vom Typ Gauß-Newton [EHN96, DH93] wie folgt

$$\rho^{i+1} = \operatorname*{minarg}_\rho \left\{ \|A(\rho^i) + J(\rho^i)(\rho - \rho^i) - U\|^2 + \lambda^2 \|\rho - \rho^0\|^2 + \mu \|B\rho\|^2 \right\}.$$

Hier wurde der Iterationsindex hochgestellt notiert, um ihn von dem zeitlichen Index unterscheiden zu können.

Obige Minimierungsaufgabe ist in dieser Form dem Verfahren ST3 nicht zugänglich, da der Term $\|\rho - \rho^0\|$ anstelle von $\|\rho\|$ auftritt[11]. Daher führen wir die Variablen $u = \rho - \rho^0$ und $u^i = \rho^i - \rho^0$ ein. Beachten wir, daß $Bu = B\rho$ gilt, so erhalten wir die Iterationsvorschrift

$$u^{i+1} = \operatorname*{minarg}_u \left\{ \|J(\rho^i)u - (U + J(\rho^i)u^i - A(\rho^i))\|^2 + \lambda^2 \|u\|^2 + \mu^2 \|Bu\|^2 \right\}$$

bzw.

$$\rho^{i+1} = \rho^0 + \operatorname*{minarg}_u \left\{ \|J(\rho^i)u - (U + J(\rho^i)(\rho^i - \rho^0) - A(\rho^i))\|^2 + \lambda^2 \|u\|^2 + \mu^2 \|Bu\|^2 \right\}. \tag{EITGN}$$

[11] Eigentlich sollte der Term $\|\rho - \rho^i\|$ lauten. Dann ist die folgende Anwendung des Verfahrens ST3 allerdings nicht mehr möglich.

Hier kann man nun Verfahren ST3 ansetzen, um die iterativ anfallenden Minimierungsaufgaben effizient zu lösen.

In (7.84) tritt der Term ρ^0 im räumlichen Regularisierungsterm auf, da in der Praxis das daraus resultierende Verfahren (EITGN) sonst nicht konvergiert. Außerdem kann es passieren, daß beim Iterieren ρ^i auftreten, welche negative Einträge haben. Dann ist allerdings der Vorwärtsoperator $A(\rho^i)$ unter Umständen nicht definiert, da die der Finite Elemente Lösung zugrunde liegende Steifigkeitsmatrix singulär wird. Macht man nur einen einzigen Iterationsschritt, so kann man auch ρ als Lösung folgender Minimierungsaufgabe erhalten:

$$\|A(\rho^0) + J(\rho^0)(\rho - \rho^0) - U\|^2 + \lambda^2\|\rho\|^2 + \mu^2\|B\rho\|^2 \to \min. \tag{EITST}$$

Auch auf diese kann das Verfahren ST3 angewandt werden.

7.6 Kalman-Glätter zur Lösung des dynEIT-Problems

7.6.1 Beschreibung des Kalman-Glätters

In der Literatur findet man Ansätze zur Lösung des Problems der dynEIT in Form von sogenannten Kalman-Glättern, siehe z. B. [KKSV99, VK89]. Hierbei handelt es sich nicht um Glätter im herkömmlichen Sinne, die z. B. durch Faltungsoperatoren gegeben sind, sondern um spezielle statistische Schätzer. Auf diese wollen wir nun eingehen.

Wir verzichten im folgenden auf ausführliche Definitionen und Sätze. Zum Einstieg in die Theorie der statistischen Schätzer sei dem interessierten Leser [Mel78] empfohlen. Eine gute Einführung in das Gebiet der Kalman-Schätzer findet man in [GA93].

Im folgenden bezeichen die Zufallsvariable y eine Beobachtung, x sei deren Ursache. Wir wollen diese Ursache nun anhand einer Beobachtung schätzen. Diesen Schätzer bezeichnen wir als $\hat{x}$. Mit p bezeichnen wir Wahrscheinlichkeiten, bedingte Wahrscheinlichkeiten notieren wir in der Form $p(x|y)$.

$\hat{x}$ heißt **Maximum a-posteriori Schätzer** oder kurz **MAP-Schätzer**, wenn

$$\hat{x}_{\text{MAP}} = \underset{x}{\text{maxarg}}\; p(x|y).$$

Ausgangspunkt für Kalman-Glätter ist das folgende lineare Modell. Es besteht zum einen aus dem sogenannten "**Message Model**", welches die Entwicklung einer Ursache x über die Zeit k beschreibt:

$$x_{k+1} = \Phi_{k+1}\, x_k + w_k.$$

Φ_k ist hierbei ein linearer Operator, w ist normalverteiltes Rauschen mit verschwindendem Erwartungswert und Kovarianz Q_k, d.h. $w(k) \sim \mathcal{N}(0, Q_k)$.

Zum anderen hat man ein "**Measurement Model**", welches beschreibt, wie sich die Ursache x auf die Meßwerte y auswirkt:

$$y_k = H_k\, x_k + v_k.$$

Auch hier ist H ein linearer Operator und v Rauschen mit Normalverteilung $v_k \sim \mathcal{N}(0, R_k)$. Außerdem haben wir Anfangswerte der Form

$$E(x_1) = \mu_x(0) \qquad \text{und} \qquad \operatorname{cov}\{x_0\} = P_0.$$

Eine weitere technisch bedingte Voraussetzung ist

$$\operatorname{cov}\{v_j, w_k\} = 0 \quad \forall j \neq k.$$

$\hat{x}(j|k)$ sei ein MAP-Schätzer für den Zustand x_j unter Beobachtungen $(y_1, \ldots, y_k)$. Schätzt man x_j unter Kenntnis von $y_1, \ldots, y_j$, so spricht man von einem **Kalman-Filter**. Schätzt man x_j unter Kenntnis von $y_1, \ldots, y_k, k \geq j$, so spricht man von einem **Kalman-Glätter**.

Das Berechnen des Kalman-Glätters $\hat{x}(j|k), 1 \leq j \leq k$, geschieht nach [GA93] nun wie folgt:

1. $x_0^+ = \mu_x(0)$
2. Für $j = 1 \ldots k$ berechne
   (a) $x_j^- = \Phi_{j-1}\, x_{j-1}^+$
   (b) $P_j^- = \Phi_{j-1}\, P_{j-1}^+\, \Phi_{j-1}^\top + Q_{j-1}$
   (c) $x_j^+ = x_j^- + K_j[y_j - H_j\, x_j^-]$
   (d) $P_j^+ = [I - K_j H_j]\, P_j^-$
   (e) $K_j = P_j^- H_j^\top [H_j P_j^- H_j^\top + R_j]^{-1}$
3. $\hat{x}(k|k) = x_k^+$
4. Für $j = k-1 \ldots 1$ berechne
   (a) $A_j = P_j^+ \Phi_j^\top (P_{j+1}^-)^{-1}$
   (b) $\hat{x}(j|k) = x_j^+ A_j \left(\hat{x}(j+1|k) - x_{j+1}^-\right)$

Läßt man Schritte 3 und 4 aus, so liefert $\hat{x}(j|j) := x_j^+, 1 \leq j \leq k$ einen Kalman-Filter.

Zwei Anmerkungen zur Effizienz:

- In Schritt 2.(e) tritt eine Matrix-Inverse auf. Diese kann unter bestimmten Voraussetzungen durch das Lösen von Gleichungssystemen ersetzt werden. Ist nun H_j unterbestimmt, so lohnt sich diese Ersetzung nicht, da dann in Schritt 2.(d) mehr rechte Seiten auftauchen würden als K_j Zeilen hat. In dem uns interessierenden Fall der dynEIT entsprechen die H_j den J_t, welche unterbestimmt sind.

- In Schritt 4 ist die Situation eine andere: Da in 4.(b) nur ein Vektor an A_j heranmultipliziert wird, sollte man A_j nicht explizit nach Schritt 4.(a) berechnen, sondern ein äquivalentes Gleichungssystem lösen.

7.6.2 Anwendung des Kalman-Glätters auf das Problem der dynEIT

Wir spezifizieren nun die im vorherigen Abschnitt auftauchenden Matrizen Φ_k, Q_k, R_k und H_k, um das Problem der dynEIT mit Hilfe von Kalman-Glättern in Angriff nehmen zu können.

Für die Entwicklung der "Ursache" ρ_t nehmen wir die folgende Entwicklungsgleichung an

$$\rho_{t+1} = \rho_t + w$$

mit von t unabhänigigem Rauschen w, welches Varianz a_1 hat, d.h. die zu w gehörende Matrix Q_k hat die Form $Q_k = a_1 I_M$. Außerdem ist $\Phi_k = I_M$ gewählt. a_1 spielt hierbei eine zum Parameter μ entgegengesetzte Rolle: je kleiner man a_1 wählt, so glatter muss die zeitliche Entwicklung der ρ_t verlaufen; die Änderung von ρ_t zu ρ_{t+1} ist mit großer Wahrscheinlichkeit gering. Umgekehrt erlaubt ein großes a_1 eine stärkere Variation von ρ_t über die Zeit t.

Das linearisierte Vorwärtsmodell schreibt sich als

$$U_t = A(\rho^0) + J_t(\rho^0)(\rho_t - \rho^0) + v_1,$$

welches sich wie folgt auf die Form des "Message-Models" bringen läßt:

$$y_t := U_t - A(\rho^0) + J_t(\rho^0)\rho^0 = J_t(\rho^0)\rho_t + v_1.$$

v_1 beschreibt hier das Rauschen in den Meßwerten, die Wahl $v_1 \sim \mathcal{N}(0, a_2 I_N)$ führt zu einer räumlichen Regularisierung. Die y_t bezeichnet man in diesem Fall auch als modifizierte Daten.

Praktische Experimente haben gezeigt, daß die räumliche Regularisierung der y_t durch die Verteilung von v_1 nur unzureichend gesteuert wird. Um daher weitere strukturelle a-priori Informationen ins Spiel zu bringen, wird ein Regularisierungsoperator L, welcher, wie in [KKVS99] und [VVK+98] beschrieben, den Gradienten approximiert, gebildet und man verlangt als zusätzliche Regularisierung, daß $\|L(\rho_t - \rho^0)\|$ "klein" ausfallen soll. In der Sprache der Wahrscheinlichkeitsrechnung kann man das als

$$\alpha L(\rho^0 - \rho_t) \sim \mathcal{N}(0, I_n)$$

ausdrücken, vorausgesetzt $L \in \mathbb{R}^{n\times M}$.. Äquivalent ist

$$\alpha L\rho^0 = \alpha L\rho_t + v_2$$

mit $v_2 \sim \mathcal{N}(0, I_n)$. Ein größeres α führt nun zu kleinerem $\|L(\rho_t - \rho^0)\|$.

Ingesamt erhält man so folgendes "Message-Model"

$$\begin{pmatrix} U_t - A(\rho^0) + J_t(\rho^0)\rho^0 \\ \alpha L\rho^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_t(\rho^0) \\ \alpha L \end{pmatrix} \rho_t + v,$$

wobei $v \sim \mathcal{N}(0, R)$ mit

$$R = \begin{pmatrix} a_2 I_N & 0 \\ 0 & I_n \end{pmatrix},$$

falls $L \in \mathbb{R}^{n\times M}$.

7.7 Beispielrekonstruktionen

Wir stellen im folgenden Beispielrekonstruktionen anhand zweier verschiedener dynamischer Objekte vor. Es werden die Ergebnisse der Verfahren (EITGN) und (EITST) und die des Kalman-Glätters verglichen. Als Ausgangspunkt der numerischen Realisierung dieser Algorithmen diente das unter `http://venda.uku.fi/~mvauhkon/matlabeit2d.tar` der freien Nutzung zur Verfügung gestellte Programmpaket. Es enthält MATLAB-Routinen, welche unter anderem die Finite-Elemente-Löser und die Berechnung der Linearisierung J implementieren.

Die zu rekonstruierenden Objekte wurden mit dem in Abbildung 7.13 zu sehenden Finite Elemente Netz in 492 Elemente unterteilt. Für das synthetische Vorwärtsmodell wurde ein feineres Netz von 1968 Elementen gewählt. Das Modell berücksichtigt $L = 16$ Elektroden und $T = 16$ Zeitschritte.

Die zu untersuchenden Objekte bestehen aus einem Hintergrund mit dem elektrischen Widerstand $400\,\Omega$ und Einschlüssen mit elektrischem Widerstand $200\,\Omega$. Der Hintergrund ρ^0 wurde auf die oben beschriebene Art und Weise zu $396\,\Omega$ geschätzt, und liegt daher sehr dicht am realen Hintergrund.

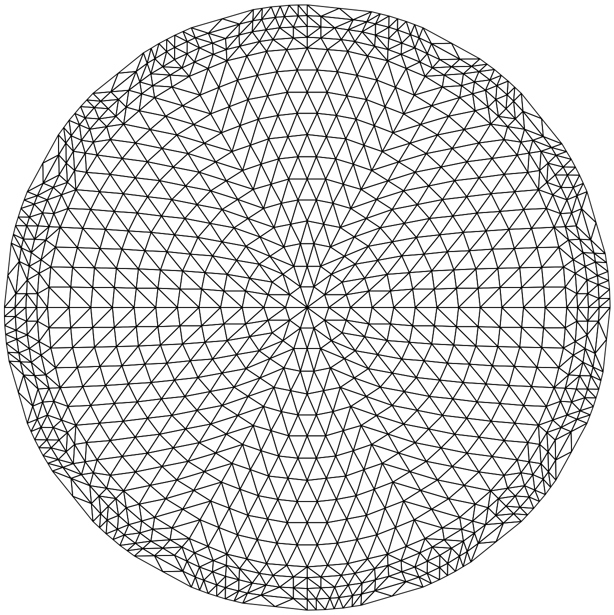

Abb. 7.13: Diskretisierung des zu untersuchenden Objektes mittels eines Finite Elemente Netzes.

Alle folgenden Angaben bezüglich Rechenzeit beziehen sich auf Implementierungen in MATLAB auf einem Rechner mit Pentium-II-CPU.

Schließlich muß noch erwähnt werden, daß bei der Visualisierung der Rekonstruktionen Fenster gesetzt, und der Kontrast der Bilder gespreizt wurde.

7.7.1 Erstes Beispiel

Das erste Beispiel gibt die Situation von aufsteigenden Luftblasen in einem zylinderförmigen Rohr wieder. Das heißt, man hat in der zweidimensionalen Beobachtungsebene, welche das Rohr senkrecht schneidet. Dort hat man einen Einschluß, welcher beim Eintreten in diese Ebene zuerst größer, und dann beim Verlassen dieser Ebenen wieder kleiner wird. Siehe dazu Abbildung 7.14.

Wir vergleichen zuerst das Ergebnis des Kalman-Glätters mit dem Ergebnis des iterativen Verfahrens (EITST). Man beachte hierzu die Ergebnisse in den Abbildungen 7.15 und 7.16. Das Rekonstruktionsergebnis des Kalman-Glätters ist geringfügig schlechter, da zu Beginn des Meßvorgangs das Objekt zu klein und zum Ende des Meßvorgangs das Objekt zu groß rekonstruiert wird. Signifikant unterschiedlich ist die erforderliche Rechenzeit. Diese beträgt für den Kalman-Glätter ca. 80 Sekunden, für das Verfahren (EITST) aber nur knapp eine Sekunde. Exakte Zeitmessungen haben gezeigt, daß das Verfahren (EITST) ca. 60 mal schneller ist, als der Kalman-Glätter. Der Speicherbedarf des Kalman-Glätters ist

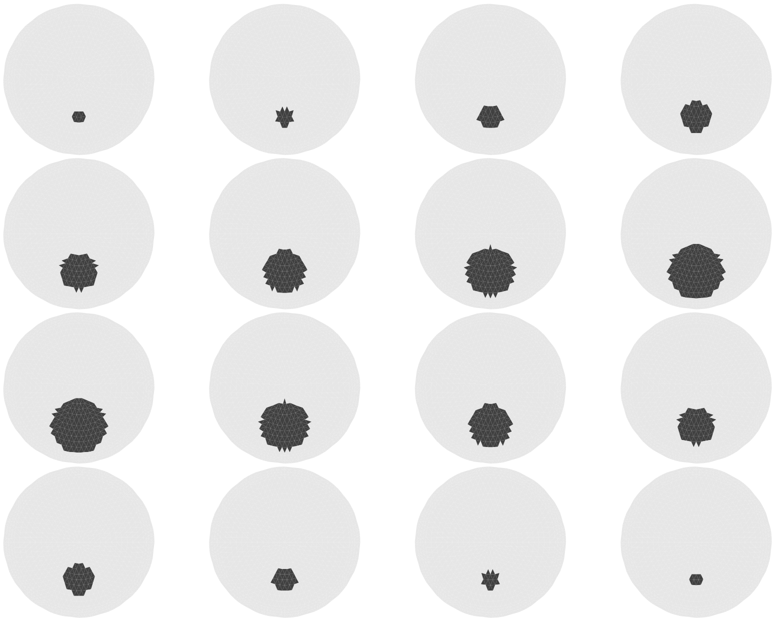

Abb. 7.14: Das erste dynamische Beispielobjekt: eine Luftblase steigt in einem Rohr auf und durchdringt die Beobachtungsebene.

um den Faktor 15000 höher als der des hier vorgestellten Verfahrens (EITST).

Insgesamt besser fällt die Rekonstruktion aus, wenn man das Gauß-Newton-artige Verfahren (EITGN) mit zwei Iterationsschritten anwendet. Siehe hierzu Abbildung 7.17. Dieses iterative Verfahren muß aber für die endgültige Umsetzung in die Praxis noch verbessert werden: Es reagiert sehr sensibel auf die Wahl von λ und μ. Insbesondere kann es je nach Wahl dieser Regularisierungsparameter vorkommen, daß das Verfahren abbricht, da ρ mit negativen Einträgen auftreten. Wie schon erwähnt erhält man in diesem Fall eine singuläre Steifigkeitsmatrix und der Vorwärtsoperator A ist nicht mehr definiert. Hier könnte es sich lohnen, das Verfahren (EITGN) zu dämpfen. Einzelne Experimente in dieser Richtung waren erfolgversprechend. Da bei diesem Verfahren die Linearisierungen J im Iterationsschritt $n+1$ vom Ergebnis des Iterationsschritts n abhängen, kann man diese nicht mehr vorberechnen. Selbst bei geschickter Programmierung beträgt die Rechenzeit bei zwei Iterationsschritten daher ca. 60 Sekunden.

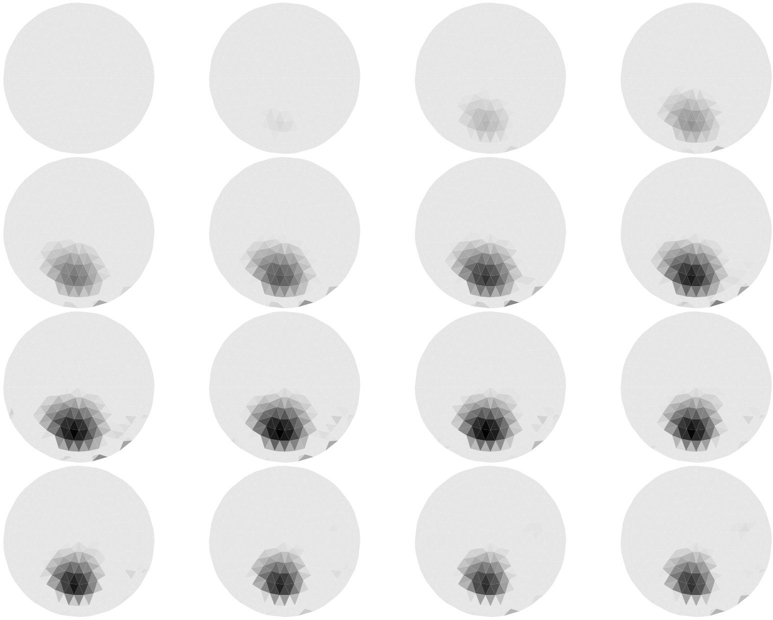

Abb. 7.15: Rekonstruktion anhand unverrauschter, synthetischer Daten. Hier sieht man das Ergebnis des Kalman-Glätters. Die Parameter wurden gemäß $a_1 = 3, a_2 = 0.001, \alpha = 0.0005$ gewählt.

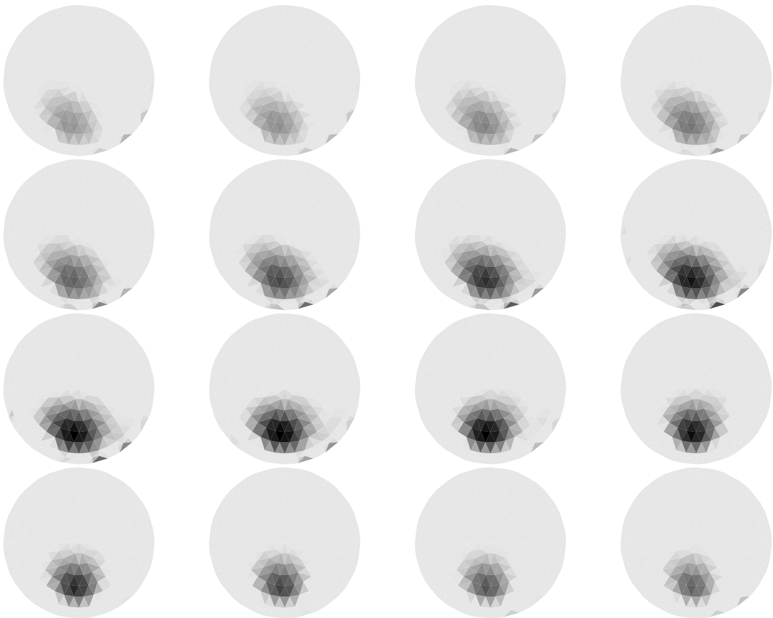

Abb. 7.16: Rekonstruktion anhand unverrauschter, synthetischer Daten. Ergebnis des Verfahrens (EITST). Es wurden $\lambda = 0.001, \mu = 0.0055$ gewählt.

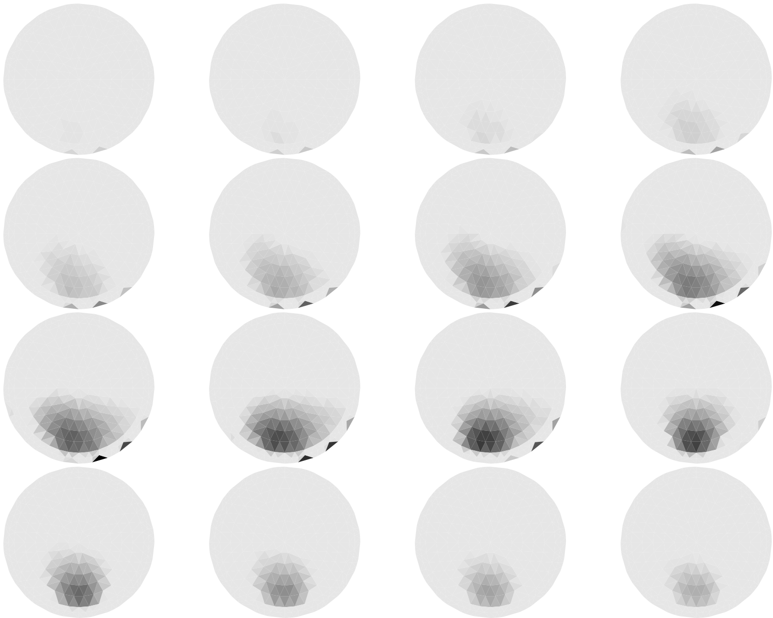

Abb. 7.17: Rekonstruktion anhand unverrauschter, synthetischer Daten. Ergebnis des Verfahrens (EITGN) vom Gauß-Newton-Typ. Es wurden $\lambda = 0.014$ und $\mu = 0.005$ gewählt.

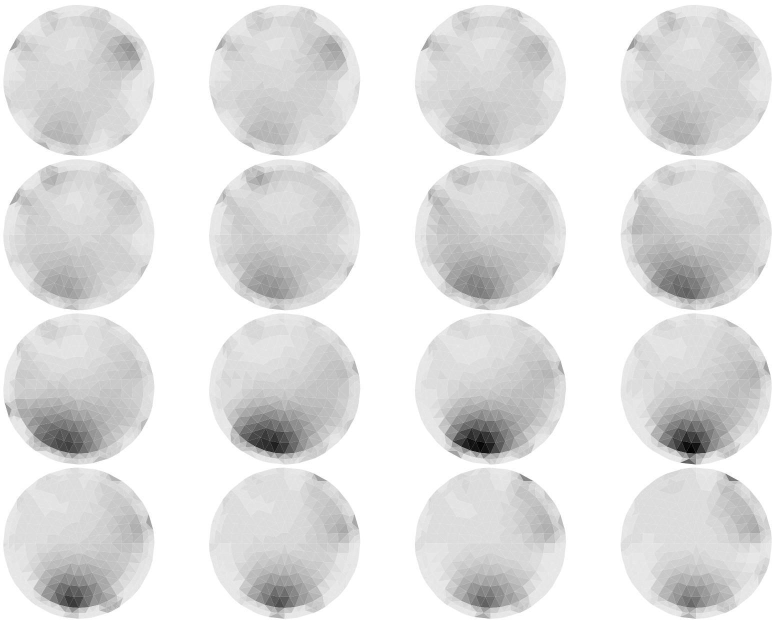

Abb. 7.18: Rekonstruktion anhand verrauschter Daten. Ergebnis des Verfahrens (EITST). Es wurde $\lambda = 0.02, \mu = 0.07$ gewählt.

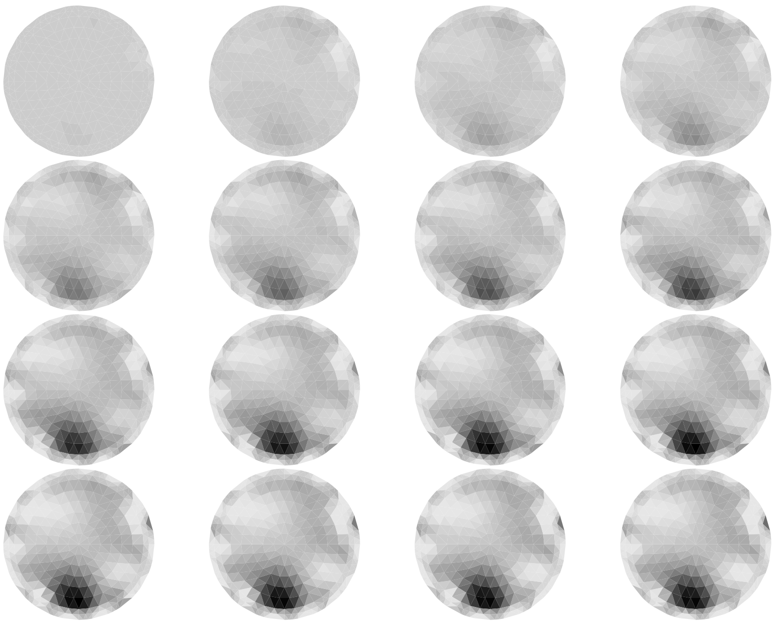

Abb. 7.19: Rekonstruktion anhand verrauschter Daten. Ergebnis des Kalman-Glätters. Es wurden $a_1 = 8, a_2 = 0.05, \alpha = 0.0005$ gewählt.

Schließlich wurden Rekonstruktionen anhand verrauschter Daten erstellt. Die Daten U

wurden hierzu mit uniform über $[-\frac{1}{2} \cdot 5\% \cdot \max |U|, \frac{1}{2} \cdot 5\% \cdot \max |U|]$ verteiltem Rauschen überlagert.

Auch hier liefert das Verfahren (EITST) bessere Ergebnisse als der Kalman-Glätter. Man vergleiche hierzu die Abbildungen 7.18 und 7.19.

7.7.2 Zweites Beispiel

Das zweite Beispielobjekt zeigt ein Sprungverhalten auf. Bis zum Zeitpunkt $L/2$ liegt der Einschluß fixiert in der oberen Hälfte des Objekts, danach "springt" dieser nach unten und verbleibt dort. Siehe hierzu Abbildung 7.20.

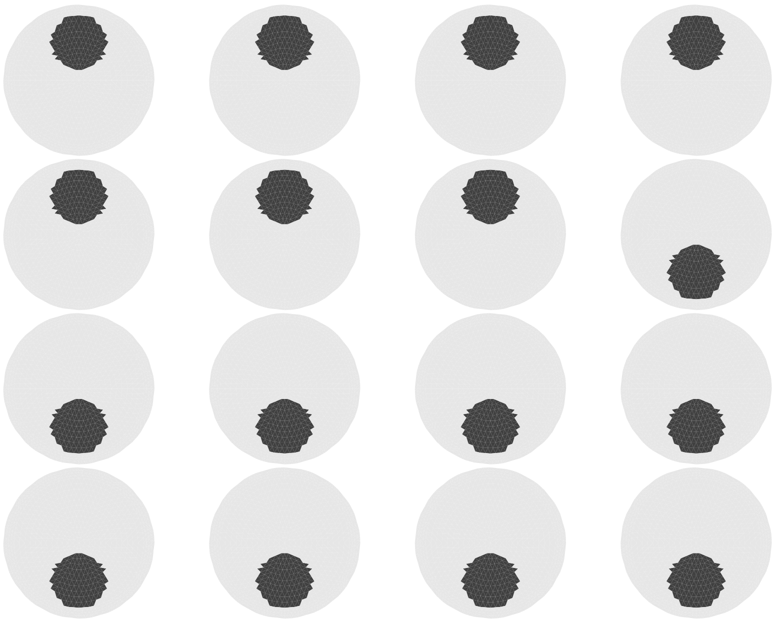

Abb. 7.20: Das zweite Beispielobjekt.

Auch hier wurden die Verfahren (EITST), (EITGN) und der Kalman-Glätter angewandt. Auf Rauschen wurde verzichtet. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 7.21, 7.22 und 7.23 zu sehen.

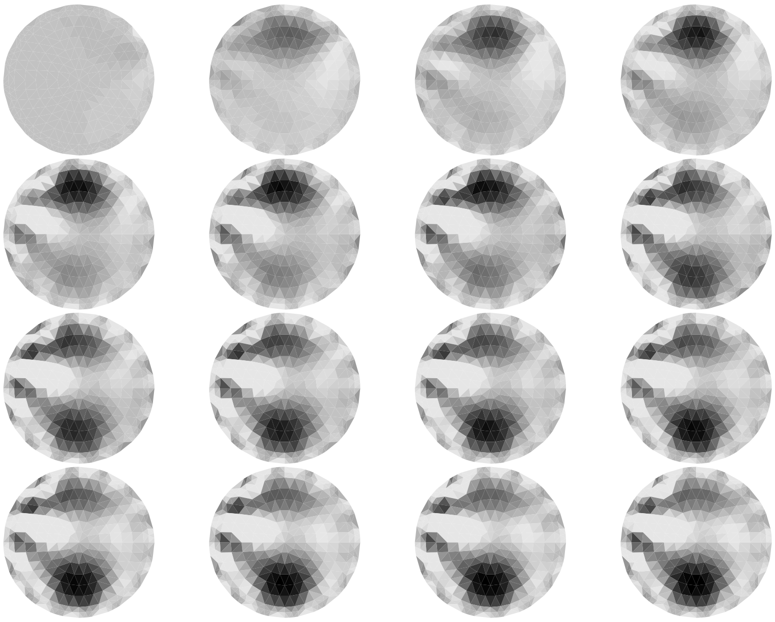

Abb. 7.21: Das Ergebnis des Kalman-Glätters. $a_1 = 8, a_2 = 0.05, \alpha = 0.0005$.

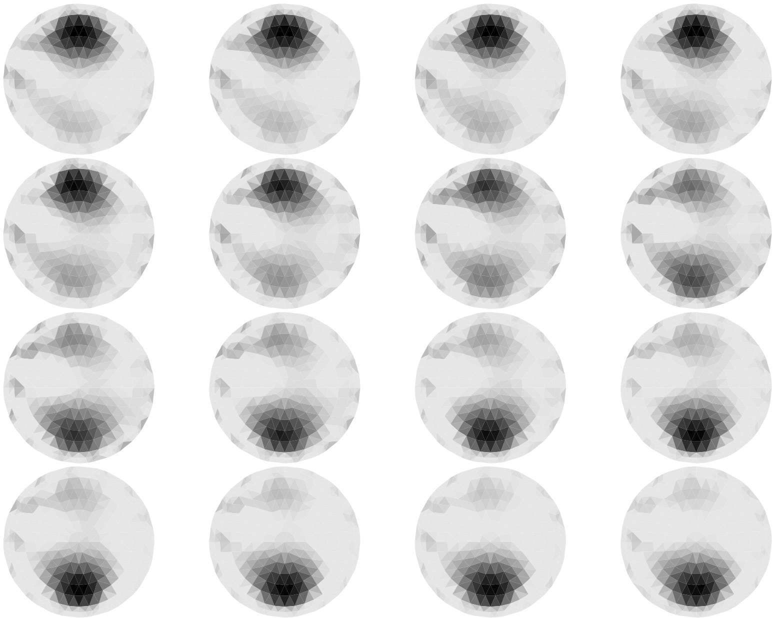

Abb. 7.22: Verfahren (EITST). $\lambda = 0.001, \mu = 0.0055$.

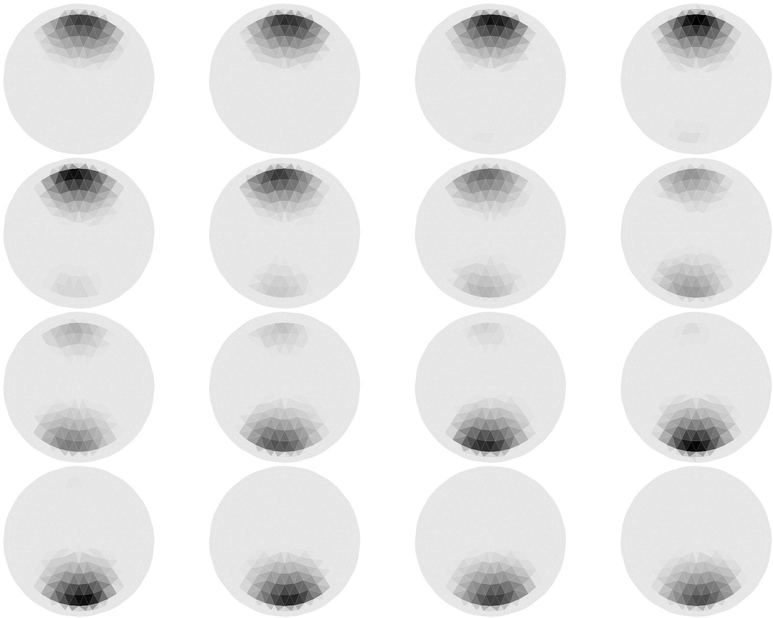

Abb. 7.23: Verfahren (EITGN). $\lambda = 0.015, \mu = 0.04$.

7.7.3 Abschließende Bewertung

Um den praktischen Wert der vorgestellten Verfahren vergleichen zu können, muß man unabhängig von der Qualität der Rekonstruktionsergebnisse auch beachten, daß der Kalman-Glätter in der vorgestellten Form von drei Parametern a_1, a_2 und α abhängt. Die Verfahren (EITGN) und (EITST) hängen hingegen nur von zwei Parametern ab. Da sämtliche Parameter bisher nur durch Probieren bestimmt werden, ist die praktische Durchführung des Kalman-Glätters ungleich schwerer als die der beiden anderen Verfahren.

Die besten Rekonstruktionsergebnisse liefert das Verfahren (EITGN) vom Gauß-Newton-Typ mit zwei Iterationsschritten. Leider ist dieses Verfahren nicht sehr stabil. Wie gesagt, kann es abhängig von λ und μ zu singulären Steifigkeitsmatrizen kommen, die zum Abbruch des Verfahrens führen. Diese Abhänigigkeit ist sehr sensitiv. Hier sind weitere Untersuchungen notwendig; wie bereits kurz angegeben, könnte eine Dämpfung des Verfahrens (EITGN) zum Ziel führen.

Nach dem momentanen Kenntnisstand ist daher das Verfahren (EITST) das Mittel der Wahl. Es liefert bessere Ergebnisse als der Kalman-Glätter in wesentlich kürzerer Zeit. Hingegen ist der Qualitätsgewinn bei Anwendung des Verfahrens (EITGN) nicht sehr stark ausgeprägt. Gerade durch die schnellere Ausführung ist es einfacher, die Parameter λ und μ durch Probieren zu bestimmen.

8 Temporale Stromdichterekonstruktion

Die Wissenschaft ist der Kapitän,
und die Praxis, das sind die Soldaten.

Leonardo da Vinci

Im folgenden werden wir uns mit inversen Quellokalisierungen und Stromdichterekonstruktionen im speziellen beschäftigen. Hierbei versucht man, von elektromagnetischen Aktivitäten außerhalb eines Objektes, auf die elektrische Aktivität innerhalb des Objektes zu schließen.

Im Gegensatz zu den Beispielanwendungen dynCT und dynEIT handelt es sich beim hier betrachteten Vorwärtsoperator um eine diskrete, lineare Formulierung.

8.1 Allgemeines zur Stromdichterekonstruktion

Eine wichtige Anwendung der Quellokalisierung ist die Bestimmung neuronaler Aktivität in Form von elektrischen Strömen anhand von EEG/MEG-Daten. Beim EEG handelt es sich um eine in der neurologischen Praxis weit verbreitete Untersuchungsmethode, bei der man elektrische Potentiale auf der Kopfoberfäche mißt. Das EEG wurde zum ersten mal 1929 angewandt [Ber29]. Eine neuere Untersuchungsmethode ist das MEG, bei dem man mangetische Flüße außerhalb des Kopfes mißt. Cohen [Coh68] war 1968 der erste, der diese Methode in der Praxis anwandte.

Die rekonstruierte elektrische Aktivität im Inneren des Kopfes läßt Schlüsse über die Gehirnaktivität zu. Diese Technik findet viele Anwendungen in der klinischen und theoretischen Medizin. Beispielsweise bei der Lokalisierung epileptischer Herde [WBH+00, HSK+00] oder beim Studium somatosensorisch evoziierter Potentiale (SEPs) [BWN96]. Eine Übersicht über Verfahren der inversen Quellokalisierung findet man in [BDF+00].

Die gleichen Techniken kann man am Herzen anwenden, wenn es zum Beispiel darum geht, vorzeitige extrasystolische Herzzschläge zu diagnostizieren [GRS89].

Beim Messen der Gehirnaktivität in Form von Elektroenzephalographie (EEG) oder Magnetoenzephalographie (MEG) hat man, im Vergleich zu Verfahren wie Positron-Emissions-

Tomographie (PET) oder Kernspintomographie (fMRI), eine sehr gute zeitliche, aber eine geringere örtliche Auflösung und ein schlechteres Signal-Rausch-Verhältnis.

Man unterscheidet zwei verschiedene Strategien zur Lösung des inversen Problems:

- Mittels Optimierungstechniken versucht man, eine kleine Anzahl von Dipolen und deren Parameter (Ort, Orientierung und Stärke) so zu berechnen, daß man eine gute Übereinstimmung zwischen gemessenen Daten und den von dieser Dipolkonfiguration erzeugten synthetischen Daten erreicht. Man spricht hierbei von **Dipolrekonstruktionen**. Siehe [WBRB99, FWW$^+$98]. Hierbei handelt es sich um ein nichtlineares Problem und Regularisierung wird hierbei durch eine kleine Anzahl von Parametern erreicht. Ein essentielles und noch nicht zufriedenstellend gelöstes Problem ist die Schätzung der Anzahl der beteiligten Dipole. Wie in der Arbeit [Lou92] bewiesen, kann man im allgemeinen nur das Kreuzprodukt aus Ort und Orientierung der Dipole bestimmen.

- Eine andere Möglichkeit der Quellokalisierung ist die **Stromdichterekonstruktion** (engl. current density reconstruction = **CDR**). Hierbei erhält man ein unterbestimmtes lineares Problem. Wie wir sehen werden ist dieses Problem schlecht gestellt. Zur Regularisierung werden daher örtliche und zeitliche a-priori Informationen eingebracht. Neu ist hierbei der zeitliche Aspekt in Form von "zeitlicher Glattheit", welche sich physiologisch motivieren läßt. Wir werden so mit Hilfe des Verfahrens ST3 ein neues Verfahren gewinnen, welches im Vergleich zu bestehenden Verfahren robuster ist, und eine Aussage über den zeitlichen Verlauf der Gehirnaktivität zuläßt. Im Gegensatz zu den beiden anderen Anwendungen des Verfahrens ST3 (dynEIT und dynCT) braucht man die Hinzunahme von "zeitlicher Glattheit" nicht, um überhaupt ein praktikables Verfahren zu gewinnen, sondern um eine in Bezug auf Rauschen robustere Methode herzuleiten.

  Eine Möglichkeit, räumliche Informationen ins Spiel zu bringen, ist z. B. das Minimum-Norm-Kriterium, [WWK93, HI94], welches sich im elektromagnetischen Kontext als minimale elektrische Energie interpretieren läßt. Einen Überblick über CDR-Techniken findet man in [FWKW99]. Je nachdem, wie man a-priori Informationen ins Spiel bringt, erhält man lineare oder auch nichtlineare Probleme.

  Das Einbringen zeitlicher a-priori Informationen ist ein neues und spärlich erforschtes Gebiet, bestehende Verfahren rekonstruieren meist elektrische Aktivität separat für jeden Zeitschritt. Eine Arbeit, welche sich in einem sehr abstrakten Kontext mit dem zeitlichen Aspekt beschäftigt, ist [Gre98].

  Stromdichterekonstruktionen unter Zuhilfenahme räumlicher und zeitlicher a-priori Informationen werden wir im folgenden als **spatio temporale Stromdichterekonstruktion (stCDR)** bezeichnen. Wie wir sehen werden, erlauben stCDR einen tieferen Einblick in die zeitliche Dynamik elektrischer Quellen.

  CDR-Techniken als Methode zur Quellokalisierung werden immer wichtiger, da das in der Praxis bei Dipolrekonstruktionen anfallende Problem der Bestimmung der Anzahl der beteiligten Dipole umgangen wird.

8.2 Das EEG/MEG-Vorwärtsmodell

Die fundamentale Gleichung welche das Zusammenspiel einer elektrischen Quelle j und dem daraus resultierenden elektrischen Feld Φ beschreibt, ist die Poissongleichung in Verbindung mit Neumann-Randwerten:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\sigma \nabla \Phi) &= \operatorname{div} j \qquad \text{in} \quad \Omega \\ \sigma \frac{\partial \Phi}{\partial n} &= 0 \qquad \text{in} \quad \Gamma = \partial \Omega. \end{aligned} \tag{8.85}$$

Hierbei ist σ der Leitfähigkeitstensor und die offene und beschränkte Menge Ω beschreibt die Geometrie des Kopfes. n ist der nach außen gerichtete Normalenvektor in $\partial\Omega$. Dieses Modell bezeichnet man als quasi-stationär, da es für jeden Zeitschritt gültig ist, ohne selbst von der Zeit abzuhängen.

Wir bezeichen $\Gamma_0 \subset \Gamma$ als EEG-Meßfläche und Γ_1 mit $\Gamma_1 \cap \bar{\Omega} = \emptyset$ als MEG-Meßfläche.

Das EEG-Vorwärtsmodell kann wie folgt beschrieben werden:

$$\begin{array}{cccccccc} A_E : (H_0^1(\Omega))^3 & \xrightarrow{\operatorname{div}} & L^2(\Omega) & \xrightarrow{S} & H^1(\Omega) & \xrightarrow{\gamma} & L^2(\Gamma_0) \\ j & \longmapsto & J = \operatorname{div} j & \longmapsto & \Phi & \longmapsto & \Phi|\Gamma_0 \end{array} \tag{8.86}$$

Hierbei ist S der Operator, welcher $\operatorname{div} j$ auf die schwache Lösung der Gleichung (8.85) abbildet. γ ist der Spuroperator [Hac86, Aub99] von Ω nach Γ_0.

Wir definieren

$$(Tf)(x) = \int_\Omega f(y) \times \frac{x-y}{|x-y|^3}\, dy. \tag{8.87}$$

Nach dem Gesetz von Biot-Savart erhält man nun die MEG-Meßwerte in Form magnetischer Flüsse als

$$B(x) = \langle T(j + \sigma\nabla\Phi)(x), n_x \rangle, \tag{8.88}$$

wobei $x \in \Gamma_1$ und n_x der nach außen gerichtete Normalenvektor in x ist. Insgesamt läßt sich das MEG-Vorwärtsmodell skizzieren als

$$\begin{array}{cccccccccc} A_M : (H_0^1(\Omega))^3 & \xrightarrow{\operatorname{div}} & L^2(\Omega) & \xrightarrow{S} & H^1(\Omega) & \xrightarrow{j+\sigma\nabla\cdot} & (L^2(\Omega))^3 & \xrightarrow{\langle T\cdot, n_x\rangle} & L^2(\Gamma_1) \\ j & \longmapsto & \operatorname{div} j & \longmapsto & \Phi & \longmapsto & j + \sigma\nabla\Phi & \longmapsto & B \end{array} \tag{8.89}$$

Satz 8.2.1 Die Operatoren

$$A_E : (H_0^1(\Omega))^3 \to L^2(\Gamma_0)$$

und

$$A_M : (H_0^1(\Omega))^3 \to L^2(\Gamma_1)$$

sind kompakt und haben nichttriviale Nullräume.

Beweis: Der Spuroperator γ ist kompakt bezüglich der gewählten Räume [Aub99]. T ist kompakt, da der zugrundeliegende Kern in (8.87) wegen $\Gamma_1 \cap \bar{\Omega} = \emptyset$ stetig ist. Die verbleibenden Operatoren in (8.86) und (8.89) sind nach [Hac86] stetig. Daher sind A_M und A_E kompakt. Da der div-Operator einen nichttrivialen Nullraum hat, gilt das gleiche für A_E und A_M.

■

Satz und Defnition 8.2.2 Die Probleme

$$A_E j = \Phi_0 \qquad \text{beziehungsweise} \qquad A_M j = B_0$$

und das kombinierte Problem

$$A_E j = \Phi_0 \wedge A_M j = B_0$$

bezeichnet man als **Stromdichteprobleme**. Diese sind schlecht gestellt. Der Schluß von Φ_0 bzw. B_0 auf $j \in H_0^1(\Omega)$ bezeichnet man als **Stromdichterekonstruktion**.

8.3 Die Leadfield-Matrix

Um das Problem der Stromdichterekonstruktion in diskreter Form lösen zu können, unterteilen wir einen Teil von Ω in Teilgebiete Ω_i, so daß $\dot{\bigcup}\Omega_i \subset \Omega$. Wir wählen außerdem $p_i \in \Omega_i$. Die Menge $\{p_i | 1 \leq i \leq N\}$ wird auch **Einflußraum** genannt. Wir gehen weiter davon aus, daß n Meßpunkte $\xi_\nu, 1 \leq \nu \leq n$ auf $\Gamma_0 \cup \Gamma_1$ vorliegen. Die obige Unterteilung von Ω benutzen wir nun, um eine Stromdichte j zu diskretisieren. Genauer gesagt, stellen wir die vektorielle Größe j als

$$j = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=0}^{2} \alpha_{i+kN} e_{i,k}$$

dar, mit Basisfunktionen

$$e_{i,k} = \chi_{\Omega_i} \bar{e}_k,$$

wobei $\bar{e}_k$ der k-te kartesische Einheitsvektor ist. Kennen wir nun die $n \times 3N$ Matrixeinträge

$$L_{\nu,i+kN} := A_{M/E} e_{i,k}(\xi_\nu), \qquad 1 \leq \nu \leq n, 1 \leq i \leq N, 0 \leq k \leq 2,$$

so erhalten wir $A_{M/E}j$ wegen der Linearität von $A_{M/E}$ als Matrix-Vektorprodukt mittels

$$\begin{aligned} A_{M/E}j(\xi_\nu) &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=0}^{2} \alpha_{i+kN} A_{M/E} e_{i,k}(\xi_\nu) \\ &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=0}^{2} \alpha_{i+kN} L_{\nu,i+kN} \\ &= (L\alpha)_\nu, \end{aligned}$$

Das heißt also, daß wir das Vorwärtsmodell in einer diskreten Version berechnen können, sobald wir die Einträge der Matrix L kennen. Um diese numerisch zu berechnen, bedient man sich in der Praxis im Falle von anisotropem σ der Finite-Element-Methode (FEM) [BKF$^+$97] oder im Falle vom isotropem σ der Randelement-Methode (BEM) [FDWW98]. Geht die damit verbundene Diskretisierung von Ω mit der Unterteilung in die einzelnen Ω_i Hand in Hand, so sind die Einträge von L einfach zu berechnen. In der Praxis ist es nun aber so, daß man aus diversen Gründen Ω als nicht konsistent mit dem Finite-Elemente-Netz wählt. Daher approximiert man die Einträge von L in der wie folgend skizzierten Art und Weise. Wir benutzen die Greensche Funktion $G(x, y)$ um das Vowärtsmodell $A_{M/E}$ zu beschreiben. Es gilt

$$\begin{aligned} A_{M/E}e_{i,k}(\xi_\nu) &= \int_\Omega G(x,\xi_\nu) e_{i,k}(x)\,dx \\ &= \int_{\Omega_i} G(x,\xi_\nu)\bar{e}_k\,dx \\ &\doteq \mathrm{vol}(\Omega_i)\, G(p_i,\xi_\nu)\,\bar{e}_k \\ &= \mathrm{vol}(\Omega_i) \int_\Omega G(x,\xi_\nu)\delta(p_i - x)\bar{e}_k\,dx \\ &= \mathrm{vol}(\Omega_i) A_{M/E}(\delta_{p_i}\bar{e}_k). \end{aligned}$$

Das heißt, man leitet Dipole $\delta_{p_i}\bar{e}_k$ in die rechte Seite der Poissongleichung (8.85) ein, um das Vorwärtsmodell zu approximieren. Über die numerische Realisierung findet man mehr in [BKF$^+$97].

In der Praxis erhält man Ω und σ anhand vom Kernspin(MRI)-Bildern. Es gibt in der neueren Zeit auch Bemühungen aus solchen Bildern nicht nur skalares σ zu bestimmen, sondern mittels sogenannter Diffusionstomographie auch tensorielles σ. Siehe dazu [WRB$^+$01]

Analytische Formeln zur Berechnung des Vorwärtsmodells kennt man nur für vereinfachte Geometrien, wie z. B. für konzentrische Sphären oder Ellipsen [Sre94, Lou92].

8.4 Bestehende CDR-Methoden

Wie bereits erwähnt, unterteilt man Quellrekonstruktionsverfahren in Dipolrekonstruktions-Methoden und CDR-Methoden. Letztere versuchen das Problem $Lj = m$ unter Zuhilfenahme von a-priori-Informationen zu lösen. Dieses Problem ist in der Praxis unterbestimmt. Eine Möglichkeit, das Problem anzugehen, ist Tikhonov-Phillips Regularisierung [Lou89, BKF+97, EHN96]:

$$j = \operatorname{minarg}\left\{\|Lj - m\|_p^p + \lambda^2\|Rj\|_q^q\right\}. \tag{8.90}$$

R ist ein sogenanter räumlicher Regularisierungsoperator. Da die EEG-/MEG-Sensoren je nach Abstand der Quellen unterschiedlich empfindlich reagieren, was sich in der Skalierung der Spalten von L ausdrückt, benutzt man meist für R eine sogenannte Tiefenwichtungsmatrix W, siehe [FWKW99]. $p = q = 2, R = W$ führt zu Minimum-Norm Least-squares Lösungen. $p = q = 2, R = \triangle$ wird als **LORETA-Methode** [PM94] bezeichnet. Im ersten Fall berücksichtigt man die sogenannte räumliche Glattheit nullter Ordnung (**zero order spatial smoothness**), im zweiten die räumliche Glattheit zweiter Ordnung (**second order spatial smoothness**). $\triangle$ ist eine diskrete Version des Laplace-Operators Δ. Wie man $\triangle$ implementieren kann, findet man in [KKSV00]. In beiden Fällen erhält man wegen $p = q = 2$ lineare Probleme. Diese beiden Verfahren berücksichtigen keine zeitliche Informationen, die Rechnungen werden für jeden Zeitschritt getrennt ausgeführt.

8.5 Spatio-temporale Stromdichterekonstruktionen

Wir gehen nun davon aus, daß die Daten m als Funktion der Zeit also als $m(t)$ gegeben sind. Die damit zusammenhängende Stromdichte j als Lösung von (8.85) ist somit auch zeitabhängig. σ und Ω sind zeitunabhängig und in (8.85) treten keine Zeitableitungen auf. Das Modell wird daher auch als **quasi-stationär** bezeichnet.

Eine Kopplung der verschiedenen Zeitschritte wird durch die physiologisch motivierte Annahme der "zeitlichen Glattheit" erreicht.

Wir gehen von Daten m_l und Stromdichten j_l zu Zeitpunkten $t_l, 1 \le l \le T$ aus.

Ansatz eines Verfahrens ist dann die folgende Minimierungsaufgabe:

$$(j_1, \ldots, j_T) = \operatorname{minarg}\left\{\sum_{i=1}^{T}\|Lj_i - m_i\|_2^2 + \lambda^2\sum_{i=1}^{T}\|Rj_i\|^2 + \mu^2\sum_{i=1}^{T-1}\|j_{i+1} - j_i\|_2^2\right\}. \tag{8.91}$$

Diese Modell bezeichnen wir als spatio-temporale CDR-Methode. Der Vorwärtsoperator L ist zeitunabhängig. Da aber hier der wichtige Operator R auftritt, sind die äquivalenten Verfahren ST1C und ST3C so nicht anwendbar.

Schreibt man die Mimierungsaufgabe (8.91) mit den folgenden Bezeichnungen

$$\begin{aligned} L_T &= \operatorname{blockdiag}(L, \ldots, L) \\ R_T &= \operatorname{blockdiag}(R, \ldots, R) \\ j &= (j_1^\top, \ldots, j_T^\top)^\top \\ m &= (m_1^\top, \ldots, m_T^\top)^\top, \end{aligned}$$

und den Bezeichnungen aus Kapitel 3.3 wie folgt um

$$j = \operatorname{minarg}\{\|L_T j - m\|^2 + \lambda^2 \|R_T j\|^2 + \mu^2 \|Bj\|^2\},$$

und berücksichtigt $\nabla \|Ax - b\|^2 = 2A^\top (Ax - b)$, so erhält man die zu lösende Normalengleichung

$$(L_T^\top L_T + \lambda^2 R_T^\top R_T + \mu^2 B^\top B) j = A^\top m.$$

Diese Gleichung hat die Größe $3NT \times 3NT$. Leider greifen die in den Kapiteln 2.10.2–4.4 vorgestellten Methoden nicht, um ein Verfahren kleinerer Ordnung $nT \times nT$ zu erhalten, der beliebige Regularisierungsoperator R_T läßt dies nicht zu.

Da die auf der linken Seite im obigen Gleichungssystem auftretende Matrix positiv definit ist, kann das relativ effiziente cg-Verfahren angewendet werden. Eine Effizienzsteigerung ist möglich, wenn man das Matrixprodukt $L_T^\top L_T j$ wie folgt berechnet: Man ordnet j zu einer Matrix $J = (j_1 \,|\, \ldots \,| j_T)$ um (was zum Beispiel in FORTRAN ohne Kosten geschieht, da j von vorneherein im Speicher richtig organisiert vorliegt), berechnet $M = L_T^\top L_T J$ mit Kosten $9N^2T$ und ordnet $M = (M_1 \,|\, \ldots \,|\, M_T)$ wieder zu einem großen Vektor $m = (M_1^\top, \ldots M_T^\top)^\top$ (in Fortran wiederum ohne Kosten) um. Die direkte Auswertung von $L_T^\top Lj$ würde hingegen einen Aufwand von $9N^2T^2$ haben und somit um den Faktor T langsamer sein. Bei typischen T im Bereich fünfzig bis einige Hundert ist dies ein wichtiger Faktor. Die oben dargestellte, optimierte Version der Berechnung von $L_T^\top L_T j$ ist je nach Prozessor auch auf Maschinenebene gut zu optimieren. Sogenannte Level-3-Routinen der weitverbreiteten Programmbibliothek BLAS machen zum Beispiel davon Gebrauch und liegen für verschiedene Prozessoren in speziell optimierter Version vor.

8.6 Simulationsrechnungen

8.6.1 Das Volumenleiter-Modell

Um die Ergebnisse des zeitlich ungekoppelten Verfahrens (8.90) und die des stCDR-Verfahrens (8.91) besser vergleichen zu können, wählen wir ein einfaches Volumenleiter-Modell: wir betrachten ein dreidimensionales Problem mit zweidimensionalem Einflußraum. Dieses Modell ist recht nahe an der Praxis (berücksichtigt man z. B. die Hirnoberfläche = Kortex als Einflußraum, so ist dieser auch zweidimensional) und es erlaubt einen einfacheren Vergleich der graphisch dargestellten Rekonstruktionsergebnisse als im Falle eines dreidimensionalen Einflußraumes.

Der Einflußraum besteht aus einem äquidistanten Gitter der Größe 10×10 mit Abmessungen 10×10 und Mittelpunkt $(5.5, 5.5, 0.0)^\top$.

Die EEG-Meßfläche besteht aus einem 9×9-Gitter, welches parallel zur $x - y$-Ebene angeordnet ist, und den Mittelpunkt $(5.5, 5.5, 2)^\top$ hat. Siehe dazu Abbildung 8.24.

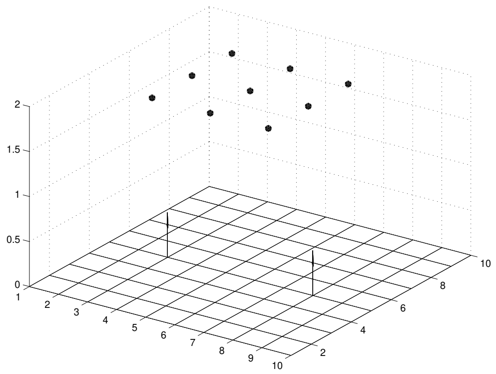

Abb. 8.24: Skizze des Modellproblems.

Wir haben konstante Leitfähigkeit σ in ganz $\mathbb{R}^3$ gewählt. Daher erhält man die Leadfieldmatrix L mittels analytischer Formeln [Vog95]

$$\begin{aligned} L_{i,j} &= \frac{1}{4\pi\sigma} \frac{r_{i,1} - p_{j,1}}{\|r_i - p_j\|^3} \\ L_{i,j+N} &= \frac{1}{4\pi\sigma} \frac{r_{i,2} - p_{j,2}}{\|r_i - p_j\|^3} \\ L_{i,j+2N} &= \frac{1}{4\pi\sigma} \frac{r_{i,3} - p_{j,3}}{\|r_i - p_j\|^3}. \end{aligned}$$

$r_i \in \mathbb{R}^3$ ist hierbei die Postion des i-ten EEG-Sensors, p_j ist die Position des j-ten Gitterpunktes im Einflußraum.

Dadurch, daß die Abstände von Einflußpunkten und Sensoren relativ wenig schwankt, kann auf eine Tiefenwichtungsmatrix im folgenden verzichtet werden.

8.6.2 Beispielrechnungen

Zwei gleichorientierte Dipole mit Moment $(0, 0, 1)^\top$ wurden in $(3, 5, 0)^\top$ und $(8, 5, 0)^\top$ plaziert. Sie sind in Abbildung 8.24 eingezeichnet. Diesen Dipolen wurde ein gaußglockenförmiger zeitlicher Aktivitätsverlauf gemäß

$$q(t) = q_0 \exp\left\{ -\frac{(t - t_p)^2}{w^2} \right\}$$

mit Maximum in den Zeitschritten $t_p = 5$ (Dipol 1) und $t_p = 9$ (Dipol 2) zugewiesen. w wurde zu 2.5 gewählt. Siehe Abbildung 8.25.

Die Simulationen wurden für 16 Zeitschritte ausgeführt.

Zur Wahl des Regularisierungsparameters λ im Verfahren (8.90) wurden die Daten des Zeitschritts mit maximaler Amplitude berücksichtigt. Es kam das L-Kurven Kriterium zur

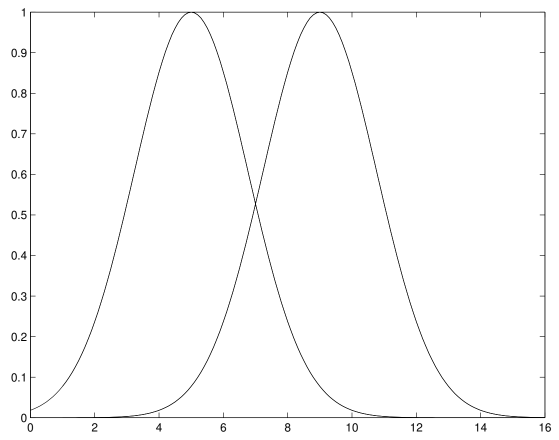

Abb. 8.25: Die Aktivitätsverläufe der Dipole.

Anwendung [Wag98, Han94]. In (8.90) wurde $p = q = 2$ gewählt, die Minimierungsaufgabe kann daher effizient über eine Normalengleichung gelöst werden.

Da wir auf eine Tiefenwichtung verzichten können, kommen für die Lösung der spatio-temporalen Aufgabe (8.91) die Verfahren ST1C und ST3C in Frage. Diese sind ihrer Laufzeit gleich effizient, in den Laufzeitbeschreibungen haben die Terme höchster Ordnung die gleichen Vorfaktoren.

In den folgenden Abbildungen sieht man Kontur-Plots der Stromdichte $\|j(p,t)\|_{\mathbb{R}^3}$. Die kleinen Quadrate markieren die ursprünglichen Quellpositionen.

In den Abbildungen 8.26 und 8.27 wurden rein synthetische Daten benutzt um zeitlich gekoppelte und ungekoppelte Lösungen zu vergleichen. Die zeitlich gekoppelte Lösung weist eine geringfügig bessere räumliche Genauigkeit auf.

In den folgenden Simulationen wurden die Daten mit uniform verteiltem Rauschen mit einer Amplitude von 30% der Maximalamplitude der Daten überlagert. Die Stärke des gewählten Rauschens ist für bekannte praktische Meßanordnungen realistisch. In den Abbildungen 8.28–8.30 sind dazugehörende Rekonstruktionen zu sehen. In Abbildung 8.29 wurde $\mu = 15$ gewählt, um zu zeigen, wie sich eine sehr starke zeitliche Kopplung auswirkt.

Die in Abbildung 8.28 zu sehende stCDR-Rekonstruktion ist wesentlich weniger durch das Rauschen beeinträchtigt, als die zeitlich ungekoppelte Rekonstruktion in Abbildung 8.30.

In den Abbildungen 8.31 und 8.32 wurden anhand der Rekonstruktionen die Aktivierungsverläufe bestimmt. Dazu wurde die Amplitude des Einflußpunktes maximaler Stromdichte genommen. Wie unschwer zu sehen ist, erlaubt das stCDR-Verfahren eine recht gute Rekonstruktion des realen Aktivitätsverlaufes, das Tikhonov-Phillips-Verfahren (8.91) läßt nur sehr schlechte Rückschlüsse zu. Das stCDR-Verfahren gibt daher nicht nur einen Einblick in die räumliche Anordnung von Gehirnaktivität, sondern auch in den, von Medizinern als sehr wichtig erachteten, zeitlichen Verlauf.

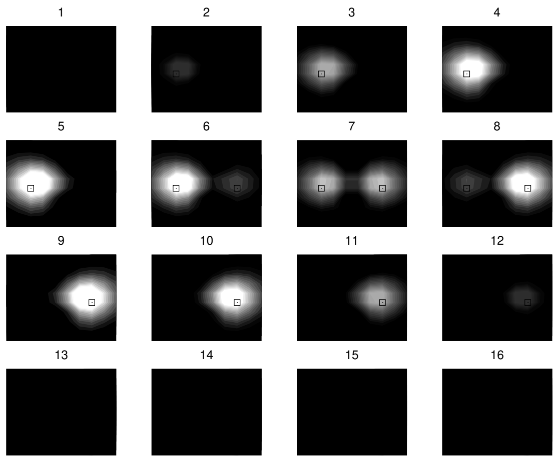

Abb. 8.26: stCDR: $\lambda^2 = 0.01, \mu^2 = 0.2$. Unverrauschte Daten.

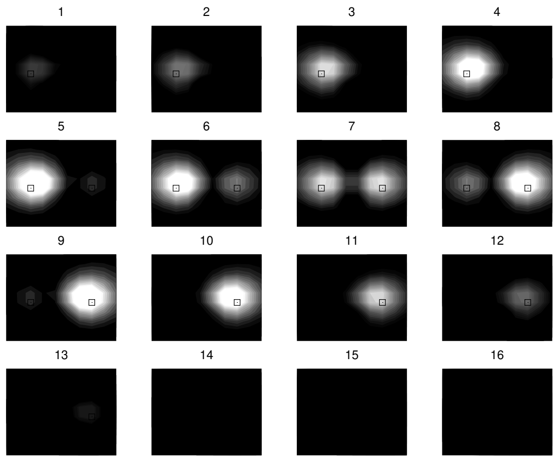

Abb. 8.27: Zeitlich ungekoppelte Rekonstruktion anhand (8.90). $\lambda^2 = 0.01$. Unverrauschte Daten.

Zum Schluß wählen wir eine weiter Methode zur zeitlichen Rekonstruktion: wir glätten die verrauschten Daten mit einem Savitzky-Golay-Filter (auch 'least-squares-filter' genannt) der Ordnung 3 und Länge 5, [SG64, Ham83]. Dann benutzen wir (8.91), um eine zeitlich ungekoppelte Stromdichteverteilung zu rekonstruieren. Die Ergebnisse in Abbildung 8.33 sind besser als im ungeglätteten Fall, aber nicht so gut wie die Ergebnisse des stCDR-Verfahrens.

Zum systematischen Vergleich von zeitlich gekoppelten und ungekoppelten Lösungen führen wir zwei verschieden Maße ein, um Genauigkeiten zu messen:

- Wir vergleichen die exakte Lage der Dipole mit der Lage der lokalen Maxima der Re-

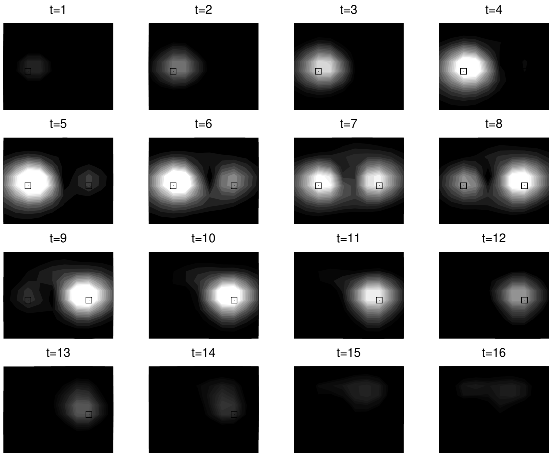

Abb. 8.28: stCDR-Rekonstruktion. $\lambda^2 = 2.0, \mu^2 = 1.5$. 30%-igem uniform verteiltes Rauschen.

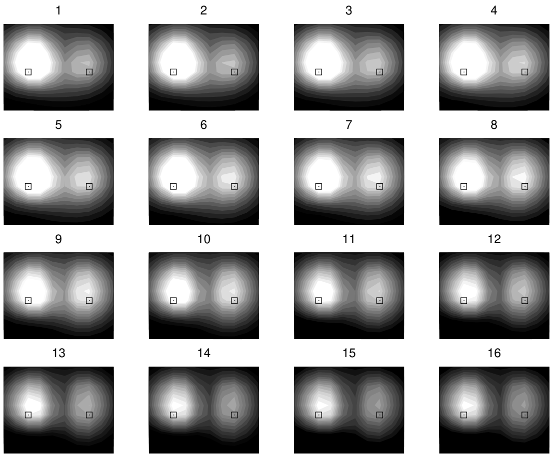

Abb. 8.29: stCDR-Rekonstruktion mit sehr hoher zeitlicher Kopplung: $\lambda^2 = 2.0, \mu^2 = 15$. 30%-igem uniform verteiltes Rauschen.

konstruktionen. Die Abhängigkeit dieses Maßes in Abhängigkeit zum Rauschniveau ist in Abbildung 8.34 zu sehen.

- Wir berechneten die Korrelation des wahren Aktivitätsverlaufes mit dem, anhand der Rekonstruktionen berechneten, Aktivitätsverlaufes. In Abbildung 8.35 sehen wir die Abhängigkeit vom Rauschniveau.

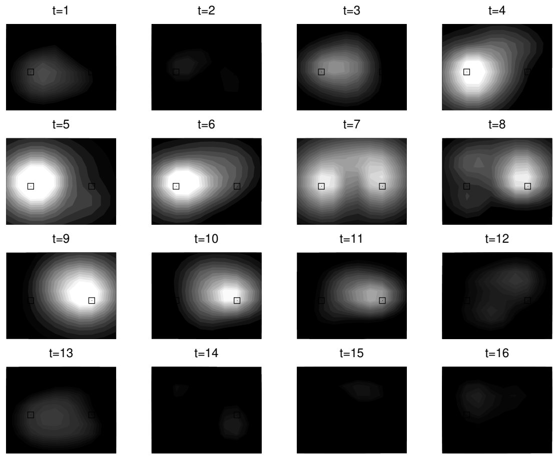

Abb. 8.30: Rekonstruktion ohne zeitliche Kopplung. $\lambda^2 = 2.0$. 30%-igem uniform verteiltes Rauschen.

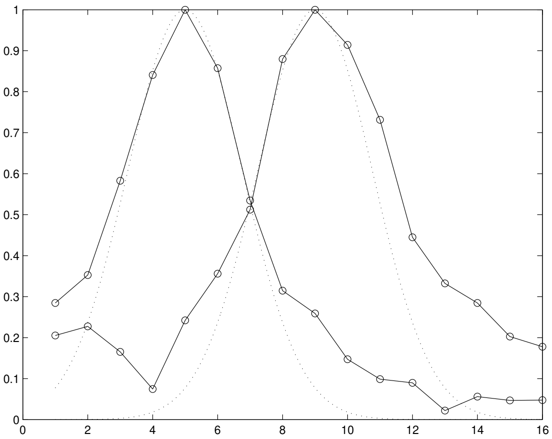

Abb. 8.31: Aktivitätsverlauf anhand stCDR-Rekonstruktion. $\lambda^2 = 2.0, \mu^2 = 1.5$. 30%-igem uniform verteiltes Rauschen.

8.6.3 Abschließende Bewertung

Anhand eines einfachen Modellproblems konnten wir zeigen, daß die Hinzunahme von zeitlichen a-priori Informationen in bestehende CDR-Verfahren zu einer signifikanten Zunahme an zeitlicher und räumlicher Auflösung führt. Besonders im Falle verrauschter Daten ist der Unterschied zwischen zeitlich gekoppelten und ungekoppelten Rekonstruktionen immens. Zeitlich gekoppelte Lösungen sind zum einen in der Lage, verschiedene elektrische Quellen besser zu separieren, zum anderen lassen sie genauere Rückschlüsse auf den Aktivitätsverlauf zu.

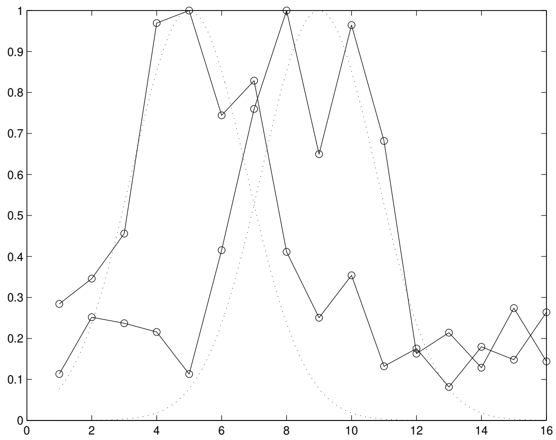

Abb. 8.32: Aktivitätsverlauf anhand einer Rekonstruktion ohne zeitliche Kopplung. $\lambda^2 = 2.0$. 30%-igem uniform verteiltes Rauschen.

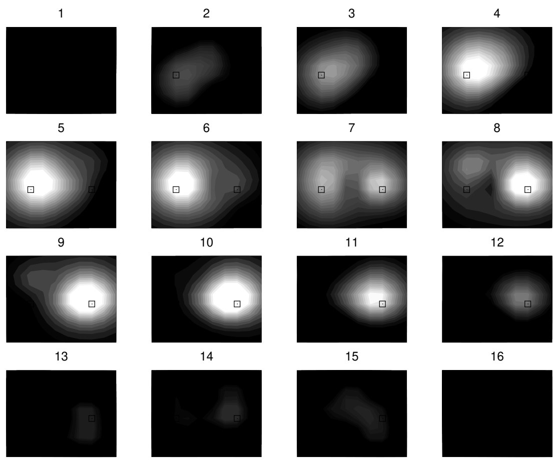

Abb. 8.33: Rekonstruktion ohne zeitliche Kopplung. Die mit 30%-igem uniform verteiltem Rauschen überlagerten Daten wurden mit einem Savitzky-Golay-Filter geglättet. $\lambda^2 = 2.0$.

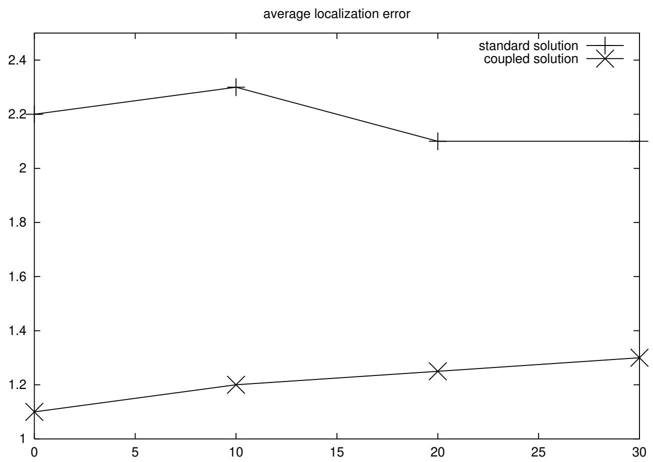

Abb. 8.34: Räumliche Genauigkeit zeitlich gekoppelter und ungekoppelter Rekonstruktionen.

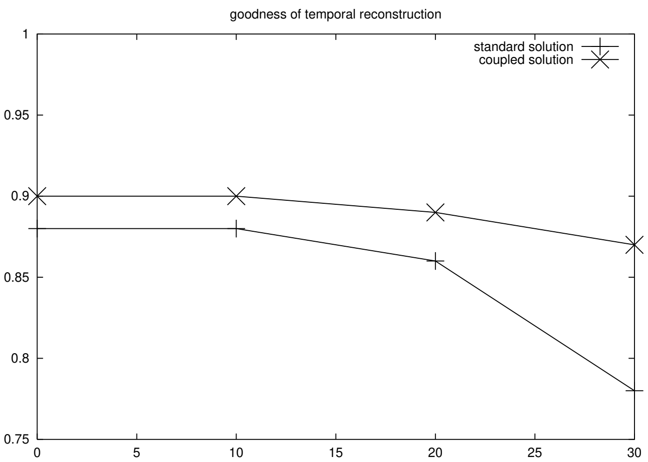

Abb. 8.35: Zeitliche Genauigkeit zeitlich gekoppelter und ungekoppelter Rekonstruktionen.

Literaturverzeichnis

Wer in der Zukunft lesen will,
muß in der Vergangenheit blättern.

André Malraux

[Ado95] H.M. Adorf. Hubble space telescope image restoration in its fourth year. *Inverse Problems*, 11(4):639–, 1995.

[And99] E. Anderson. *LAPACK Users Guide*. SIAM, Philadelphia, 1999.

[AR98] G. Alessandrini and L. Rondi. Stable determination of a crack in a planar inhomogenous conductor. *SIAM J. Math. Anal.*, 30:326–40, 1998.

[Aub99] J.-P. Aubin. *Applied Functional Analysis*. Wiley, 1999.

[BDF+00] H. Buchner, F. Darvas, A. Friedrich, M. Fuchs, A. Knepper, G. Knoll, B. Meyer-Ebrecht and A. Rienaecker. Localization of the electromagnetic activity of the brain in its individual anatomy. In *Future Generation Computer Systems*, 2000.

[Ber29] H. Berger. Über das Elektroenzephalogramm des Menschen. *Archiv für Psychiatrie und Nervenkrankheiten*, 87:527–570, 1929.

[BKF+97] H. Buchner, G. Knoll, M. Fuchs, A. Rienaecker, R. Beckmann, M. Wagner, J. Silny and J. Pesch. Inverse localization of electric dipole current sources in finite element models of the human head. *Electroencephalography & Clinical Neurophysiology*, 102:267–278, 1997.

[BS94] C.B. Brenner and L.R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, 1994.

[BWN96] H. Buchner, T.D. Waberski and J. Noth. Generators of early cortical somatosensory evoked potentials in men. In Kimura and Shibasaki, editors, *Recent Advances in Clinical Neurophysiology*, pages 630–636. Elsevier Amsterdam, 1996.

[CIN99] M. Cheney, D. Isaacson and J.C. Newell. Electrical impedance tomography. *SIAM Rev.*, 41:85–101, 1999.

[CING89] G. Cheng, D. Isaacson, J.C. Newell and A. Gisser. Electrode models for electric current computed tomography. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 36:918–24, 1989.

[CK92] D. Colton and R. Kress. *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory.* Springer, 1992.

[Coh68] P. Cohen. Magnetencephalography: Evidence of magnetic fields produced by alpha-rythm currents. *Science*, 161:784–786, 1968.

[D+93] A. Dijkstra et al. Review: clinical applications of electrical impedance tomography. *J. Med. Eng. Technol.*, 17:89–98, 1993.

[Der96] G. Dertnig. *Stabile und schnelle Algorithmen zur Approximation von Parametern eines elliptischen Differentialoperators.* PhD thesis, Universität des Saarlandes, Lehrstuhl A.K.Louis, PF 151150, 66041 Saarbrücken, 1996.

[DH93] P. Deuflhard and A. Hohmann. *Numerische Mathematik I.* de Gruyter, 1993.

[EHN96] H.W. Engl, M. Hanke and A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems.* Kluwer Academic Publishers, 1996.

[Eng93] K.-J. Engel. On the diagonalization of certain operator matrices related to volterra equations. *Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics*, 59:1–, 1993.

[FDWW98] M. Fuchs, D. Drenckhahn, H.A. Wischmann and M. Wagner. An improved boundary element method for realistic volume-conductor modelling. *IEEE Trans Biomed Eng*, 45:980–997, 1998.

[FV89] A. Friedman and M. Vogelius. Determining cracks by boundary measurements. *Indiana Univ. Math. J.*, 38:527–56, 1989.

[FWKW99] M. Fuchs, M. Wagner, T. Köhler and H.A. Wischmann. Linear and nonlinear current density reconstructions. *Clin. Neurophysiol.*, 16(3):267–295, 1999.

[FWW+98] M. Fuchs, M. Wagner, H.A. Wischmann, T. Köhler, D. Drenckhahn and H. Buchner. Improving source reconstructions by combining bioelectric and biomagnetic data. *Clin. Neurophysiol.*, 107:93–111, 1998.

[GA93] M.S. Grewal and A.P. Andrews. *Kalman Filtering.* Prentice Hall, 1993.

[GGCM77] J. Gambarelli, G. Guerinel, L. Chevrot and M. Mattei. *Ganzkörper Computer-Tomographie.* Springer, 1977.

[GLAM92] J.D. Gardiner, A.J. Laub, J.J. Amato and C.B. Moler. Solution of the sylvester matrix equation $AXB^\top + CXD^\top = E$. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 18(2):223–238, 1992.

[Gre98] F. Greensite. Second order approximations of the pseudoinverse for operator deconvolutions and families of ill-posed problems. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, pages 1–16, 1998.

[GRS89] R.M. Gulrajani, F.A. Roberge and P. Savard. The inverse problem of electrocardiography. In Macfarlane and Veitch Lawrie, editors, *Comprehensive Electrocardiology*, pages 237–288. Pergamon, 1989.

[GvL96] G.H. Golub and C.F. van Loan. *Matrix Computations*. John Hopkins University Press, 3rd edition, 1996.

[Hac86] W. Hackbusch. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Teubner, Stuttgart, 1986.

[Ham83] R.W. Hamming. *Digital Filters*. Prentice Hall, 2nd edition, 1983.

[Han94] P.C. Hansen. Regularization tools. *Numerical Algorithms*, 6:1–35, 1994.

[Her80] G.T. Herman. *Image Reconstruction from Projections. The Fundamentals of Computerized Tomography*. Academic Press, 1980.

[HI94] M.S. Hämälinen and R.J. Ilmoniemi. Interpreting magnetic fields of the brain: minimum norm estimates. *Med Biol Eng Comput*, 32:35–42, 1994.

[HSK+00] G. Herrendorf, B.J. Steinhoff, R. Kolle, J. Baudewig, T.D. Waberski, H. Buchner and W. Paulus. Dipole source analysis in a realistic head model in patients with focal epilepsy. *Epilepsia*, 41:71–80, 2000.

[JS97] S. Järvenpää and E. Somersalo. Impedance imaging and electrode models. In Louis Engl and Rundell, editors, *Inverse Problems in medical imaging and nondestructive testing*, Proc. Conf. in Oberwolfach (Federal Republic of Germany, Feb. 1996). Springer, New York, 1997.

[KKSV99] J.P. Kaipio, P.A. Karjalainen, E. Somersalo and M. Vauhkonen. State estimation in time-varying electrical impedance tomography. *Annals - New York Academy of Sciences*, pages 430–439, 1999.

[KKSV00] J.P. Kaipio, V. Kolehmainen, E. Somersalo and M. Vauhkonen. Statistical inversion and monte carlo sampling methods in statistical impedance tomography. *Inverse Problems*, 16:1487–1522, 2000.

[KKVS99] J.P. Kaipio, V. Kolehmainen, M. Vauhkonen and E. Somersalo. Inverse problems with structural prior information. *Inverse Problems*, 15:713–729, 1999.

[KS82] J.G. Koritke and H. Sick. *Atlas anatomischer Schnittbilder des Menschen.* Urban & Schwarzenberg, München - Wien - Baltimore, 1982.

[KV96] P.G. Kaup and M. Vogelius. Method of imaging corrosion damage in thin plates from electrostatic data. *Inverse Problems*, 12:279–93, 1996.

[Lou89] A.K. Louis. *Inverse und schlecht gestellte Probleme.* Teubner, Stuttgart, 1989.

[Lou92] A.K. Louis. Parametric reconstruction in biomagnetic imaging. In *Inverse Problems in Scattering and Imaging*, 1992.

[Mel78] J.L. Melsa. *Decision and estimation theory.* McGraw-Hill, 1978.

[Nag89] R. Nagel. Towards a 'matrix theory' for unbounded operator matrices. *Math. Z.*, 201:57–68, 1989.

[Nat86] F. Natterer. *The Mathematics of Computerized Tomography.* John Wiley & Sons, 1986.

[O+00] K.S. Osterman et al. Multifrequency electrical impedance imaging: preliminary in vivo experience in breast. *Physiol. Meas.*, 21:99–109, 2000.

[PM94] R.D. Pascual-Marqui. Low resolution electromagnetic tomography: A new method for localizing electrical activity in brain. *International Journal of Psychophysiology*, pages 49–65, 1994.

[SCI92] E. Somersalo, M. Cheney and D. Isaacson. Existence and uniqueness for electrode models for electric current computed tomography. *SIAM J. Appl. Math*, 52:1023–40, 1992.

[SG64] A. Savitzky and M.J.E. Golay. *Analytical Chemistry*, 36:1627–1639, 1964.

[Smi70] G.D. Smith. *Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen.* Vieweg, 1970.

[Sre94] R. Srebro. Continuous current source inversion of evoked potential fields in a spherical model head. *IEEE Trans Biomed Eng*, 42:997–1003, 1994.

[Vau97] M. Vauhkonen. *Electrical impedance tomography and prior information.* PhD thesis, University of Kuopio, Kuopio, Finland, 1997.

[VK89] M. Vauhkonen and P.A. Karjalainen. A kalman filter aproach to track fast impedance changes in electrical impedance tomography. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 45(4):486–493, 1989.

[Vog95] H. Vogel. *Gerthsen Physik.* Springer, 18. auflage edition, 1995.

[VVK+98] M. Vauhkonen, B. Vadász, P.A. Karjalainen, E. Somersalo and J.P. Kaipio. Tikhonov regularization and prior information in electrical impedance tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, 17:285–293, 1998.

[Wag98] M. Wagner. *Rekonstruktion neuronaler Stroeme aus bioelektrischen Messungen auf der aus MR-Bildern segmentierten Hirnrinde.* PhD thesis, Dissertation, Fachbereich Physik, TU Hamburg-Harburg, 1998.

[WBH+00] T.D. Waberski, H. Buchner, G. Herrendorf, R. Gobbele and W. Paulus. Properties of inverse methods in temporal lobe epilepsie. *Epilepsia, in press*, 2000.

[WBRB99] C. Wolters, R. Beckmann, A. Rienäcker and H. Buchner. Comparing regularized and non-regularized nonlinear dipole fit methods: A study in a simulated sulcus structure. *Brain Topography*, 12(1):3–18, 1999.

[WRB+01] Wolters, Reitzinger, Basermann, Burkhardt, Hartmann, Kruggel and Anwander. Improved tissue modelling and fast solver methods for high resolution fe-modelling in eeg/meg-source localisation. *in press*, 2001.

[WV93] G. Wang and M.W. Vannier. Preliminary study on helical ct algorithms for patient motion estimation and compensation. *IEEE Trans. Med. Imag.*, 14(2):205–211, 1993.

[WWK93] J.Z. Wang, S.J. Williamson and L. Kaufmann. Magnetic source imaging based on the minimum-norm least-squares inverse. *Brain Topography*, 5:365–371, 1993.