Numerische Inversion der sphärischen Radontransformation und der Kosinustransformation

Dissertation

zur Erlangung des Grades des

Doktors der Naturwissenschaften

der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultäten der Universität des Saarlandes

vorgelegt von Martin Riplinger

Saarbrücken, 2011

Tag des Kolloquiums:17. Februar 2012Dekan:Univ.-Prof. Dr. H. HermannsVorsitzender:Univ.-Prof. Dr. S. RjasanowBerichterstatterUniv.-Prof. Dr. A.K. Louis
Univ.-Prof. Dr. E. SpodarevAkademischer Mitarbeiter:Dr. A. Groh

Abstract

This thesis aims to invert two three-dimensional integral transforms which are strongly related to each other. The first one is the spherical Radon transform (also known as Funk transform) given by

$$Rf(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{S}^2 \cap \eta^{\perp}} f(\omega) d\omega, \qquad \eta \in \mathcal{S}^2.$$

The second one is called cosine transform and is defined by

$$Kf(\eta) = \int_{\mathcal{S}^2} |\langle \eta, \omega \rangle| f(\omega) \,\mathrm{d}\omega, \qquad \eta \in \mathcal{S}^2.$$

The investigations are motivated by an inverse problem appearing in stereology. The aim is to reconstruct the directional distribution of a random fibre process from its estimated rose of intersections g. This quantity is a function on the unit sphere S^2 , and the value $g(\omega)$ denotes the expected number of intersections of the process with the normal plane ω^{\perp} per unit area. In the case of the directional distribution having a density f with respect to the spherical surface area measure, the given data is approximately equal to the cosine transform of the unknown density f. Due to the ill-posedness, a numerically stable inversion of this transform has to be performed. Suitable reconstruction methods for the density are missing so far in literature.

The tool of the Approximate Inverse is applied in order to invert both integral transforms numerically. An appropriate choice of mollifiers allows to calculate the corresponding reconstruction kernel explicitly. Moreover, conditions on the mollifiers are established which ensure regularization properties of the method. Furthermore, the nullspace of the transforms is characterized and the selection of an adequate set of measurement directions is elaborated. Numerical results substantiate the validity of the resulting algorithms, where the L-criterion is utilized to select the regularization parameter. First, synthetic data is used to test the derived inversion method for both transforms. Subsequently, the algorithm for the inversion of the cosine transform is applied to reconstruct the density of the directional distribution of a cylinder process from finitely many intersections of their cylinders with test planes. Finally, this method is used to analyze a series of microscopic three-dimensional images of real fibre systems.

Kurze Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist die numerische Inversion zweier eng miteinander verwandter Integraloperatoren in \mathbb{R}^3 . Zum einen wird die sphärische Radontransformation (auch Funk-Transformation genannt)

$$Rf(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{S}^2 \cap \eta^{\perp}} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega, \qquad \eta \in \mathcal{S}^2$$

betrachtet, zum anderen die Kosinustransformation

$$Kf(\eta) = \int_{S^2} |\langle \eta, \omega \rangle| f(\omega) d\omega, \qquad \eta \in S^2.$$

Die Untersuchungen sind durch ein inverses Problem aus der Stereologie motiviert, bei dem die Richtungsverteilung eines stochastischen Faser-Prozesses ausgehend von der geschätzten Schnittzahlrose g rekonstruiert werden soll. Für $\omega \in S^2$ entspricht der Wert $g(\omega)$ der erwarteten Anzahl von Schnitten des Prozesses mit der Ebene ω^{\perp} pro Einheitsfläche. Besitzt die Richtungsverteilung eine Dichte f bezüglich des sphärischen Lebesgue-Maßes, so entsprechen die gegebenen Daten g der Kosinustransformation der unbekannten Dichte f. Aufgrund der Schlechtgestelltheit dieses inversen Problems wird eine numerisch stabile Inversion dieser Transformation benötigt. Nach dem aktuellen Stand der Forschung ist bisher kein adäquates Verfahren bekannt.

In dieser Arbeit wird das Verfahren der Approximativen Inversen angewendet, um beide Integraltransformationen numerisch zu invertieren. Durch die Wahl spezieller Mollifier ist es möglich, den zugehörigen Rekonstruktionskern analytisch zu berechnen. Es werden zudem Bedingungen an die Mollifier hergeleitet, welche die regularisierende Wirkung des Verfahrens sicherstellen. Weiterhin werden die Nullräume beider Transformationen charakterisiert und die Wahl einer geeigneten Menge von Messrichtungen diskutiert. Numerische Tests, bei denen das L-Kriterium zur Wahl des Regularisierungsparameters verwendet wird, belegen Effektivität und Effizienz der entwickelten Algorithmen. Zu diesem Zweck werden die Verfahren für beide Transformationen zunächst anhand synthetischer Daten getestet. Anschließend wird der Algorithmus zur Inversion der Kosinustransformation genutzt, um die Dichte der Richtungsverteilung eines Zylinder-Prozesses aus endlich vielen Schnitten des Prozesses mit Testebenen zu rekonstruieren. Schließlich werden 3D-Datensätze von realen Fasersystemen untersucht.

Inhaltsverzeichnis

Ei	Einleitung				
1 Mathematische Grundlagen		hematische Grundlagen	1		
	1.1	Laplace-Beltrami Operator auf der Sphäre	2		
	1.2	Kugelflächenfunktionen und Sobolev-Räume über \mathcal{S}^2	4		
	1.3	Zonale Funktionen	9		
	1.4	Numerische Integration auf der Sphäre	11		
2	Sph	ärische Radon- und Kosinustransformation	17		
	2.1	Sphärische Radontransformation	17		
		2.1.1 Inversionsformel von Funk	21		
		2.1.2 Analytische Inversionsformeln für die Radon transformation	23		
	2.2	Kosinus- und Sinustransformation	24		
	2.3	Schlechtgestelltheit der Operatoren	26		
	2.4	Glättungseigenschaften in einer Sobolev-Skala	28		
3	Anw	endungsbeispiel aus der Stereologie	29		
4	Approximative Inverse (AI)				
	4.1	Idee des Verfahrens	33		
	4.2	Wahl des Regularisierungsparameters	37		
	4.3	Nullraum und Wahl der Messrichtungen	38		
	4.4	Regularisierungseigenschaften des Verfahrens	42		
5	Numerische Inversion in \mathbb{R}^3				
	5.1	Numerische Lösung der Abel'schen Integralgleichung mittels AI	48		
	5.2	Berechnung von Rekonstruktionskernen für die Radon transformation	52		
	5.3	Direkte Rekonstruktion von Kanten	61		
	5.4	Berechnung der Kerne für die Kosinus- und Sinustransformation	63		

6	Numerische Ergebnisse		
	6.1	Inversion der Radontransformation	67
	6.2	Inversion der Kosinustransformation	75
	6.3	Schätzung der Richtungsverteilung eines stationären Prozesses	79
	6.4	Anwendung auf reale Datensätze	86
A Anhang		89	
	A.1	Numerischer Test zur Abel'schen Integralgleichung	89
	A.2	Beweise zum Abschnitt 4.4	90

ii

Bezeichnungen

d	Raumdimension
\mathcal{S}^{d-1}	$(d-1)$ -dimensionale Einheitssphäre in \mathbb{R}^d
\mathcal{S}^2 bzw. \mathcal{S}^2_+	untere bzw. obere Halbsphäre
κ_d	Volumen der <i>d</i> -dimensionalen Einheitskugel
ω_d	Oberfläche der Einheitssphäre \mathcal{S}^d
$d_{\rm geo}(\xi,\omega)$	geodätischer Abstand auf der Einheitssphäre
ω, η, ξ	Einheitsvektoren
φ	Azimutwinkel (bei Kugelkoordinaten)
θ	Polarwinkel (bei Kugelkoordinaten)
R	Radontransformation
K	Kosinustransformation
S	Sinustransformation
A	K, S oder R
A^{\dagger}	Verallgemeinerte Inverse des Operators A
A^*	Adjungierter Operator zu A
ν_n	Eigenwerte der Radontransformation
λ_n	Eigenwerte der Kosinustransformation
μ_n	Eigenwerte der Sinustransformation
Ā	Abel'scher Integraloperator
$\mathcal{N}(A)$	Nullraum des Operators A
γ	Regularisierungsparameter
e_{γ}	Mollifier
$\dot{E_{\gamma}}$	$E_{\gamma}(\theta) = e_{\gamma}(\arcsin\theta)$
ψ_{γ}	Rekonstruktionskern für die Radontransformation
ψ_{γ}^{K}	Rekonstruktionskern für die Kosinustransformation
ψ^S_{γ}	Rekonstruktionskern für die Sinustransformation
Ψ_γ	$\Psi_\gamma(t)$ = $\psi_\gamma(rccos t)$
Φ	Faser-Prozess
Ι	Intensität
r	Richtungsverteilung
Х	Gaußsches Zufallsfeld
$f_{\mu,\kappa}$	Dichte der einfachen Watson-Verteilung
f^w	Dichte der gemischten Watson-Verteilung
p_eta	Dichte der Beta-Verteilung
•	6

Y_n	Kugelflächenfunktion vom Grad n
Y_{nk}	Kugelflächenfunktion vom Grad n und der Ordnung k
P_n	Legendre-Polynom vom Grad n
P_n^k	zugeordnetes Legendre-Polynom
$L_n f$	<i>n</i> -ter Legendre-Koeffizient
erf	Fehlerfunktion
erfi	komplexe Fehlerfunktion
D	Dawson Integral
В	Beta-Funktion
Γ	Gamma-Funktion
Н	Baum der Kugelflächenfunktionen vom Grad n
$\mathbb{P}^n(S^2)$	Baum der Polynome vom Grad kleiner gleich n auf S^2
\mathbb{P}^n (S ²)	Baum aller homogenen Polynome vom Grad n auf S^2
$\mathbb{D}^{2n-1}(S^2)$	Raum der ungeraden (odd) Polynome v. Cr. kleiner gleich $2n-1$
$\mathbb{P}_{e}^{2n}\left(\mathcal{S}^{2} ight)$	Raum der geraden (odd) Folynome v. Gl. kleiner gleich $2n = 1$ Raum der geraden (even) Polynome vom Grad kleiner gleich $2n$
$\langle \omega, n \rangle$	Skalarprodukt (in \mathbb{R}^d)
$(f, a)_{12(S^2)}$	L^2 -Skalarprodukt über der Einheitssphäre
$(3,37L^{-}(3^{-}))$	Rotationsmatrix
f^{\vee}	radiale Fortsetzung von f
a^{\wedge}	Einschränkung einer Funktion $q: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ auf \mathcal{S}^{d-1}
Δ	Laplace Operator auf \mathbb{R}^d
Δ_{cd}	Laplace-Beltrami Operator auf \mathcal{S}^d
\Box_d	Box-Operator
a * f	sphärische Faltung
<i>k</i> !!	Doppelfakultät

Einleitung

Viele poröse Materialien und Komposite wie zum Beispiel faserverstärkter Beton, Kohlefaserpapier oder Glasfaser-Verbundstoffe bestehen aus nahezu geradlinigen Fasern. Die mechanischen Eigenschaften solcher Materialien hängen hauptsächlich von der räumlichen Verteilung dieser Filamente ab, die mathematisch durch stochastische (dilatierte) Faser-Prozesse [69, 91] beschrieben werden können. Mit Hilfe dieser Modelle werden gewisse Eigenschaften der Materialien am Computer optimiert, statt viele teure Prototypen fertigen zu müssen. Anschaulich ist ein solcher Faser-Prozess eine zufällige Anordnung von Fasern in \mathbb{R}^3 , wie beispielsweise in der folgenden Abbildung illustriert ist.



Realisierung eines Zylinder-Prozesses

Häufig werden sogenannte stationäre Poisson-Zylinder-Prozesse zur mathematischen Modellierung eingesetzt. Der Zusatz "Poisson" besagt insbesondere, dass es keine Korrelation zwischen den einzelnen Zylindern gibt, was eine einfache Realisierung der Prozesse am Computer ermöglicht. Die Eigenschaft "stationär" stellt sicher, dass die Verteilung der Zylinder invariant unter Verschiebungen in \mathbb{R}^3 ist. Dies entspricht der aus Anwendungssicht sinnvollen Annahme, dass die Zylinder in jedem Beobachtungsfenster dieselbe Richtungscharakteristik aufweisen. Diese Richtungsverteilung und die sogenannte Intensität sind zwei wichtige Kenngrößen zur Beschreibung solcher Prozesse. Erstere ist eine symmetrische Verteilung auf der Sphäre und beschreibt die Verteilung der Richtungsvektoren der Zylinder in einem typischen Punkt. Daneben beschreibt die Intensität die erwartete Gesamtlänge der Fasern pro Einheitsvolumen. Sie ist ein Maß dafür, wie viele Zylinder durchschnittlich im Beobachtungsfenster zu sehen sind.

Für die Intensität finden sich in der Literatur bereits geeignete Schätzer, siehe zum Beispiel [80, 91]. Die Berechnung der Richtungsverteilung eines Faser-Prozesses Φ ist jedoch noch nicht zufriedenstellend gelöst, insbesondere wenn diese eine Dichte f bezüglich des Lebesgue-Maßes besitzt. Die Verteilung lässt sich in diesem Fall für alle Borelmengen

 $A \subset \mathcal{S}^2$ darstellen durch

$$r(A) = \int_A f(\omega) \,\mathrm{d}\omega.$$

Eine aus der Stereologie motivierte Möglichkeit, die Dichte zu schätzen, führt über die sogenannte Schnittzahlrose g [9, 42]. Für $\omega \in S^2$ beschreibt die Zahl $g(\omega)$ die Intensität des Punktprozesses $\Phi \cap \omega^{\perp}$, also die erwartete Anzahl von Schnittpunkten des Prozesses mit der Normalebene ω^{\perp} pro Einheitsfläche. Besitzt die Richtungsverteilung des Prozesses eine Dichte bzgl. des Lebesgue-Maßes auf der Sphäre, so beschreibt die Kosinustransformation den Zusammenhang zwischen der Dichte f und der Schnittzahlrose g. Bezeichnet I die Intensität des Prozesses Φ , so gilt [42]:

$$g = I\left(Kf\right),\tag{1}$$

wobei die Kosinustransformation für $\eta \in S^2$ gegeben ist durch

$$Kf(\eta) = \int_{S^2} |\langle \eta, \omega \rangle| f(\omega) \, \mathrm{d}\omega.$$

Um die Dichte der Richtungsverteilung aus der Schnittzahlrose zu berechnen, muss ein inverses Problem in Form einer Integralgleichung erster Art gelöst werden. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass auch für eine beliebige, beispielsweise diskrete Richtungsverteilung der Zusammenhang zwischen dieser und der Schnittzahlrose durch eine geeignete Modifikation der Kosinustransformation beschrieben wird [42], welche im Allgemeinen aber nicht die Gestalt einer Integraltransformation aufweist.

Bekanntermaßen [61] ist die gesuchte Dichte durch den Zusammenhang (1) eindeutig bestimmt. Auch existieren Inversionsformeln [62, 63, 90]. Allerdings sind diese für die numerische Berechnung in praktischen Anwendungen nicht unmittelbar geeignet, da nur eine Schätzung der Schnittzahlrose für eine diskrete Anzahl von Richtungen zur Verfügung steht.

Unter der Annahme, dass für eine gegebene, diskrete Menge an Richtungen eine Schätzung der Schnittzahlrose vorliegt, besteht ein Hauptziel dieser Arbeit darin, das inverse Problem (1) numerisch zu lösen, d. h. die Dichte der Richtungsverteilung zu rekonstruieren. Als möglichen Ansatz schlagen Kiderlen und Pfrang [41, 42] nicht-parametrische Optimierungsalgorithmen vor. Um diese jedoch anwenden zu können, ist es notwendig, den Urbildraum auf diskrete Maße einzuschränken. Es existieren zwar Konvergenzbeweise für diese Methode [22], da aber die diskreten Rekonstruktionen auf eine endliche Zahl von Richtungen konzentriert sind, sehen entsprechende Visualisierungen oft künstlich aus und können optisch nur schwer interpretiert werden. Algorithmen zur direkten Rekonstruktion der kontinuierlichen Verteilungsdichte könnten eine Verbesserung des stochastischen Modells ermöglichen, sind in der Literatur jedoch bisher nicht zu finden. Zudem ist die numerische Lösung der Optimierungsprobleme aufwendig, was insbesondere bei großen Datenmengen ein Problem darstellt.

Um das schlecht gestellte inverse Problem (1) zu lösen, ist es notwendig, ein Regularisierungsverfahren anzuwenden. Bekannte Verfahren zur Stabilisierung des Rekonstruktionsprozesses sind zum Beispiel die abgeschnittene Singulärwertzerlegung, die Tikhonov-Philipps Regularisierung, iterative Verfahren sowie die Approximative Inverse. Die Monographie [52] von Louis bietet einen guten Überblick über die gängigen Methoden. In dieser Arbeit wird das Verfahren der Approximativen Inversen [53, 59] angewendet. Um dieses einsetzen zu können, muss im Vorfeld ein Hilfsproblem zur Berechnung eines sogenannten Rekonstruktionskern gelöst werden. Im Fall der Kosinustransformation stellt sich heraus, dass die Betrachtung einer weiteren Integraltransformation zu diesem Zweck sehr hilfreich ist. Die sphärische Radontransformation, welche auch Funk-Transformation genannt wird, ist für $\eta \in S^2$ gegeben durch

$$Rf(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{S}^2 \cap \eta^{\perp}} f(\omega) \,\mathrm{d}\omega.$$

Dieser Operator ist zum einen eng mit der Kosinustransformation verwandt [23, 90] und zum anderen in der Literatur bereits ausführlich analysiert [11, 20, 26, 21, 35, 78]. Sie dient einerseits als Hilfsmittel, um Rekonstruktionskerne für die Kosinustransformation zu berechnen, ist aber andererseits auch als eigenständige Transformation interessant. So ist ihre numerische Inversion in der geometrischen Tomographie erforderlich, zum Beispiel bei der Rekonstruktion sternförmiger Körper ausgehend von ihrer Schnittfläche mit Ebenen [21]. Auch als Bestandteil von Inversionsformeln anderer Operatoren [56, 101] ist ihre Inversion notwendig. Ein Ziel dieser Arbeit ist es daher, die sphärische Radontransformation ausgehend von einer diskreten, gegebenenfalls gestörten, Datenmenge zu invertieren.

Die in dieser Arbeit hergeleitete Methode kann prinzipiell auf jeden Operator der folgenden Familie

$$T_h f(\eta) = \int_{\mathcal{S}^2} h(|\langle \eta, \omega \rangle|) f(\omega) \, \mathrm{d}\omega, \qquad \eta \in \mathcal{S}^2$$

angewandt werden, wobei $f \in L^2_e(S^2)$ und $h \in L^2[0,1]$ gilt. Für das Beispiel der Sinustransformation S, welche durch die Wahl $h(x) \coloneqq \sqrt{1-x^2}$ aus dieser Familie hervorgeht, nutzt Hoffmann [39] einen Fehlerquadrate-Ansatz zur Lösung des Problems Sf = g. Für diese Methode existieren Konsistenzbeweise [22], allerdings ist zur numerischen Berechnung auch hier die Einschränkung auf diskrete Maße nötig. Für die Sinustransformation sind keine Algorithmen bekannt, welche auf diese Einschränkung verzichten können.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert:

Nach der Einführung mathematischer Grundlagen in Kapitel 1, werden in Kapitel 2 sowohl die sphärische Radontransformation als auch die Kosinus- und Sinustransformation betrachtet und ihre wichtigsten Eigenschaften beschrieben. Auch die bekannten Inversionsformeln für diese Operatoren werden angeführt und die Probleme bei der numerischen Umsetzung aufgezeigt. Daran anschließend wird die Schlechtgestelltheit der Operatoren sowohl bzgl. der Asymptotik der Eigenwerte als auch mit Hilfe ihres Glättungsverhaltens in einer Sobolev-Skala quantifiziert.

Nachdem das in der Einleitung skizzierte Anwendungsbeispiel aus der Stereologie in Kapitel 3 genauer erläutert wurde, wird in Kapitel 4 das Verfahren der Approximativen Inversen vorgestellt und an die betrachteten Transformationen angepasst. Daran anschließend werden die Nullräume der Transformationen untersucht und die Wahl geeigneter Mengen von Messrichtungen diskutiert. Zudem werden Bedingungen an die Mollifier hergeleitet, welche die regularisierende Wirkung des Verfahrens sicherstellen. In Kapitel 5 werden die für das Verfahren notwendigen Rekonstruktionskerne berechnet. Für die sphärische Radontransformation wird zunächst gezeigt, dass es durch die Wahl spezieller Mollifier genügt, eine Abel'sche Integralgleichung zu lösen. Die Lösung des Hilfsproblems erfolgt im Allgemeinen numerisch, hier mit Hilfe der Approximativen Inversen. Für ausgewählte Mollifier ist es jedoch möglich, die zugehörigen Rekonstruktionskerne in analytisch geschlossener Form anzugeben.

Durch eine Modifikation des Inversionsverfahrens lässt sich direkt die Anwendung des Laplace-Beltrami Operators auf die unbekannte Funktion aus den Daten berechnen. Diese Informationen können beispielsweise zur automatischen Kantenbestimmung verwendet werden. Anschließend wird ein Rekonstruktionskern für die Kosinustransformation analytisch angegeben, der sich aus den zuvor durchgeführten Berechnungen ableiten lässt. Für die Sinustransformation werden schließlich zwei mögliche Ansätze erläutert, die die Berechnung der zugehörigen Kerne erlauben.

Das abschließende Kapitel 6 präsentiert numerische Tests der hergeleiteten Verfahren, bei denen das L-Kriterium zur Wahl des Regularisierungsparameters verwendet wird. Um die Effektivität und die Effizienz der entwickelten Algorithmen zu belegen, werden für beide Transformationen zahlreiche Tests mit synthetischen Daten durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Fall der Kosinustransformation verglichen mit Resultaten des Verfahrens von Kiderlen und Pfrang, das um eine Kernglättung als Nachbearbeitungsschritt ergänzt wurde. Die Vor- und Nachteile beider Verfahren werden aufgezeigt. Während die in dieser Arbeit hergeleitete Methode effektiv arbeitet und qualitativ gute Rekonstruktionen in angemessener Zeit liefert, benötigt das Verfahren von Kiderlen und Pfrang die hundertfache Rechenzeit, ohne dabei sichtbar bessere Resultate zu liefern. Schließlich werden 3D-Datensätze von realen Fasersystemen untersucht, was die Anwendbarkeit des entwickelten Verfahrens in der Praxis belegt.

Danksagung

An dieser Stelle spreche ich all jenen meinen Dank aus, die mir auf dem Weg zur Fertigstellung dieser Arbeit mit Rat und Tat zur Seite gestanden und damit zum Gelingen beigetragen haben. Allen voran gilt mein Dank Herrn Professor Dr. Alfred Louis, der mich stets gefördert und unterstützt hat. Wenn nötig, wies er mit hilfreichen Ratschlägen den richtigen Weg, ließ mir aber zugleich große Freiräume zur wissenschaftlichen Entfaltung. Darüber hinaus stellte er jederzeit eine ausgezeichnete Ausstattung an Literatur sowie Soft- und Hardware zur Verfügung.

Mein Dank gilt außerdem Herrn Professor Dr. Evgeny Spodarev für die vielen interessanten Denkanstöße innerhalb des DFG-Projektes, aus dem diese Arbeit hervorgegangen ist. Durch die Kombination von stochastischer Geometrie und inversen Problemen ist ein sehr spannendes Arbeitsgebiet entstanden. Für seine Bereitschaft zur Begutachtung meiner Arbeit danke ihm ich herzlich. Auch Herrn Malte Spiess möchte ich meinen Dank aussprechen, zum einen für die vielen Simulationen der verschiedenen Prozesse und die Bilder der Realisierungen, zum anderen aber auch für die sehr hilfreiche Unterstützung und anregenden Diskussionen während der Entstehung der Arbeit. Die Zusammenarbeit mit beiden hat mir viel Freude bereitet und meine Dissertation bereichert.

Auch das ausgesprochen angenehme Arbeitsklima in der Arbeitsgruppe und die vorbehaltlose Hilfsbereitschaft der Kollegen bei jedweder Art von Problemen haben großen Anteil an der Entstehung dieser Dissertation. Besonders bedanke ich mich bei Dr. Andreas Groh und Dr. Jochen Krebs für viele nützliche Hinweise und Diskussionen während des Promotionsstudiums. Für das intensive Korrekturlesen dieser Arbeit bin ich Sabrina Bechtel und Bernadette Hahn zu Dank verpflichtet. Danken möchte ich in diesem Zusammenhang auch Holger Kohr, mit dem ich das Zimmer teilen durfte und dessen qualifizierte mathematische und technische Hilfestellungen mir oft weitergeholfen haben.

Bei Frau Dr. Claudia Redenbach und Herr Dr. Oliver Wirjadi vom Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) in Kaiserslautern bedanke ich mich für die Bereitstellung der verwendeten realen Datensätze.

Die Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Projektes LO 310/10-1 gefördert.

Ein ganz herzlicher Dank geht an meine Eltern Birgit und Peter, sowie an meine Schwester Maike, die mein Studium in jeder Hinsicht unterstützten. Sie ermunterten mich stets dazu, die akademische Ausbildung fortzusetzen und haben mir in dieser Zeit häufig den Rücken gestärkt.

Kapitel 1

Mathematische Grundlagen

Es bezeichne \mathcal{S}^{d-1} die Einheitssphäre in \mathbb{R}^d :

$$\mathcal{S}^{d-1} \coloneqq \left\{ \omega = (\omega_1, \dots, \omega_d) \in \mathbb{R}^d \mid \|\omega\|^2 = \omega_1^2 + \dots + \omega_d^2 = 1 \right\}.$$
(1.1)

Die Oberfläche w_{d-1} von \mathcal{S}^{d-1} ist gemäß [12] gegeben durch

$$w_{d-1} = \lambda_{d-1}(\mathcal{S}^{d-1}) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})},$$

wobe
i Γ die Gammafunktion bezeichnet. Es ergibt sich insbesondere

$$w_0 = 2, w_1 = 2\pi$$
 und $w_2 = 4\pi$.

Hieraus erhält man das Volumen k_d der d-dimensionalen Einheitskugel als

$$k_d = \frac{w_{d-1}}{d} = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}.$$
(1.2)

Für Funktionen $f, g: \mathcal{S}^{d-1} \longrightarrow \mathbb{R}$ ist das L^2 -Skalarprodukt definiert durch

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathcal{S}^{d-1})} = \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(\omega)g(\omega) \,\mathrm{d}\omega$$

Die Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen

$$L^{2}\left(\mathcal{S}^{d-1}\right) \coloneqq \left\{f: \mathcal{S}^{d-1} \longrightarrow \mathbb{R} \mid \|f\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{d-1})}^{2} < \infty\right\}$$

wird auch Lebesgue-Raum auf \mathcal{S}^{d-1} genannt. Bezeichnet man mit $\mathcal{C}(\mathcal{S}^d)$ die stetigen Funktionen auf der Sphäre, so bildet $(\mathcal{C}(\mathcal{S}^{d-1}), \mathcal{C}(\mathcal{S}^{d-1}), \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$ einen Prähilbertraum. Bezüglich der Norm $||f||_{\mathcal{C}} = \sup_{\omega \in \mathcal{S}^{d-1}} |f(\omega)|$ ist $\mathcal{C}(\mathcal{S}^{d-1})$ ein Banach-Raum,

und es gilt die folgende Normabschätzung

$$||f||_{L^2(\mathcal{S}^{d-1})} \leq \sqrt{w_{d-1}} ||f||_{\mathcal{C}}.$$

1.1 Laplace-Beltrami Operator auf der Sphäre

Eine wichtige Rolle in dieser Arbeit spielt der Laplace-Beltrami Operator auf der Einheitssphäre. Für eine Funktion $f: S^{d-1} \longrightarrow \mathbb{R}$ bezeichne f^{\vee} die radiale Fortsetzung von f auf $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$, d. h. es gilt

$$f^{\vee}(x) \coloneqq f\left(\frac{x}{\|x\|}\right).$$

Weiterhin bezeichne g^{\wedge} die Einschränkung einer Funktion $g: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ auf \mathcal{S}^{d-1} .

Definition 1.1 (Laplace-Beltrami Operator) Der Operator

$$\Delta_{\mathcal{S}^{d-1}} f \coloneqq \left(\Delta f^{\vee}\right)^{\wedge} \tag{1.3}$$

heißt **Laplace-Beltrami Operator** auf S^{d-1} , wobei Δ den Laplace Operator auf \mathbb{R}^d bezeichnet. Es ist der Anteil des Laplace Operators, der nur auf den Winkelanteil der Funktion f wirkt.

Analog kann man den Gradienten für Funktionen auf \mathcal{S}^{d-1} erklären durch

$$\nabla_{\mathcal{S}^{d-1}} f \coloneqq \left(\nabla f^{\vee}\right)^{\wedge}$$

Im Folgenden betrachten wir speziell den Fall d = 3. Entsprechende Verallgemeinerungen für beliebige Dimensionen sind in [66] zu finden.

Es werden zunächst zwei Parametrisierungen in \mathbb{R}^3 eingeführt, die sich insbesondere anbieten, um Punkte auf der Einheitssphäre zu beschreiben.

Definition 1.2 (Kugelkoordinaten)

Nutzt man die bekannten Kugelkoordinaten in \mathbb{R}^3 , so lässt sich jeder Einheitsvektor $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in S^2$ schreiben als

$$\begin{aligned}
\omega_1 &= \sin \theta \, \cos \varphi & (1.4) \\
\omega_2 &= \sin \theta \, \sin \varphi \\
\omega_3 &= \cos \theta \,,
\end{aligned}$$

wobei $\theta \in [0,\pi]$ **Polarwinkel** ("geographische Breite") und $\varphi \in [0,2\pi)$ **Azimutwinkel** ("geographische Länge") genannt wird.

Durch die Substitution $t \coloneqq \cos \theta$ erhalten wir eine alternative Parametrisierung.

Definition 1.3 (Polarkoordinaten) Eine Richtung $\omega \in S^2$ kann mit $t \in [-1, 1]$ und $\varphi \in [0, 2\pi)$ durch

$$\omega_1 = \sqrt{1 - t^2} \cos \varphi$$
$$\omega_2 = \sqrt{1 - t^2} \sin \varphi$$
$$\omega_3 = t$$

parametrisiert werden. Wir nennen das Tupel (t, φ) **Polarkoordinaten**.

Das Integral einer Riemann-integrierbaren Funktion f über der Einheitssphäre S^2 lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$\int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) d\omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{f}(\theta, \varphi) \sin \theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\varphi$$
$$= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{1} \bar{f}(t, \varphi) \, \mathrm{d}t \, \mathrm{d}\varphi \,. \tag{1.5}$$

Hierbei ist

$$\tilde{f}(\theta, \varphi) \coloneqq f(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$$

beziehungsweise

$$\bar{f}(t,\varphi) \coloneqq f\left(\sqrt{1-t^2}\cos\varphi, \sqrt{1-t^2}\sin\varphi, t\right).$$
(1.6)

Wir stellen nun den Laplace-Beltrami Operator sowohl in Kugel- als auch in Polarkoordinaten dar. Der Laplace Operator lässt sich bekanntermaßen [65] schreiben als

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathcal{S}^2} , \qquad (1.7)$$

wobe
i $\Delta_{\mathcal{S}^2}$ der Laplace-Beltrami Operator auf der Sphär
e \mathcal{S}^2 ist. Unter Verwendung der Kugelkoordinaten gilt

$$\Delta_{\mathcal{S}^2} f = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \tilde{f}}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial\varphi^2}$$
(1.8)

und mit Hilfe der Kettenregel erhält man in Polarkoordinaten die folgende Darstellung:

$$\Delta_{\mathcal{S}^2} f = \frac{\partial}{\partial t} \left(\left(1 - t^2 \right) \frac{\partial \bar{f}}{\partial t} \right) + \frac{1}{1 - t^2} \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial \varphi^2} \,. \tag{1.9}$$

Lemma 1.4 Es seien $\omega, \eta \in S^{d-1}$ und die Funktion $f : [-1,1] \longrightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gilt

a) $\Delta_{\mathcal{S}^{d-1}}^{\omega} \langle \omega, \eta \rangle = -(d-1) \langle \omega, \eta \rangle,$

b)
$$\Delta_{\mathcal{S}^{d-1}}^{\omega} f(\langle \omega, \eta \rangle) = -(d-1)\langle \omega, \eta \rangle f'(\langle \omega, \eta \rangle) + (1 - \langle \omega, \eta \rangle^2) f''(\langle \omega, \eta \rangle)$$

wobe
i $\Delta^{\omega}_{\mathcal{S}^{d-1}}$ den Laplace-Beltrami Operator bezüglich
 ω bezeichnet.

Beweis. Ein Beweis ist für d = 3 in [19] zu finden.

1.2 Kugelflächenfunktionen und Sobolev-Räume über S^2

Die Kugelflächenfunktionen, die eine Orthonormalbasis des Raums $L^2(S^2)$ bilden, spielen eine wichtige Rolle in dieser Arbeit. Der Spezialfall d = 3, auf den wir uns hier beschränken, ist in [18, 19] betrachtet. Die entsprechende Aussagen für beliebige Dimensionen sind in [66, 72, 86, 97] zu finden.

Bezeichnung Eine Kugelflächenfunktion vom Grad n (mit $n \in \mathbb{N}$) ist die Einschränkung eines homogenen, harmonischen Polynoms in \mathbb{R}^3 auf \mathcal{S}^2 .

Bezeichnet man mit \mathcal{H}_n den Raum der Kugelflächenfunktionen vom Grad n, so ist seine Dimension nach [26, Theorem 3.1.4] gegeben durch

$$\dim\left(\mathcal{H}_n\right) = \frac{2n+3-2}{n+3-2} \left(\begin{array}{c} n+3-2\\ 3-2 \end{array}\right) = 2n+1.$$
(1.10)

Die eingeführten Räume \mathcal{H}_n sind außerdem die Eigenräume des Laplace-Beltrami Operators [26, 67] zum Eigenwert

$$\lambda = n(n+1). \tag{1.11}$$

Es wird sich zeigen, dass die Kugelflächenfunktionen eng mit den Legendre-Polynomen verwandt sind.

Definition 1.5 (Legendre-Polynome)

Die **Legendre-Polynome** P_n sind die partikulären Lösungen der Legendre'schen Differentialgleichung

$$(1-x^2)f''(x) - 2xf'(x) + n(n+1)f(x) = 0, \qquad x \in [-1,1], n \in \mathbb{N}_0.$$
(1.12)

Sie erfüllen $P_n(1) = 1$ und genügen der Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^{1} P_l(t) P_k(t) \, \mathrm{d}t = \frac{2}{2l+1} \, \delta_{l,k} \, .$$

Die Rodrigues-Formel [19], welche die Legendre-Polynome beschreibt, ist gegeben durch

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^2 - 1\right)^n.$$
(1.13)

Das nachfolgende Additionstheorem beschreibt den Zusammenhang zwischen den Kugelflächenfunktionen und den Legendre-Polynomen. Ein Beweis befindet sich zum Beispiel in [19], die entsprechende *d*-dimensionale Aussage in [66].

Satz 1.6 (Additionstheorem)

Für $n \in \mathbb{N}$ bezeichne $\{Y_{nk} | k = -n, ..., n\}$ eine beliebige Orthonormalbasis von \mathcal{H}_n . Für zwei Einheitsvektoren $\omega, \xi \in S^2$ gilt

$$\sum_{k=-n}^{n} Y_{nk}(\xi) Y_{nk}(\omega) = \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\langle \xi, \omega \rangle) .$$
 (1.14)

Aus diesem Satz folgt unmittelbar, dass für festes $\xi \in S^2$ die Funktion $P_n(\langle \cdot, \xi \rangle)$ in \mathcal{H}_n liegt. Des Weiteren erhält man für $\xi = \omega \in S^2$ die wichtige Identität

$$\sum_{k=-n}^{n} Y_{nk}(\xi)^2 = \frac{2n+1}{4\pi}.$$
(1.15)

Bei der Berechnung von Integralen mit Kugelflächenfunktionen hilft häufig das Funk-Hecke Theorem weiter.

Satz 1.7 (Funk-Hecke Theorem) Sei f eine integrierbare Funktion auf [-1,1] und $Y_n \in \mathcal{H}_n$. Dann gilt

$$\int_{\mathcal{S}^2} f(\langle \xi, \omega \rangle) Y_n(\omega) \, \mathrm{d}\omega = (L_n f) Y_n(\xi)$$
(1.16)

mit dem konstanten Faktor

$$L_n f = 2\pi \int_{-1}^1 f(t) P_n(t) \,\mathrm{d}t \,,$$

wobei P_n das Legendre-Polynom vom Grad n bezeichnet. Die Größe $L_n f$ wird n-ter **Legendre-Koeffizient** genannt.

Beweis. Siehe [26, Theorem 3.4.1].

Wegen $Y_{00} \equiv (4\pi)^{-1/2} P_0(1)^{1/2} = (4\pi)^{-1/2}$ folgt hieraus die Identität

$$\int_{\mathcal{S}^2} |\langle \xi, \omega \rangle| \,\mathrm{d}\omega = 2\pi \int_{-1}^1 |t| \,\mathrm{d}t = 2\pi \,. \tag{1.17}$$

Bezeichnung Der Ausdruck $|m| = m_1 + m_2 + m_3$ bezeichne den Betrag eines Multiindex $m = (m_1, m_2, m_3) \in \mathbb{N}_0^3$. Für $n \in \mathbb{N}_0$ ist der Raum der Polynome vom Grad kleiner gleich n auf S^2 gegeben durch

$$\mathbb{P}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \coloneqq \left\{ p \mid p(\omega) = \sum_{|m| \le n} c_{m} \omega^{m}, \ \omega \in \mathcal{S}^{2} \right\}.$$
(1.18)

Weiter bezeichne

$$\mathbb{P}^{n}_{hom}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \coloneqq \left\{ p \mid p(\omega) = \sum_{|m|=n} c_{m} \omega^{m}, \ \omega \in \mathcal{S}^{2} \right\}$$
(1.19)

den Raum aller homogenen Polynome vom Grad n auf S^2 . Außerdem definieren wir den Raum der geraden (even) Polynome vom Grad kleiner gleich 2n mit $n \in \mathbb{N}_0$ durch

$$\mathbb{P}_{e}^{2n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \coloneqq \left\{ p \in \mathbb{P}^{2n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \middle| p(\omega) = p(-\omega), \ \omega \in \mathcal{S}^{2} \right\}$$
(1.20)

und den Raum der ungeraden (odd) Polynome vom Grad kleiner gleich 2n-1 analog durch

$$\mathbb{P}_{o}^{2n-1}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \coloneqq \left\{ p \in \mathbb{P}^{2n-1}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \middle| p(\omega) = -p(-\omega), \ \omega \in \mathcal{S}^{2} \right\}.$$
(1.21)

Satz 1.8 [73, Theorem 4.4 und Theorem 4.12] *Es gilt für alle* $n \in \mathbb{N}$ *:*

a)
$$\mathbb{P}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) = \bigoplus_{l=0}^{n} \mathcal{H}_{l}.$$
(1.22)

b)
$$\mathbb{P}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) = \mathbb{P}^{n}_{hom}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \oplus \mathbb{P}^{n-1}_{hom}\left(\mathcal{S}^{2}\right).$$
 (1.23)

Beweis. Ein Beweis der Aussage a) ist in [73] zu finden. Für den Beweis von b) folgen wir Ideen aus [48]. Dazu nehmen wir zunächst an, dass n gerade ist, d. h. es existiert ein $k \in \mathbb{N}_0$ mit n = 2k. Da sich Polynome in einen geraden und ungeraden Anteil zerlegen lassen, folgt

$$\mathbb{P}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) = \mathbb{P}_{e}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \oplus \mathbb{P}_{o}^{n-1}\left(\mathcal{S}^{2}\right) \,.$$

Die Inklusion $\mathbb{P}_{hom}^n(\mathcal{S}^2) \subset \mathbb{P}_e^n(\mathcal{S}^2)$ ist offensichtlich. Da nach Definition $\|\omega\|=1$ für alle $\omega \in \mathcal{S}^2$ gilt, folgt für alle geraden Polynome $p \in \mathbb{P}_e^n(\mathcal{S}^2) = \mathbb{P}_e^{2k}(\mathcal{S}^2)$:

$$p(\omega) = \|\omega\|^{2k} p\left(\frac{\omega}{\|\omega\|}\right)$$
$$= \|\omega\|^{2k} \sum_{i=0}^{k} \sum_{|m|=2i} c_m \left(\frac{\omega}{\|\omega\|}\right)^m$$
$$= \sum_{i=0}^{k} \sum_{|m|=2i} c_m \left(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2\right)^{k-i} \omega^m$$
$$= \sum_{|m|=2k} \tilde{c}_m \omega^m.$$

Insgesamt ist somit $\mathbb{P}_{hom}^{n}(\mathcal{S}^{2}) = \mathbb{P}_{e}^{n}(\mathcal{S}^{2})$ bewiesen. Analog zeigt man die Identität $\mathbb{P}_{hom}^{n-1}(\mathcal{S}^{2}) = \mathbb{P}_{o}^{n-1}(\mathcal{S}^{2})$, was die Behauptung impliziert.

Also bilden die Kugelflächenfunktionen vom Grad kleiner gleich n eine Basis von $\mathbb{P}^n(S^2)$. Des Weiteren ist durch den Beweis klar, dass die Gleichung (1.23) die Zerlegung eines Polynoms in einen geraden und in einen ungeraden Anteil beschreibt. Als Folgerung erhält man mit [73, Seite 77] das folgende Resultat.

Korollar 1.9 *Es gilt für alle* $n \in \mathbb{N}$ *:*

$$\mathbb{P}^{n}(\mathcal{S}^{2}) = \left(\bigoplus_{l=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \mathcal{H}_{2l}\right) \oplus \left(\bigoplus_{l=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} \mathcal{H}_{2l+1}\right).$$
(1.24)

Ist n gerade, so stellt der erste Summand aus (1.24) den geraden Anteil des Polynoms und der zweite Summand den ungeraden Anteil dar. **Lemma 1.10** (Dimension der Polynomräume) *Es gilt*

a) dim $\left(\mathbb{P}^n\left(\mathcal{S}^2\right)\right) = (n+1)^2$, b) dim $\left(\mathbb{P}^n\left(\mathcal{S}^2\right)\right) = (n+2)$

b) dim
$$\left(\mathbb{P}_{hom}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right)\right) = \binom{n+2}{2}$$

Beweis.

a) Da die Kugelflächenfunktionen vom Grad kleiner gleich
 n den Raum $\mathbb{P}^n(\mathcal{S}^2)$ aufspannen, folgt

dim
$$(\mathbb{P}^n(\mathcal{S}^2)) = \sum_{i=0}^n 2i + 1 = (n+1)^2.$$

b) Ist n gerade, so gilt

$$\dim\left(\mathbb{P}_{hom}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right)\right) = \dim\left(\mathbb{P}_{e}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right)\right) = \left(\bigoplus_{l=0}^{\frac{n}{2}}\mathcal{H}_{2l}\right) = \sum_{l=0}^{\frac{n}{2}}4l + 1 = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) = \binom{n+2}{2}.$$

Für ungerades n folgt die Behauptung aus

$$\dim\left(\mathbb{P}_{hom}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right)\right) = \dim\left(\mathbb{P}_{o}^{n}\left(\mathcal{S}^{2}\right)\right) = \left(\bigoplus_{l=0}^{\frac{n-1}{2}}\mathcal{H}_{2l+1}\right) = \sum_{l=0}^{\frac{n-1}{2}}4l + 3 = \binom{n+2}{2}.$$

Lemma 1.11 Jede reellwertige Funktion $f \in L^2(S^2)$ lässt sich in Kugelflächenfunktionen entwickeln, d. h. es gilt im L^2 -Sinne

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^{n} \hat{f}_{nk} Y_{nk}$$

wobei die Fourierkoeffizienten \hat{f}_{nk} gegeben sind durch

$$\hat{f}_{nk} = \langle f, Y_{nk} \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} \,. \tag{1.25}$$

Mit anderen Worten: Die Kugelflächenfunktionen Y_{nk} liegen dicht in $L^2(S^2)$ und bilden eine Orthonormalbasis dieses Raumes.

Beweis. Einen Beweis für das Lemma findet man in [19].

Lemma 1.12 (Parseval's Theorem) Es gilt mit \hat{f}_{nk} aus (1.25) die folgende Identität

$$||f||^2_{L^2(\mathcal{S}^2)} = \int_{\mathcal{S}^2} f(\omega)^2 d\omega = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^n \hat{f}^2_{nk}.$$

Für d = 3 ist es möglich, eine explizite Darstellung der Kugelflächenfunktionen anzugeben. Dazu schreibt man den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten und benutzt anschließend einen Separationsansatz. Für k = -n, ..., n ergibt sich folgende (reellwertige) Darstellung:

$$Y_{nk}(\theta,\varphi) = N_{nk} P_n^{|k|}(\cos\theta) \begin{cases} 1, & \text{falls } k = 0\\ \sqrt{2}\cos(k\varphi), & \text{falls } k > 0\\ \sqrt{2}\sin(|k|\varphi), & \text{falls } k < 0 \end{cases}$$
(1.26)

mit dem Normierungsfaktor

$$N_{nk} = (-1)^k \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-k)!}{(n+k)!}}.$$

Hierbei sind die zugeordneten Legendre-Polynome P_n^k definiert durch

$$P_n^k(x) = (-1)^k \left(1 - x^2\right)^{k/2} \frac{d^k}{dx^k} P_n(x) + \frac{d^k}$$

Die Kugelflächenfunktionen erfüllen die Paritätseigenschaft

$$Y_{nk}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^n Y_{nk}(\theta, \varphi),$$

da $P_n^{|k|}(-\cos\theta) = (-1)^{n+k} P_n^{|k|}(\cos\theta)$ gilt (vergl. [25]). Daher sind, wie bereits gesehen, genau diejenigen Kugelflächenfunktionen Y_{nk} gerade Funktionen, deren Grad n gerade ist. Ist der Grad ungerade, so sind die entsprechenden Kugelflächenfunktionen ungerade Funktionen.

Bezeichnung Die Funktion Y_{nk} wird Kugelflächenfunktion vom Grad n und der Ordnung k genannt.

Ausgehend von den Kugelflächenfunktionen werden nun die Sobolev-Räume über der Einheitssphäre eingeführt, wobei die Definition aus [92, 23] verwendet wird. Grundlegende Eigenschaften dieser Sobolev-Räume sind beispielsweise in [37, 36] zu finden, jedoch wird dort eine andere, äquivalente Definition dieser Räume genutzt.

Definition 1.13 (Sobolev-Raum über S^2)

Der **Sobolev-Raum** $H^{s}(\mathcal{S}^{2})$ ist für $s \geq 0$ definiert als die Menge aller Funktionen $f \in L^{2}(\mathcal{S}^{2})$, welche der Bedingung

$$\|f\|_{H^{s}(\mathcal{S}^{2})}^{2} \coloneqq \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^{n} \left(n^{2}+1\right)^{s} \hat{f}_{nk}^{2} < \infty$$

mit $\hat{f}_{nk} = \langle f, Y_{nk} \rangle_{L^2(S^2)}$ genügen. Hierbei wird die Norm durch das Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_{H^{s}(\mathcal{S}^{2})} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^{n} (n^{2} + 1)^{s} \hat{f}_{nk} \hat{g}_{nk}$$

induziert.

Offensichtlich gilt nach Parseval's Theorem (Lemma 1.12): $H^0(S^2) = L_2(S^2)$. Die Definition der Sobolev-Räume über der Sphäre zeigt eine starke Analogie zu den Sobolev-Räumen über \mathbb{R}^d [2]. Dort ist die obige Reihe durch ein Integral über \mathbb{R}^d ersetzt, d. h. die Norm ist gegeben durch

$$\|f\|_{H^{s}(\mathbb{R}^{d})}^{2} = \int_{\mathbb{R}^{d}} (\|x\|^{2} + 1)^{s} (\mathcal{F}(f)(x))^{2} dx,$$

wobe
i ${\mathcal F}$ die Fourier
transformation bezeichnet.

Lemma 1.14 Für s > 1 ist die Einbettung von H^s in $C(S^2)$ stetig, d. h. es gilt

$$\sup_{\omega \in \mathcal{S}^2} |f(\omega)| \le c \, \|f\|_{H^s} \qquad \forall f \in H^s$$

mit einer Konstante c > 0.

Beweis. Der Beweis wird analog zu [37] geführt. Es gilt mit der Cauchy-Schwarz Ungleichung für $N \ge 2$ und $\omega \in S^2$:

$$\left|\sum_{n=N}^{\infty}\sum_{k=-n}^{n}\hat{f}_{nk}Y_{nk}(\omega)\right| = \left|\sum_{n=N}^{\infty}\sum_{k=-n}^{n}\left(n^{2}+1\right)^{s/2}Y_{nk}(\omega)\left(n^{2}+1\right)^{s/2}\hat{f}_{nk}\right|$$
$$\leq \left(\sum_{n=N}^{\infty}\sum_{k=-n}^{n}\left(n^{2}+1\right)^{-s}Y_{nk}^{2}(\omega)\right)^{1/2}\|f\|_{H_{s}}$$
$$=:c_{s,N}\|f\|_{H_{s}}.$$

Unter Verwendung von Gleichung (1.15) folgt für s > 0

$$c_{s,N}^2 \leq \frac{1}{4\pi} \sum_{n=N}^{\infty} \frac{2n+1}{\left(n^2+1\right)^s} \leq \sum_{n=N}^{\infty} \frac{1}{n^s} \, .$$

Die Konstante $c_{s,N}$ ist für s > 1 endlich und konvergiert für $N \to \infty$ gegen 0. Daher konvergiert die Fourierreihe gleichmäßig gegen eine stetige Funktion, die fast überall mit f übereinstimmt.

Für s > 1 sind Punktauswertungen auf H^s also stetig, daher ist der Sobolev-Raum für s > 1 ein Hilbertraum mit reproduzierendem Kern (siehe [6, 19]).

1.3 Zonale Funktionen

Eine besondere Rolle in unseren Betrachtungen nehmen die zonalen Funktionen ein. Ein guter Überblick über zonale Funktion für d = 3 ist in [19, Kapitel 7] zu finden.

Definition 1.15 (Zonale Funktionen)

a) Eine Funktion $h: S^2 \times S^2 \to \mathbb{R}$, die durch die Eigenschaft

$$h(\omega,\eta) = \tilde{h}(\langle \omega,\eta \rangle), \qquad \omega,\eta \in \mathcal{S}^2$$
(1.27)

mit einer Funktion $\tilde{h}: [-1,1] \to \mathbb{R}$ charakterisiert ist, heißt zonal.

b) Sei \tilde{h} eine reelle Funktion auf dem Intervall [-1,1]. Wir nennen für festes $\xi \in S^2$ die Funktion

$$h_{\xi}: \mathcal{S}^2 \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \eta \longmapsto \tilde{h}(\langle \xi, \eta \rangle)$$

 ξ -zonal.

Da für $\omega, \eta \in S^2$ folgende Identität

$$|\omega - \eta|^2 = |\omega|^2 + |\eta|^2 - 2\langle \omega, \eta \rangle = 2\left(1 - \langle \omega, \eta \rangle\right)$$

gilt, bilden die zonalen Funktionen ein Analogon zu den radialen Funktionen in \mathbb{R}^3 , d. h. zu Funktionen g der Bauart $g(x) = \tilde{g}(|x|)$.

Nach Definition gilt für alle Rotationsmatrizen ρ die Identität $\langle \rho \omega, \rho \eta \rangle = \langle \omega, \eta \rangle$. Es ist bekannt, dass sich die zonalen Funktionen auch durch die Eigenschaft

 $h(\omega, \eta) = h(\rho\omega, \rho\eta)$ für alle orthogonalen Transformationen ρ

charakterisieren lassen [19].

Bemerkung Die Kugelflächenfunktionen Y_{nk} sind für $n \in \mathbb{N}$ und k = 0 zonal bezüglich des Nordpols $e_3 \coloneqq [0,0,1]^T$.

Beweis. Für $n \in \mathbb{N}$ und k = 0 gilt

$$Y_{nk}(\theta,\varphi) = N_{nk} P_n^{|0|}(\cos\theta) = N_{nk} P_n(\cos\theta)$$

Diese Funktionen hängen also nur vom Kosinus des Polarwinkels θ ab. Mit der Identität $\langle \xi, e_3 \rangle = \xi_3 = \cos(\theta)$ folgt die Behauptung.

Das Integral $\int_{S^2} h(\langle \xi, \eta \rangle) d\xi$ hängt nicht von η ab und es gilt

$$\int_{\mathcal{S}^2} h(\langle \xi, \eta \rangle) d\xi = 2\pi \int_0^{\pi} h(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta$$
$$= 2\pi \int_{-1}^1 h(t) \, dt \,. \tag{1.28}$$

Diese Integrationsregel ist in [68, Seite 188] zu finden.

Es bezeichne $L^{p,3}([-1,1])$ den Raum aller Funktionen über [-1,1] mit

$$\|f\|_{L^{p,3}[-1,1]}^{p} \coloneqq 2\pi \int_{-1}^{1} |f(t)|^{p} \,\mathrm{d}t < \infty.$$
(1.29)

Aufgrund der Integrationsformel (1.28) ist die Menge der ξ -zonalen Funktionen isomorph zu $L^{p,3}([-1,1])$. Somit kann man $L^p[-1,1]$ als Unterraum von $L^p(S^2)$ auffassen mittels

$$2\pi \|h\|_{L^{p}[-1,1]}^{p} = 2\pi \int_{-1}^{1} |h(x)|^{p} dx = \|h(\langle e_{3}, \cdot \rangle)\|_{L^{p}(\mathcal{S}^{2})}^{p}.$$
(1.30)

Mit Hilfe des Additonstheorems (Satz 1.6) und des Funk-Hecke Theorems (Satz 1.7) sieht man, dass ξ -zonale Funktionen in Legendre-Polynome entwickelt werden können.

Lemma 1.16 ([19], Theorem 7.3 und Seite 341)

Jede zonale Funktion f lässt sich in Legendre-Polynome entwickeln, d. h. es gilt im L^2 -Sinne für beliebiges $\xi \in S^2$:

$$f(\langle \xi, \cdot \rangle) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \left(L_n f \right) P_n(\langle \xi, \cdot \rangle), \qquad (1.31)$$

wobei $L_n f$ der n-te Legendre-Koeffizient ist. Ferner liegt f genau dann in $L^2(S^2)$, wenn

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \left(L_n f \right)^2 < \infty.$$

Beweis. Die Aussage b) folgt aus folgender Rechnung

$$\|f(\langle \xi, \cdot \rangle)\|_{L^{2}(S^{2})}^{2} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{m} \langle f(\langle \xi, \cdot \rangle), Y_{ml} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{m} \langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} L_{n} f P_{n}(\langle \xi, \cdot \rangle), Y_{ml} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{m} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^{n} (L_{n} f)^{2} \langle Y_{nk}, Y_{ml} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2} Y_{nk}(\xi)^{2}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (L_{n} f)^{2} \sum_{k=-n}^{n} Y_{nk}(\xi)^{2}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} (L_{n} f)^{2}.$$

Dabei wurden das Additionstheorem (Satz 1.6) und die Tatsache, dass die Kugelflächenfunktionen orthonormal zueinander sind, benutzt. $\hfill \Box$

1.4 Numerische Integration auf der Sphäre

Im Laufe dieser Arbeit werden numerische Integrationsformeln auf der Sphäre S^2 benötigt. Ziel dieses Abschnittes ist es daher, geeignete Quadraturformeln für das Integral

$$If \coloneqq \int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega \tag{1.32}$$

herzuleiten. Häufig steht die a-priori Information zur Verfügung, dass die zu integrierende Funktion f gerade ist, d. h. es gilt $f(\omega) = f(-\omega)$ für alle $\omega \in S^2$. Inwieweit dieses Wissen genutzt werden kann, um den Aufwand bei den verschiedenen Quadraturformeln zu minimieren, d. h. bestenfalls zu halbieren, wird jeweils kurz untersucht.

Wir stellen in diesem Abschnitt zwei Möglichkeiten vor, um das Integral If numerisch zu

berechnen. Zunächst wird die gängige **Produktregel-Methode** betrachtet, bei der die resultierende Integrationsformel aus bekannten 1D-Regeln zusammengesetzt wird. Daran anschließend werden die sogenannten **Extremalsysteme** vorgestellt, die in [73, 88] vorgeschlagen und analysiert werden. Auf alternative Quadraturmöglichkeiten wie das Verfahren von Maier und Fliege [17] oder Spherical Designs [33] wird in dieser Arbeit nicht eingegangen.

Bezeichnung Eine numerische Integrationsregel mit m Punkten hat die Form

$$Q_m f = \sum_{j=1}^m \mathsf{w}_j f(\eta_j)$$

mit Gewichten w_i und Einheitsvektoren η_i . Sie heißt exakt vom Grad n, falls

$$Q_m p = Ip \qquad \forall \ p \in \mathbb{P}^n\left(\mathcal{S}^2\right)$$

gilt, also alle Polynome p vom Grad kleiner gleich n exakt integriert werden.

Methode der Produktregeln

Zunächst wird die Produktregel-Methode vorgestellt. Zur weiteren Vertiefung sei auf [38, 87, 93] verwiesen.

Das Integral If wird mittels Polarkoordinaten gemäß (1.4) parametrisiert, d. h. es gilt

$$\int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) d\omega = \int_{0}^{2\pi} \int_{-1}^{1} \bar{f}(t,\varphi) \,\mathrm{d}t \,\mathrm{d}\varphi \tag{1.33}$$

mit $\bar{f}(t,\varphi)$ wie in (1.6). Es wird nun ein Separationsansatz angewandt, dabei wird die Funktion $\bar{f}(t,\varphi)$ als Produkt zweier Funktionen g(t) und $h(\varphi)$ aufgespalten. Anschließend werden diese beiden Funktionen mit Hilfe von 1D-Quadraturformeln integriert. Eine Produktregel hat also die Form

$$If \approx \int_{0}^{2\pi} \int_{-1}^{1} g(t)h(\varphi) dt d\varphi$$

=
$$\int_{0}^{2\pi} g(t) dt \int_{-1}^{1} h(\varphi) d\varphi$$

$$\approx \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_{i}g(t_{i})\right) \left(\sum_{j=1}^{n} \beta_{j}h(\varphi_{j})\right)$$
(1.34)

mit geeigneten 1D-Regeln

$$\int_{-1}^{1} g(t) dt \approx \sum_{i=1}^{m} \alpha_{i} g(t_{i}) \quad \text{und} \quad \int_{0}^{2\pi} h(\varphi) d\varphi \approx \sum_{j=1}^{n} \beta_{j} h(\varphi_{j}).$$

Für die Integration bezüglich des Azimutwinkels φ nutzen wir die zusammengesetzte Trapezregel

$$\int_{0}^{2\pi} h(\varphi) \,\mathrm{d}\varphi \approx \frac{\pi}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} h\left(\frac{2j\pi}{n+1}\right)$$

Diese integriert alle trigonometrischen Polynome bis zum Grad n exakt [13] und nach Definition der Kugelflächenfunktionen (siehe (1.26)) sind diese als Funktionen von φ trigonometrische Polynome vom Grad kleiner gleich n. Für $k \neq 0$ werden daher alle Kugelflächenfunktionen Y_{lk} mit $0 \leq l \leq n, k \in \{\pm 1, \ldots, \pm l\}$ exakt integriert, es gilt also

$$\frac{\pi}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} Y_{lk}\left(\theta, \frac{2\pi j}{n+1}\right) = 0 \qquad \forall \ 0 \le l \le n, k \ne 0.$$
(1.35)

Um sicher zu stellen, dass alle Kugelflächenfunktionen Y_{lk} vom Grad kleiner gleich n, also auch diejenigen mit k = 0, durch die zusammengesetzte Regel exakt integriert werden, muss die Integrationsformel

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, p(t_i) = \int_{-1}^{1} p(t) \, \mathrm{d}t \tag{1.36}$$

alle Polynome p vom Grad n exakt über dem Intervall [-1,1] integrieren, da $P_n^0 = P_n$ gilt. Folglich ist eine exakte Integrationsformel vom Grad n konstruiert.

Eine mögliche Quadraturformel in (1.36) ist die Gauß-Legendre Integrationsregel. In diesem Fall werden $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1$ Stützstellen benötigt, um alle Polynome über [-1, 1] vom Grad kleiner gleich n exakt zu integrieren. Weitere Wahlmöglichkeiten der 1D-Regel sind in [93] zu finden.

Die Produktregeln erlauben durch ihre Konstruktion eine einfache Modifikation, falls die zu integrierende Funktion gerade ist. Es bezeichne S_{-}^2 und S_{+}^2 die untere bzw. obere Halbsphäre.

$$\mathcal{S}_{-}^{2} \coloneqq \left\{ \omega = (\omega_{1}, \omega_{2}, \omega_{3}) \in \mathcal{S}^{2} \mid \omega_{3} \leq 0 \right\} \text{ und } \mathcal{S}_{+}^{2} \coloneqq \left\{ \omega = (\omega_{1}, \omega_{2}, \omega_{3}) \in \mathcal{S}^{2} \mid \omega_{3} \geq 0 \right\}.$$

Ist die Funktion f gerade, so gilt

$$\int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) \,\mathrm{d}\omega = 2 \int_{\mathcal{S}^2_+} f(\omega) \,\mathrm{d}\omega = 2 \int_{\mathcal{S}^2_-} f(\omega) \,\mathrm{d}\omega \,. \tag{1.37}$$

Es genügt also, nur über eine Halbsphäre zu integrieren und somit kann der numerische Aufwand bei der Produktregel-Methode im Wesentlichen halbiert werden, falls eine gerade Anzahl Stützstellen für die Integration bzgl. des Azimutwinkels verwendet wird.

Der verwendete Separationsansatz ist eine starke Annahme an die zu integrierende Funktion. Lässt sich diese nicht hinreichend gut durch ein solches Produkt zweier Funktionen approximieren, so führt dies unter Umständen zu schlechten Ergebnissen bei der numerischen Integration. Ein weiterer großer Nachteil der Produktregeln ist, dass die Integrationspunkte nicht gut auf der Sphäre verteilt sind, sie verdichten sich an den Polen, wie in Abbildung 1.1(a) zu sehen ist.



Extremalsysteme

Diese Integrationsmethode gehört zur Gruppe der interpolatorischen Integrationsformeln. Neben guten Integrationseigenschaften soll auch eine gute geometrische Verteilung der Integrationspunkte auf der Sphäre erreicht werden. Die Extremalsysteme wurden in [73, 88] studiert, wo auch weitere Eigenschaften dieser Punktmengen zu finden sind.

Da die Kugelflächenfunktionen vom Grad kleiner gleich n nach Lemma 1.8 eine Basis von $\mathbb{P}^n(\mathcal{S}^2)$ bilden, ist die Dimension dieses Raums gegeben durch (Lemma 1.10)

$$\dim \mathbb{P}^n\left(\mathcal{S}^2\right) = (n+1)^2 =: d_n \,.$$

Ist $\{\eta_1, \ldots, \eta_{d_n}\} \subset S^2$ eine Menge von Richtungen, so sei die $d_n \times d_n$ Matrix A definiert durch

$$A \coloneqq [Y_i(\eta_j)]_{i,j} \quad \text{für} \quad i, j = 1, \dots, d_n, \qquad (1.38)$$

wobei $Y_i = Y_{lm}$ für $i = (l+1)^2 - l + m$ gilt. In der Matrix A tauchen also alle Kugelflächenfunktionen vom Grad kleiner gleich n auf. Soll eine Menge von Funktionswerten $f(\eta_j), \eta_j \in S^2, j = 1, ..., d_n$, durch Kugelflächenfunktionen interpoliert werden, so sind die zugehörigen Koeffizienten b durch das lineare Gleichungssystem $A^T b = \bar{f}$ bestimmt, wobei $\bar{f} \in \mathbb{R}^{d_n}$ mit $\bar{f}_i = f(\eta_i), i = 1, ..., d_n$, gilt. Die in (1.38) definierte Matrix A^T ist also die zugehörige Interpolationsmatrix.

Definition 1.17 (Fundamental- und Extremalsystem)

a) Eine Menge von Stützstellen $\{\eta_1, \ldots, \eta_{d_n}\}$ heißt **Fundamentalsystem**, falls das einzige Polynom $p \in \mathbb{P}^n(S^2)$, das auf der Menge $\{\eta_1, \ldots, \eta_{d_n}\}$ verschwindet, das Nullpolynom ist. Diese Eigenschaft ist äquivalent dazu, dass

$$\det A \neq 0 \tag{1.39}$$

gilt.

b) Ein Fundamentalsystem $\{\eta_1, \ldots, \eta_{d_n}\}$ heißt **Extremalsystem**, falls der Wert

 $\left|\det\left([Y_i(\eta_j)]_{i,j}\right)\right|$

maximal ist bezüglich aller d_n -elementigen Punktmengen aus S^2 , d. h. es gilt mit der Matrix A aus (1.38):

$$|\det A| = \max_{\{\omega_j \mid j=1,\dots,n\} \subset S^2} |\det([Y_i(\omega_j)]_{i,j})|.$$
(1.40)

Bemerkung Sowohl (1.39) als auch (1.40) sind unabhängig von der Wahl der Basis [88] im Raum $\mathbb{P}^n(\mathcal{S}^2)$.

Sind die Punkte bestimmt, so ergeben sich die Integrationsgewichte gemäß [88] durch

$$G_{d_n} \mathsf{w} = \iota_n \,, \tag{1.41}$$

wobei $\iota_n \coloneqq (1, \ldots, 1)^T \in \mathbb{R}^{d_n}$ und $G_{d_n} \in \mathbb{R}^{d_n \times d_n}$ den reproduzierenden Kern von $\mathbb{P}^n(\mathcal{S}^2)$ ausgewertet in $\{\eta_1, \ldots, \eta_{d_n}\}$ bezeichnet. Diese Matrix lässt sich [100] darstellen durch

$$G_{d_n} = A^T A \,. \tag{1.42}$$

Zudem ist durch die Konstruktion als interpolatorische Integrationsformel sichergestellt, dass alle Polynome vom Grad kleiner gleich n exakt integriert werden.

Es ist bekannt [73, 88], dass bei Extremalsystemen das Interpolationsproblem gut konditioniert ist und die Integrationsgewichte daher mittels (1.41) stabil berechnet werden können. Für diese Systeme sind numerische Approximationen sowie die zugehörigen Integrationsgewichte für $n \leq 191$ verfügbar [88]. Zudem sind die Extremalsysteme gut auf der Sphäre verteilt, wie für n = 50 in Abbildung 1.1(b) illustriert ist.

Kapitel 2

Sphärische Radon- und Kosinustransformation

In diesem Kapitel führen wir die beiden oben genannten Transformationen sowie die Sinustransformation ein und geben einen Überblick über ihre Eigenschaften. Zur Vertiefung sind [21] und [26] zu empfehlen.

2.1 Sphärische Radontransformation

Wir betrachten zunächst die sphärische Radontransformation. Für $d \ge 3$ und $\eta \in S^{d-1}$ bezeichne $\eta^{\perp} \coloneqq \{\omega \in \mathbb{R}^d | \langle \omega, \eta \rangle = 0\}$ die Hyperebene durch den Ursprung mit Normalenvektor η . Weiter sei $S(\eta) \coloneqq S^{d-1} \cap \eta^{\perp}$ der Schnitt von S^{d-1} mit dieser Hyperebene.

Definition 2.1 (Sphärische Radontransformation)

Die (d-dimensionale) sphärische Radontransformation einer Funktion $f: S^{d-1} \to \mathbb{R}$ ausgewertet an der Stelle $\eta \in S^{d-1}$ ist definiert durch

$$Rf(\eta) = \frac{1}{w_{d-2}} \int_{S(\eta)} f(\omega) \,\mathrm{d}\omega \tag{2.1}$$

mit $S(\eta) \coloneqq S^{d-1} \cap \eta^{\perp}$. Hierbei bezeichnet d ω das natürliche Lebesgue Maß auf $S(\eta)$.

Der Vorfaktor $1/w_{d-2}$ in (2.1) ist so gewählt, dass konstante Funktionen auf sich selbst abgebildet werden. Einige Autoren verzichten auf diesen, weshalb die Formeln ggf. leicht differieren [20, 21]. In der Literatur wird diese Transformation im Spezialfall d = 3 auch **Funk-Transformation** genannt [20, 101]. Weiter sei auch darauf hingewiesen, dass der Begriff der sphärischen Radontransformation in der Literatur auch für eine andere Integraltransformation gebraucht wird. So wird auch die Spherical Mean Transformation

$$SMf(x,r) = \int_{z \in S(x,r)} f(z) da(z)$$

mit $S(x,r) = \{y \in \mathbb{R}^d \mid |x-y| = r\}$ bisweilen als sphärische Radontransformation bezeichnet [71].

Da offensichtlich $\eta^{\perp} = (-\eta)^{\perp}$ gilt und damit auch

$$Rf(\eta) = Rf(-\eta),$$

ist das Bild der sphärischen Radontransformation eine gerade Funktion auf S^{d-1} . Durch Aufspalten des Integrationsgebietes sieht man, dass die ungeraden Funktionen im Nullraum der Radontransformation liegen. Es ist also nur möglich, den geraden Anteil einer Funktion f aus Rf = g zu rekonstruieren.

Bezeichnung $C_e(S^{d-1})$ bezeichne den Raum der geraden, stetigen Funktionen und $L_e^2(S^{d-1})$ den Raum der geraden, quadratisch integrierbaren Funktionen auf S^{d-1} .

Nun wird speziell der Fall d = 3 betrachtet. Für festes $\eta \in S^2$ ist das Integrationsgebiet der Großkreis auf dessen Grundfläche η orthogonal steht. Als Rotationsachse bezeichnen wir die Achse, um welche die Einheitskreislinie in der (x, y)-Ebene gedreht werden muss, um das gewünschte Integrationsgebiet zu erhalten, siehe Abbildung 2.1.



Abbildung 2.1: $\eta \in S^2$ und entsprechender Großkreis.

Schreibt man $\eta \in S^2$ in Kugelkoordinaten mit Azimutwinkel $\varphi \in [0, 2\pi]$ und Polarwinkel $\theta \in [0, \pi]$, so sieht man, dass die Einheitsvektoren η_1^{\perp} und $\eta_2^{\perp} \coloneqq \eta_1^{\perp} \times \eta$, welche in Kugelkoordinaten durch

$$\eta_1^{\perp} = \begin{pmatrix} -\sin\varphi\\ \cos\varphi\\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \eta_2^{\perp} = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi\\ \cos\theta\sin\varphi\\ -\sin\theta \end{pmatrix},$$

gegeben sind, die Ebene

$$\eta^{\perp} = \left\{ x \in \mathbb{R}^3 \mid x = a\eta_1^{\perp} + b\eta_2^{\perp}, \ a, b \in \mathbb{R} \right\}$$

aufspannen. Daraus folgt die Darstellung

$$S^{2} \cap \eta^{\perp} = \left\{ x \in \mathbb{R}^{3} \mid x = a\eta_{1}^{\perp} + b\eta_{2}^{\perp}, \ a, b \in \mathbb{R} \text{ mit } a^{2} + b^{2} = 1 \right\}.$$
 (2.2)

Die Diskretisierung der Großkreise ausgehend von (2.2) ist eine Möglichkeit, die Vorwärtsanwendung der Radontransformation numerisch zu berechnen.

Lemma 2.2 Die sphärische Radontransformation kann mit Hilfe der Delta-Distribution als Integration über S^2 dargestellt werden. Es gilt

$$Rf(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{S^2} f(\omega)\delta(\eta^T \omega) \,\mathrm{d}\omega \,. \tag{2.3}$$

Beweis. Sei $\eta \in S^2$ beliebig und ϱ die Rotationsmatrix für die $\varrho\eta = e_3$ gilt, wobei e_3 den dritten kanonischen Einheitsvektor in \mathbb{R}^3 , also den Nordpol, bezeichnet. Wird das Integral mit Kugelkoordinaten gemäß(1.5) parametrisiert, so folgt mit der Substitution $\zeta = \varrho\omega$, $d\zeta = d\omega$ und der Orthogonalität von ϱ : Einerseits:

$$\begin{split} \int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) \delta(\eta^T \omega) \, \mathrm{d}\omega &= \int_{\mathcal{S}^2} f(\varrho^T \zeta) \delta(e_3^T \zeta) \, \mathrm{d}\zeta \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} f(\varrho^T \zeta(\theta, \varphi)) \, \delta(\cos \theta) \sin \theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} f(\varrho^T \xi(\theta, \varphi)|_{\theta=\pi/2}) \, \mathrm{d}\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} f\left(\varrho^T \left(\cos \varphi, \sin \varphi, 0\right)\right) \, \mathrm{d}\varphi \,. \end{split}$$

Andererseits:

$$\begin{split} \int\limits_{S(\eta)} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega &= \int\limits_{\mathcal{S}^2 \cap \eta^\perp} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega \\ &= \int\limits_{\mathcal{S}^2 \cap (\rho\eta)^\perp} f(\rho^T \zeta) \, \mathrm{d}\zeta \\ &= \int\limits_{0}^{2\pi} f\left(\varrho^T \left(\cos\varphi, \sin\varphi, 0\right)\right) \, \mathrm{d}\varphi \,, \end{split}$$

da $\mathcal{S}^2 \cap (\rho \eta)^{\perp} = \mathcal{S}^2 \cap e_3^{\perp} = \mathcal{S}^1$ gilt.

Bemerkung Der Beweis verläuft analog für eine beliebige Dimension $d \ge 3$ durch Einführung *d*-dimensionaler Kugelkoordinaten.

Wir berechnen nun den adjungierten Operator der Radontransformation bezüglich des L^2 -Skalarproduktes über der Sphäre S^2 :

$$\langle Rf, g \rangle_{L^{2}(S^{2})} = \int_{S^{2}} Rf(\eta)g(\eta) \, \mathrm{d}\eta$$
 (Definition)
$$= \int_{S^{2}} \frac{1}{2\pi} \int_{\langle \omega, \eta \rangle = 0} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega \, g(\eta) \, \mathrm{d}\eta$$
 (Definition)
$$= \int_{S^{2}} \frac{1}{2\pi} \int_{S^{2}} f(\omega) \delta(\langle \eta, \omega \rangle) \, \mathrm{d}\omega \, g(\eta) \, \mathrm{d}\eta$$
 (Lemma 2.2)
$$= \int_{S^{2}} f(\omega) \frac{1}{2\pi} \int_{S^{2}} g(\eta) \delta(\langle \eta, \omega \rangle) \, \mathrm{d}\eta \, \mathrm{d}\omega$$

$$= \langle f, Rg \rangle_{L^{2}(S^{2})}.$$
 (Definition)

Somit ist die folgende Aussage bewiesen.

~

Lemma 2.3 Die sphärische Radontransformation ist bezüglich des L_2 -Skalarproduktes selbstadjungiert auf S^2 , d. h. es gilt

$$\langle Rf, g \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} = \langle f, Rg \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)}.$$
(2.4)

Die folgenden Abbildungseigenschaften der Radontransformation sind wohlbekannt.

Lemma 2.4 (Eigenschaften der sphärischen Radontransformation) Es gelten die folgenden Aussagen:

- a) Für $f \in C_e(S^2)$ folgt aus Rf = 0, dass $f \equiv 0$.
- b) Ist $g \in C_e^4(S^2)$, so existing the function $f \in C_e(S^2)$ mit Rf = g.

Beweis. Einen Beweis findet man für $d \ge 3$ in [26] (Proposition 3.4.12 bzw. 3.6.4).

Die folgende Eigenschaft der Radontransformation ist für die spätere Herleitung des Inversionsverfahrens essentiell. Der Beweis, der z. B. in [21] zu finden ist, wird hier aufgrund der Bedeutung der Eigenschaft dennoch aufgeführt.

Lemma 2.5 (Rotationsinvarianz)

Die sphärische Radontransformation ist rotationsinvariant, das heißt für alle Drehmatrizen $\rho \in \mathbb{R}^{d \times d}$ mit $d \ge 3$ gilt

$$R(T_{\varrho}f(\eta)) = T_{\varrho}Rf(\eta) \quad mit \quad T_{\varrho}f(\eta) \coloneqq f(\varrho^{T}\eta).$$

$$(2.5)$$

Beweis. Sei ρ eine beliebige Rotationsmatrix, dann gilt insbesondere det $(\rho) = 1$ und $\rho^{-1} = \rho^T$. Mit der Substitution $\zeta = \rho\omega$, $d\zeta = d\omega$ folgt

$$\langle \varrho^{-1}\eta,\omega\rangle = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \langle \eta,\varrho\omega\rangle = \langle \eta,\zeta\rangle = 0.$$

Da die Einheitssphäre \mathcal{S}^{d-1} selbst rotations invariant ist, gilt insgesamt

$$T_{\varrho}(Rf)(\eta) = Rf(\varrho^{-1}\eta) \qquad \text{(Definition)}$$

$$= \frac{1}{w_{d-2}} \int_{\mathcal{S}^{d-1} \cap (\varrho^{T}\eta)^{\perp}} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega \qquad \text{(Definition)}$$

$$= \frac{1}{w_{d-2}} \int_{\mathcal{S}^{d-1} \cap \eta^{\perp}} f(\varrho^{-1}\zeta) \, \mathrm{d}\zeta \qquad \text{(Substitution)}$$

$$= R(T_{\varrho}f)(\eta). \qquad \text{(Definition)}$$

Die Radontransformation einer mit der Rotationsmatrix ρ rotierten Funktion kann also berechnet werden, indem zunächst die Radontransformation der Funktion selbst berechnet und anschließend das Ergebnis mit der Matrix ρ rotiert wird.
2.1.1 Inversionsformel von Funk

Schon Funk [20] erkannte, dass die sphärische Radontransformation im Fall d = 3 für eine bestimmte Klasse von Funktionen in eine Abeltransformation übergeht, und daher für diese Funktion leicht invertiert werden kann. Diese nützliche Eigenschaft der Transformation, die auch in höheren Dimensionen gilt, werden wir später in den Vorberechnungen ausnutzen.

Bezeichnet x_d die *d*-te Komponente von $x \in \mathbb{R}^d$, so lässt sich $\mathcal{S}^{d-1} \cap \{x \in \mathbb{R}^d | x_d = 0\}$ mit \mathcal{S}^{d-2} identifizieren. Jede Richtung $\xi \in \mathcal{S}^{d-1}$ kann also durch ein Paar (θ_{d-1}, φ) beschrieben werden mit $0 \leq \theta_{d-1} \leq \pi$ und $\varphi \in \mathcal{S}^{d-2}$.

Definition 2.6 (Rotationssymmetrische Funktion) *Eine Funktion* $f: S^{d-1} \longrightarrow \mathbb{R}$, *die durch*

$$f(\theta_{d-1}, \varphi) \coloneqq \tilde{f}(\theta_{d-1}) \quad \text{für alle } \varphi \in S^{d-2}$$

mit einer Funktion $\tilde{f}:[0,\pi] \to \mathbb{R}$ definiert ist, heißt rotationssymmetrisch.

Der folgende Satz ist in [21, Corollary C.2.11] zu finden (man beachte hierbei die unterschiedlichen Konstanten bei der Definition der sphärischen Radontransformation). Der Fall d = 3 geht auf Funk [20] zurück. Zum Beweis des allgemeinen Falls werden in [21] Ergebnisse aus [35] und [68] verwendet.

Satz 2.7 Für $d \ge 3$ seien $f, g \in C_e(S^{d-1})$ rotationssymmetrische Funktionen mit Rf = g. Dann lässt sich diese Gleichung für $0 < x \le 1$ schreiben als

$$\frac{2\omega_{d-3}}{x^{d-3}\omega_{d-2}} \int_{0}^{x} f\left(\cos^{-1}t\right) \left(x^{2} - t^{2}\right)^{\frac{d-4}{2}} dt = g\left(\sin^{-1}x\right).$$
(2.6)

Die Gleichung (2.6) wird für $t \in (0,1]$ gelöst durch

$$f(\cos^{-1}t) = \frac{1}{(d-3)!} t\left(\frac{1}{t}\frac{\partial}{\partial t}\right)^{d-2} \int_{0}^{t} g(\sin^{-1}x) x^{d-2} \left(t^{2} - x^{2}\right)^{\frac{d-4}{2}} \mathrm{d}x.$$
(2.7)

Setzt man $F(t) \coloneqq f(\cos^{-1} t)$ und $G(x) \coloneqq g(\sin^{-1} x)$, so lässt sich für d = 3 die Gleichung Rf = g gemäß (2.6) schreiben als Abel'sche Integralgleichung:

$$\frac{2}{\pi} \int_{0}^{x} \frac{F(t)}{\sqrt{x^2 - t^2}} \, \mathrm{d}t = G(x), \qquad x \in (0, 1].$$
(2.8)

Durch die Substitutionen $\tau = t^2$ und $\xi = x^2$ geht diese in eine (klassische) Abel'sche Integralgleichung über [24]. Nutzt man nun die bekannten Inversionsformeln [24], so ergibt sich für d = 3 die Inversionsformel [21]

$$F(t) = \frac{\partial}{\partial t} \int_{0}^{t} \frac{x G(x)}{\sqrt{t^2 - x^2}} \, \mathrm{d}x = G(0) + t \int_{0}^{t} \frac{G'(x)}{\sqrt{t^2 - x^2}} \, \mathrm{d}x, \qquad t \in (0, 1].$$
(2.9)

Hierbei erhält man die letzte Gleichung durch partielle Integration mit $u'(x) = \frac{x}{\sqrt{t^2 - x^2}}$ und v(x) = G(x) und anschließender Differentiation mit Hilfe der Leibnizregel. Ist F(0) = G(0), so gilt Gleichung (2.9) auch für t = 0.

Bemerkung Ist $g \in C_e^4(S^2)$ rotationssymmetrisch, so existiert nach Lemma 2.4 eine stetige Funktion f mit Rf = g, welche durch Konstruktion nach (2.7) rotationssymmetrisch ist.

Bemerkung Steht die a-priori Information, dass die zu rekonstruierende Funktion f rotationssymmetrisch ist, zur Verfügung, so muss zur Inversion nur eine Abel'sche Integralgleichung gelöst werden. Eine Möglichkeit, dies numerisch zu tun, wird in Kapitel 5.1 hergeleitet. Des Weiteren sei auf das numerische Testbeispiel im Anhang A.1 verwiesen.

Es ist möglich, dieses Resultat auch zur Inversion der Radontransformation für beliebige, nicht notwendigerweise rotationssymmetrische Funktionen zu nutzen. So schlägt Funk in [20] die folgende Rekonstruktionsmethode vor:

Um die Funktion f aus der Gleichung Rf = g zu rekonstruieren, schreibt man die Argumente von f und g in Kugelkoordinaten und setzt

$$F_{e_3}(\theta) \coloneqq \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\theta, \varphi) \,\mathrm{d}\varphi \quad \text{und} \quad G_{e_3}(\theta) \coloneqq \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta, \varphi) \,\mathrm{d}\varphi, \tag{2.10}$$

wobei θ den Polar-, φ den Azimutwinkel und e_3 den Nordpol bezeichnet. Die Funktion $F_{e_3}(\theta)$ (bzw. $G_{e_3}(\theta)$) ist die Mittelung von f (bzw. g) über den Breitenkreis, der durch den Polarwinkel θ bestimmt ist. Insbesondere sind die beiden Funktionen F_{e_3} uns G_{e_3} nach Definition rotationssymmetrisch und F_{e_3} kann daher mittels (2.9) aus G_{e_3} berechnet werden. Da F_{e_3} und f am Nordpol übereinstimmen, der in Kugelkoordinaten durch $\theta = 0$ und φ gegeben ist, gilt

$$\lim_{t \to 1^{-}} F_{e_3}\left(\cos^{-1} t\right) = f(e_3).$$
(2.11)

Somit ist die gesuchte Funktion f im Punkt e_3 rekonstruiert.

Um die Funktion f in einer beliebigen Richtung $\omega \in S^2$ zu berechnen, ist eine Koordinatentransformation durchzuführen, so dass ω auf dem Nordpol liegt. Anschließend wiederholt man die obige Prozedur, das heißt man berechnet gemäß (2.10) die rotationssymmetrischen Funktionen F_{ω}, G_{ω} und erhält die Funktion f im Punkt ω durch Lösung der Abel'schen Integralgleichung mit den neuen Daten.

Bei der numerischen Umsetzung führt dieses Vorgehen jedoch zu Problemen. So ist der numerische Aufwand hoch, da für jeden Rekonstruktionspunkt eine Abel'sche Integralgleichung der Form (2.8) gelöst werden muss. Liegen Datenfehler vor, d. h. beobachtet man nur g^{ε} mit $||g - g^{\varepsilon}|| \leq \varepsilon$, so wird der Fehler durch die notwendige Differentiation bei der Berechnung von (2.9) noch verstärkt. Des Weiteren sind die Daten g^{ε} in der Praxis nur auf einer diskreten Menge von S^2 bekannt, so dass die numerische Berechnung von G_{ω} mittels (2.10) fehleranfällig ist, denn auf einigen Breitenkreise liegen unter Umständen nur sehr wenige Datenpunkte. Zudem ändert sich für jeden Rekonstruktionspunkt die Lage der Datenpunkte, was die numerische Integration auf den Breitenkreisen zusätzlich erschwert.

2.1.2 Analytische Inversionsformeln für die Radontransformation

Es existieren bereits mehrere Inversionsformeln für die sphärische Radontransformation. Diese Formeln sind für beliebige Dimension $d \ge 3$ gültig [34, 77, 90], wir beschränken uns in diesem Kapitel jedoch auf den Spezialfall d = 3.

Die folgende analytische Inversionsformel, die für glatte Funktionen gilt, geht auf ein allgemeines Resultat von Helgason [34] zurück und wurde in [90] leicht modifiziert.

Satz 2.8 (Inversionsformel von Helgason) Für $f \in C_e^{\infty}(S^2)$ gilt

$$f(\xi) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \int_{0}^{x} (x^{2} - y^{2})^{-1/2} \int_{\langle \xi, \omega \rangle^{2} = 1 - y^{2}} Rf(\omega) \, \mathrm{d}\omega \, \mathrm{d}y \right]_{x=1},$$
(2.12)

wobei d ω das Oberflächenmaß auf der Menge der Sub-Sphären $\{\omega | \langle \xi, \omega \rangle^2 = 1 - y^2 \} \cap S^2$ bezeichnet.

Diese Inversionsformel lässt sich folgendermaßen umformen.

Satz 2.9 (Modifizierte Inversionsformel von Spodarev [90]) Für $f \in C_e^{\infty}(S^2)$ gilt

$$f(\xi) = -\frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{\mu} \frac{d}{d\mu} \int_{(\langle \xi, \omega \rangle^2 > \mu^2) \cap \mathcal{S}^2} \frac{Rf(\omega) |\langle \xi, \omega \rangle|}{(\langle \xi, \omega \rangle^2 - \mu^2)^{1/2}} \,\mathrm{d}\omega \right]_{\mu=0}$$

Diese Formel ist ein geeigneter Ausgangspunkt für theoretische Untersuchungen [90] und ermöglicht im Vergleich zur Formel von Helgason eine bessere geometrische Interpretation. Andererseits führen beide Inversionsformeln zu numerischen Schwierigkeiten, da die Stetigkeitsannahmen in der Praxis nicht gegeben sind. Zudem bewirkt sowohl die numerische Differentiation als auch die Berechnung des Integrals über Kugelsegmente mit endlich vielen Stützstellen, dass diese Formeln zur numerischen Inversion, ausgehend von gestörten Daten, nicht geeignet sind.

Bemerkung Der Vollständigkeit halber sei auf die Inversionsformeln aus [34, Theorem 1.7] verwiesen, die allerdings nur für **gerade** Raumdimensionen d gelten. In diesem Fall ist es möglich, einfache Inversionsformeln anzugeben, die nur Polynome des Laplace-Beltrami Operators enthalten.

Andere analytische Inversionsformeln, die auch im Fall $f \in L^p_e(S^2)$ gelten, sind in [77] zu finden. Dort wird die Methode der Rückprojektion für eine (verallgemeinerte) Radontransformation formuliert und es werden Bedingungen für eine Funktion $a : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ angegeben, so dass für alle $\xi \in S^2$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\mathcal{S}^2} a\left(\frac{\sin[d_{\text{geo}}(\xi,\omega)]}{\varepsilon}\right) Rf(\omega) \, \mathrm{d}\omega = \alpha f(\xi)$$

in der L^p -Norm auf S^2 gilt. Hierbei bezeichnet $d_{\text{geo}}(\xi, \omega) = \arccos(\langle \xi, \omega \rangle)$ den geodätischen Abstand auf der Sphäre und die Konstante α ist gegeben durch $\alpha = \sqrt{\pi} \int_0^\infty a(t) dt$. Es ist jedoch schwierig, Funktionen a zu finden, die den abstrakten Bedingungen genügen. Die Frage, wie eine Funktion *a* konkret konstruiert werden kann, die bei der numerischen Umsetzung zu guten Ergebnissen führt, wird nicht beantwortet. Das im Paper [77] angegebene Beispiel führt in unserem speziellen Fall, Berechnungen in der Dissertation von Herrn M. Spiess (Institut für Stochastik, Universität Ulm) folgend, auf die Funktion

$$a(\tau) = \frac{\tau (-\tau^2 + 2i)}{(2\tau^2 + i)^{5/2}}$$

Es stellt sich jedoch heraus, dass die Verwendung dieser Funktion a zu unbefriedigenden Resultaten führt. Dies liegt unter anderem daran, dass die Funktion sehr stark oszilliert und die numerische Integration daher stark fehlerhaft ist.

Dieser Ansatz ist der Inversionsmethode, die in dieser Arbeit hergeleitet wird, ähnlich. Allerdings wird in dem theoretischen Paper [77], wie bereits aufgezeigt, weder auf die numerische Umsetzung eingegangen, noch ist das angegebene Beispiel dazu geeignet.

2.2 Kosinus- und Sinustransformation

In diesem Kapitel werden zwei weitere Integraltransformationen eingeführt, die eng mit der sphärischen Radontransformation verknüpft sind.

Definition 2.10 (Kosinus- und Sinustransformation)

a) Für $\eta \in S^{d-1}$ ist die **Kosinustransformation** gegeben durch

$$Kf(\eta) = \int_{\mathcal{S}^{d-1}} |\langle \eta, \omega \rangle| f(\omega) \,\mathrm{d}\omega \,. \tag{2.13}$$

b) Die **Sinustransformation** ist für $\eta \in S^{d-1}$ definiert durch

$$Sf(\eta) = \int_{\mathcal{S}^{d-1}} \sqrt{1 - \langle \eta, \omega \rangle^2} f(\omega) \, \mathrm{d}\omega \,. \tag{2.14}$$

Der Name der Transformationen leitet sich aus der Identität $|\langle \eta, \omega \rangle| = |\cos(\langle (\eta, \omega))|$ bzw. $\sqrt{1 - \langle \eta, \omega \rangle^2} = |\sin(\langle (\eta, \omega))|$ ab.

Auch für diese Transformationen sieht man unmittelbar, dass ihr Bild eine gerade Funktion ist und dass ungerade Funktionen im Nullraum liegen. Die Kosinustransformation bildet konstante Funktionen auf das 2π -fache ab, und die Sinustransformation auf das π^2 -fache, wie man leicht mit Hilfe des Funk-Hecke Theorems (Satz 1.7) nachweisen kann.

Es gibt starke Zusammenhänge [10, 23] zwischen den eingeführten Integraltransformationen. Um diese formulieren zu können, benötigen wir die folgende Bezeichnung. **Bezeichnung** Für $d \ge 3$ ist der *Box-Operator* gegeben durch

$$\Box_d \coloneqq \frac{\Delta_{\mathcal{S}^{d-1}} + d - 1}{2w_{d-2}}, \qquad (2.15)$$

wobe
i $\Delta_{\mathcal{S}^{d-1}}$ den Laplace-Beltrami Operator auf \mathcal{S}^{d-1}
(Definition 1.1) bezeichnet. Fürd=3ergibt sich

$$\Box_3 = \frac{1}{4\pi} \Delta_{S^2} + \frac{1}{2\pi} \text{Id} \,.$$
 (2.16)

Satz 2.11 Es gelten die folgenden Identitäten zwischen den Transformationen

$$\Box_d K = R \,, \tag{2.17}$$

$$S = \frac{w_{d-1}}{2k_{d-2}} RK, \qquad (2.18)$$

wobei k_d das Volumen der d-dimensionalen Einheitskugel bezeichnet.

Beweis. Ein Beweis der ersten Aussage findet sich in [23], der Fall d = 3 geht auf [10] zurück. Die zweite Identität ist in [90] zu finden.

Bemerkung Anhand der Beziehung (2.17) sieht man, dass die Kosinustransformation deutlich stärker glättet als die sphärische Radontransformation. Ihr Bild muss im Wesentlichen mit dem Laplace-Beltrami Operator aufgeraut werden, um der Radontransformation zu entsprechen.

Der Beweis des folgenden Lemmas ist für $d \ge 2$ in [21, 26, Proposition 3.6.4 und 3.4.10] zu finden. Es fasst die analogen Aussagen zu Lemma 2.4 für die Kosinustransformation zusammen.

Lemma 2.12 (Eigenschaften der Kosinus- und Sinustransformation)

- a) Sind f und g beschränkte, gerade, integrierbare Funktionen mit Kf = Kg oder Sf = Sg, so gilt f = g fast überall.
- b) Ist $g \in C_e^6(S^2)$ beliebig, so existing the end of $f \in C_e(S^2)$ mit Kf = g.
- c) Die Kosinus- und die Sinustransformation sind selbstadjungiert bezüglich des L^2 -Skalarproduktes über S^2 .

In [5] ist eine Inversionsformel für die Kosinustransformation angegeben, die für d = 3 auf [10] zurück geht.

Satz 2.13 (Inversionsformel für die Kosinustransformation) *Es gilt*

$$f(\xi) = -\frac{1}{8\pi^2} \left[\frac{d}{d\mu} \int_{(\langle \xi, \omega \rangle^2 > \mu) \cap S^2} \frac{(\Delta_{S^2} + 2) K f(\omega) |\langle \xi, \omega \rangle|}{(\langle \xi, \omega \rangle^2 - \mu)^{1/2}} d\omega \right]_{\mu=0}$$

Diese Formel kann auch mittels des Zusammenhangs (2.17) aus den Inversionsformeln für die Radontransformation hergeleitet werden kann. Auch im Fall der Kosinustransformation bewirkt sowohl die Differentiation als auch die Berechnung des Integrals über Kugelsegmente mit endlich vielen Stützstellen, dass diese Inversionsformel nicht für numerische Berechnungen geeignet ist.

2.3 Schlechtgestelltheit der Operatoren

Die Kugelflächenfunktionen aus Abschnitt 1.2 spielen eine sehr wichtige Rolle bei der Untersuchung der betrachteten Integraltransformationen, da sie die Eigenfunktionen dieser Operatoren sind. Wir beschränken uns wieder auf den Fall d = 3, eine Verallgemeinerung auf höhere Dimensionen ist möglich [26].

Satz 2.14 (Eigenfunktionen der sphärischen Radon- und Kosinustransformation) Ist der Grad n der Kugelflächenfunktion gerade, so gilt für alle k = -n, ..., n:

$$R(Y_{nk}) = \nu_n Y_{nk} \quad mit \quad \nu_0 = 1 \ und \ \nu_n = (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{1 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (n-1)}{2 \cdot 4 \cdot \ldots \cdot n},$$
(2.19)

beziehungsweise

$$K(Y_{nk}) = \lambda_n Y_{nk} \quad mit \quad \lambda_0 = 2\pi, \ \lambda_2 = \frac{\pi}{2} \ und \ \lambda_n = 2\pi(-1)^{\frac{n-2}{2}} \frac{1 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (n-3)}{4 \cdot 6 \cdot \ldots \cdot (n+2)}.$$
(2.20)

Alle ungeraden Kugelflächenfunktionen werden sowohl von der Radon- als auch von der Kosinustransformation auf die Nullfunktion abgebildet.

Beweis. Ein Beweis ist in [26, Lemma 3.4.5 und 3.4.7] zu finden.

Da nach [26] die Ungleichung

$$1 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (n-1) \ge (2n)^{-1/2} \cdot 2 \cdot 4 \cdot \ldots \cdot n$$

gilt, folgt

$$|\nu_n| \ge (2n)^{-1/2}$$
.

Vergleicht man (2.19) und (2.20), so erhält man für $n \ge 2$

$$|\nu_n| = \frac{(n+2)(n-1)}{4\pi} |\lambda_n| \le \frac{n^2}{2\pi} |\lambda_n|.$$

Hieraus folgt unmittelbar für gerade n die Abschätzung

$$|\lambda_n| \ge \sqrt{2\pi} n^{-5/2}.$$

Mittels Induktion zeigt man die Ungleichung

$$1 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (n-1) \leq \left(\frac{3n}{2} + 1\right)^{-1/2} \cdot 2 \cdot 4 \cdot \ldots \cdot n.$$

Für gerades $n \ge 2$ ergibt sich daraus

$$|\nu_n| \le \left(\frac{3n}{2} + 1\right)^{-1/2}$$
 und $|\lambda_n| \le \sqrt{11} \pi n^{-5/2}$.

und insgesamt gelten somit für gerades $n \in \mathbb{N}$ die Abschätzungen:

$$\sqrt{1/2} n^{-1/2} \le |\nu_n| \le \sqrt{2/3} n^{-1/2}$$
 und $\sqrt{2\pi} n^{-5/2} \le |\lambda_n| \le \sqrt{11} \pi n^{-5/2}$.



Abbildung 2.2: Verhalten der Absolutwerte der Eigenwerte.

Abbildung 2.2 zeigt die Beträge der Eigenwerte für gerade n und die hergeleiteten oberen und unteren Schranken. Die Eigenwertfolge $\{\nu_n\}_n$ der Kosinustransformation konvergiert deutlich schneller gegen Null als die Eigenwertfolge $\{\lambda_n\}_n$ der Radontransformation.

Eine Möglichkeit, schlecht-gestellte Probleme zu klassifizieren, führt über die Asymptotik der Eigenwerte des betrachteten Operators. Ist A ein kompakter Operator mit Eigenwertfolge σ_n , $|\sigma_1| \ge |\sigma_2| \ge \ldots$ und Eigenfunktionen v_n , so lässt sich die verallgemeinerte Inverse gemäß [52] schreiben als

$$A^+g = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n^{-1} \langle g, v_n \rangle v_n \,.$$

Die Entwicklungskoeffizienten der verallgemeinerten Inversen sind also die Kehrwerte der Eigenwerte des Operators A. Liegen Datenfehler vor, die den Wert von $\langle g, v_n \rangle$ für ein (großes) $n \in \mathbb{N}$ verfälschen, so wird dieser Fehler in der Rekonstruktion um den Wert σ_n^{-1} verstärkt. Da die Koeffizienten der verallgemeinerten Inversen im Fall der Kosinustransformation schneller wachsen als bei der Radontransformation, haben Datenfehler bei der Inversion dieser Transformation einen deutlich stärkeren Einfluss auf die Qualität der Rekonstruktion als im Fall der Radontransformation. Daher ist bei der Inversion der Kosinustransformation eine stärkere Regularisierung notwendig, um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten.

Die Eigenfunktionen und Eigenwerte der Sinustransformation können ebenfalls angegeben werden.

Korollar 2.15 (Eigenfunktionen der Sinustransformation)

Ist der Grad n der Kugelflächenfunktion gerade, so bildet die Sinustransformation die Kugelflächenfunktionen Y_{nk} für k = -n, ..., n auf

$$S(Y_{nk}) = \mu_n Y_{nk} \quad mit \quad \mu_n = \frac{\pi}{2} \lambda_n \nu_n = \frac{2\pi}{(n+2)(n-1)} \left(\frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (n-1)}{2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot n}\right)^2 \quad (2.21)$$

ab. Alle ungeraden Kugelflächenfunktionen liegen im Nullraum der Transformation.

Beweis. Die Aussage folgt aus Satz 2.14 und Gleichung (2.18). Damit lässt sich für gerades n die Abschätzung $an^{-3} \leq \mu_n \leq bn^{-3}$ mit Konstanten a, b > 0 zeigen.

Alternativ kann die Aussage mit Hilfe des Funk-Hecke Theorems (Satz 1.7) unter Verwendung der Rodrigues-Formel (1.13) für die Legendre-Polynome bewiesen werden. \Box

Bemerkung Der Satz 2.14 kann zur Entwicklung numerischer Inversionsalgorithmen für die sphärische Radontransformation genutzt werden. Beispielsweise wird in [94] eine Tikhonov-Regularisierung mit der Sobolev-Halbnorm als Regularisierungsterm vorgeschlagen. Dazu werden die Daten zunächst in Kugelflächenfunktionen entwickelt und das resultierende Gleichungssystem zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten der Lösung anschließend mit einer Landweber-Iteration gelöst.

2.4 Glättungseigenschaften in einer Sobolev-Skala

Die Annahme, dass die gemessenen Daten im Raum $C_e^{\infty}(\mathcal{S}^{d-1})$ liegen, ist in der Praxis nicht erfüllt. Als Ausweg werden [11] die Eigenschaften der Transformationen zwischen Sobolev-Räumen (siehe Definition 1.13) studiert.

Eine weitere Möglichkeit die Schlecht-Gestelltheit von Operatoren zu klassifizieren ist, deren Glättungsverhalten in einer Sobolev-Skala zu untersuchen. Da die Sobolev-Räume auf der Sphäre gerade mit Hilfe der Kugelflächenfunktionen definiert sind, stellt sich heraus, dass dieser Ansatz auf der Sphäre analog zum Fallen der Eigenwerte der Transformationen ist. In [92] wurden die Glättungseigenschaften der Operatoren in einem allgemeineren Kontext untersucht. Das folgende Resultat ist [23] entnommen.

Satz 2.16 Für gerade Funktionen $f \in H^s(S^{d-1})$ existieren Konstanten b, c > 0, so dass

$$b^{-1} \|f\|_{H^{s}(\mathcal{S}^{d-1})} \leq \|Rf\|_{H^{s+(d-2)/2}(\mathcal{S}^{d-1})} \leq b\|f\|_{H^{s}(\mathcal{S}^{d-1})}, \qquad (2.22)$$

$$c^{-1} \|f\|_{H^{s}(\mathcal{S}^{d-1})} \leq \|Kf\|_{H^{s+(d+2)/2}(\mathcal{S}^{d-1})} \leq c\|f\|_{H^{s}(\mathcal{S}^{d-1})}.$$

Die sphärische Radontransformation ist also ein beschränkter Operator zwischen den Sobolev-Räumen $H^s(S^{d-1})$ und $H^{s+(d-2)/2}(S^{d-1})$. Für d = 3 glättet sie in der Sobolev-Skala um eine halbe Stufe, während die Kosinustransformation sogar um 5/2 Stufen glättet. Für beide Transformationen entspricht dieser Wert, wie bereits erwähnt, genau der Asymptotik ihrer Eigenwertfolge, die im letzten Abschnitt betrachtet wurde.

Beweis. Ein Beweis des Satz ist in [92] oder in [23] zu finden.

Kapitel 3

Anwendungsbeispiel aus der Stereologie

Die Stereologie zielt darauf ab, höher-dimensionale Eigenschaften eines geometrischen Objektes ausgehend von niedriger-dimensionalen Informationen abzuleiten. Als wichtiges Beispiel behandelt sie das Verhältnis von Schnitten durch ein Objekt zu dem Objekt selbst [7]. Ziel ist es, nur bestimmte Eigenschaften des Objektes aus diesen Daten zu bestimmen, statt eine vollständige Rekonstruktion durchzuführen. Hierzu werden oft Methoden aus der stochastischen Geometrie verwendet.

Anwendungen findet die Stereologie zumeist in den Materialwissenschaften. Viele Materialien wie zum Beispiel faserverstärkter Beton, Glasfaser-Verbundstoffe und viele andere Verbundwerkstoffe enthalten viele annähernd geradlinige Filamente und die Materialeigenschaften dieser Stoffe hängen in großem Maße von der räumlichen Anordnung dieser Fasern ab. Im Fall der Verbundstoffe werden durch die Verteilung dieser fadenförmigen Strukturen beispielsweise deren Festigkeit und auch andere Materialeigenschaften beeinflusst [44]. Um den Produktionsprozess und die Eigenschaften des Materials verbessern zu können, versucht man daher Informationen über die Verteilung der Filamente im produzierten Material zu erhalten.

Ein weiteres interessantes Beispiel aus dieser Materialklasse ist die Gasdiffusionslage einer Polymer-Brennstoffzelle, die auch aus mehr oder weniger geradlinigen Filamenten besteht. Eine Synchrotron-Aufnahme einer solchen Diffusionslage, die vom ZSW Ulm zur Verfügung gestellt wird, ist in Abbildung 3.1(a) zu sehen. Diese dünne Schicht hat mehrere Aufgaben in der Brennstoffzelle. Zum einen sollen die beiden Gase, Wasserstoff und





(a) Aufnahme einer Gasdiffusionslage (Bild ist Eigentum des ZSW Ulm)

(b) Realisierung eines Zylinder-Prozesses

Abbildung 3.1: Gasdiffusionslage und modelliertes Vlies.

Sauerstoff durch sie zur Elektrolytmembran gelangen, zum andern muss das bei der Reaktion entstehende Wasser (in Form von Wasserdampf) sowie die Wärme abtransportiert werden. Dringt zu viel Gas gleichzeitig in die Brennstoffzelle und kann das entstandene Wasser nicht schnell genug abtransportiert werden, so wird die Leistungsfähigkeit der Brennstoffzelle vermindert. Umgekehrt muss zu jeder Zeit Wasser in der Brennstoffzelle beziehungsweise in der Membran enthalten sein, damit die Leitfähigkeit, die für die chemische Reaktion notwendig ist, erhalten bleibt. Daher möchte man Gasdiffusionslagen modellieren und diese Vorgänge am Computer simulieren , um eine geeignete Verteilung der Fasern zu bestimmen, anstatt viele teure Prototypen fertigen zu müssen.

Eine gute Möglichkeit zur Modellierung dieser Stoffe sind stochastische Faser-Prozesse [81]. Zwei sehr wichtige Charakteristika dieser Prozesse sind die Richtungsverteilung und die Intensität.

- Die Intensität I: Sie kann als erwartete Gesamtlänge der Fasern pro Einheitsvolumen interpretiert werden. Im Falle von Linien-Prozessen ist sie ein Maß, wie viele Fasern im Beobachtungsfenster zu sehen sind. Je größer die Intensität ist, desto mehr Fasern liegen erwartungsgemäß im Beobachtungsfenster B.
- Die Richtungsverteilung r: Sie ist eine symmetrische Verteilung auf der Sphäre und beschreibt die Verteilung der Tangentialrichtung in einem typischen Punkt, d. h. in einem zufällig unter allen Positionen im Fasersystem gewählten Punkt. In der Literatur ist auch der Name Richtungsrose zu finden [90].

Ausgehend vom Material, das im Folgenden als Realisierung eines solchen Prozesses aufgefasst wird, soll die zugrundeliegende Richtungsverteilung sowie die Intensität des Faser-Prozesses geschätzt werden. Ein Schätzer für die Intensität [80], der im Fall von Poisson Prozessen für eine Klasse von Richtungsverteilungen optimal ist, ist bereits bekannt. Die Schätzung der Richtungsverteilung eines Faser-Prozesses ist jedoch noch offen, insbesondere wenn die Verteilung eine Dichte bezüglich des Lebesgue-Maßes besitzt. Eine Möglichkeit, die Richtungsverteilung zu schätzen, führt über die sogenannte **Schnittzahlrose**.

Zunächst wird kurz in die Theorie von Faser-Prozessen in \mathbb{R}^3 eingeführt. Eine formale Definition sowie ein vertiefender Einblick in diese Prozesse (auch im Fall \mathbb{R}^2) ist in [83, 91] zu finden. Um Missverständnisse zu vermeiden, sei darauf hingewiesen, dass es sich hierbei nicht um zeitabhängige Prozesse handelt, sondern um geometrische. Anschaulich ist ein Faser-Prozess Φ eine zufällige Anordnung von Fasern in \mathbb{R}^3 , wie sie beispielsweise in Abbildung 3.1(b) gezeigt ist.

- a) Unter einer **Faser** verstehen wir eine C^1 -glatte Kurve in \mathbb{R}^3 , die möglicherweise unendlich lang ist. Mit t(x) bezeichnen wir die Tangentialrichtung der Faser im Punkt $x \in \mathbb{R}^3$. Im Fall von Linien-Prozessen entspricht t(x) gerade der Richtung der Linie.
- b) Die konvexe (nicht leere) Menge $B \in \mathbb{R}^3$ bezeichnet das **Beobachtungsfenster**, in dem der Prozess beobachtet werden kann. In den durchgeführten Simulationen wird die Einheitskugel in \mathbb{R}^3 als Beobachtungsfenster gewählt. Bei den realen Datensätzen ist der Ausgangspunkt ein 3D-Bild des zu untersuchenden Stoffes, das beispielsweise durch Computertomographie gewonnen wird. Aus diesem Voxel-Bild wird dann eine Kugel ausgeschnitten, um die Schnittzahlrose zu schätzen.

Für die Modellierung der zuvor erwähnten Materialien sind insbesondere Linien- und auch Zylinderprozesse [89, 96] von Interesse, da die Filamente dieser Materialien eine fast geradlinige Struktur aufweisen. Linien-Prozesse sind sehr einfache Vertreter der Klasse der Faser-Prozesse. Dilatiert man diese z. B. mit Kugeln so erhält man Zylinder-Prozesse [82, 96], welche in den Simulationen zu dieser Arbeit verwendet werden. Es darauf hingewiesen, dass es auch möglich ist, Prozesse mit gekrümmten Fasern zur Modellierung zu verwenden und die später hergeleiteten Methoden auch in dieser Situation einzusetzen.

In dieser Arbeit werden der Einfachheit halber nur stationäre Poisson-Zylinder-Prozesse betrachtet. Hierbei bedeutet der Zusatz "stationär", dass die Verteilung des Prozesses invariant unter Verschiebungen in \mathbb{R}^3 ist. Aus Sicht der Anwendung entspricht dies der sinnvollen Annahme, dass die Fasern im gesamten Material die gleiche Verteilung haben. Es spielt also keine Rolle, welches Teilstück des gesamten Stoffes zur Untersuchung herangezogen wird. Die Eigenschaft "Poisson" besagt insbesondere, dass es keine Interaktion zwischen den einzelnen Zylindern gibt, was die Realisierung solcher Prozesse am Computer vereinfacht.

Wir nehmen nun an, dass die Richtungsverteilung r eine Dichte f bezüglich des Lebesgue-Maßes auf der Sphäre besitzt. Die Richtungsverteilung lässt sich also für alle Borelmengen $A \subset S^2$ darstellen durch

$$r(A) = \int_A f(\omega) \,\mathrm{d}\omega$$
.

Das Aufgabe besteht nun darin, diese Dichte zu schätzen.

Es gibt schon zahlreiche Ansätze, um die Richtungsverteilung ausgehend von 3D-Voxel-Bildern des Prozesses oder des Materials zu schätzen [3, 44, 76, 79, 99]. Alternativ kann man auch aus den gemessenen CT-Daten die Richtungsverteilung rekonstruieren [45]. In dieser Arbeit soll ein anderer Zugang [9, 42] verfolgt werden, der aus der Stereologie motiviert ist und auf der Anzahl der Schnitte des beobachteten Prozesses mit Ebenen in einem beschränkten Beobachtungsfenster beruht. Die sogenannte **Schnittzahlrose** $g(\omega)$ mit $\omega \in S^2$ ist die Intensität des resultierenden Punktprozesses $\Phi \cap \omega^{\perp}$, also die erwartete Anzahl Schnittpunkte des Prozesses mit dem Normalebene ω^{\perp} pro Einheitsfläche. Mit Hilfe einer Schätzung dieser stereologischen Größe soll auf die Richtungsverteilung des Prozesses rückgeschlossen werden. Die Kosinustransformation beschreibt diesen Zusammenhang, es gilt nämlich [42]

$$g = I(Kf). (3.1)$$

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass auch für eine diskrete Richtungsverteilung der Zusammenhang zwischen der Verteilung und der Schnittzahlrose durch eine geeignete Modifikation der Kosinustransformation beschrieben wird [42], welche im Allgemeinen nicht die Form einer Integralgleichung aufweist.

Um die gesuchte Dichte der Richtungsverteilung aus (3.1) zu rekonstruieren, muss ein schlecht gestelltes Problem in Form einer Integralgleichung erster Art [91] gelöst werden. Es ist bekannt [61], dass die Dichte aus dem Zusammenhang (3.1) eindeutig bestimmt ist. Eine Inversionsformel für den in dieser Arbeit betrachteten dreidimensionalen Fall ist in [63] angegeben. Für d = 2, den planaren Fall, ist eine Inversionsformel in [62] und für beliebige Dimensionen $d \ge 3$ unter der Annahme, dass die Richtungsverteilung eine Dichte bezgl. des Lebesgue-Maßes besitzt, in [90] zu finden. Jedoch sind diese Formeln für die numerische Berechnung in praktischen Anwendungen, ausgehend von einer diskreten Schätzung der Schnittzahlrose, nicht geeignet.

Wir nehmen nun an, dass für eine diskrete Menge an Richtungen die Anzahl der Schnittpunkte des Prozesses mit den zugehörigen Normalebenen pro Einheitsfläche als Daten zur Verfügung stehen. Dann ist das inverse Problem (3.1) numerisch zu lösen, um die Dichte der Richtungsverteilung aus den beobachteten, ggf. gestörten Werten zu schätzen.

Der Vollständigkeit halber wird kurz der zweidimensionale Fall betrachtet. Die Fasern sind nun in einer Ebene verteilt und die Schnittzahlrose ist die erwartete Anzahl von Schnitten des Prozesses mit Geraden durch den Ursprung, die gewöhnlich mit ihrem Richtungsvektor identifiziert werden. Ein Überblick über bisher bekannte Verfahren, die für diesen Fall konzipiert sind, ist in [9] und [91] zu finden. In [60] wurde die Verwendung der approximativen Inversen für den planaren Fall vorgeschlagen und mit anderen Methoden verglichen.

Ein möglicher Ansatz, das inverse Problem im dreidimensionalen Fall zu lösen, wurde in [9, 42] vorgestellt und in [22] wurden die stochastischen Eigenschaften des resultierenden Schätzers untersucht. Die zentrale Idee dieser Methode ist, nur diskrete Verteilungen als Richtungsverteilung zuzulassen, das heißt, den Träger der Rekonstruktion auf eine endliche Punktemenge von \mathcal{S}^2 einzuschränken. Durch diese Restriktion des Urbildraumes ist das inverse Problem (3.1) gut gestellt, weshalb keine Regularisierung zur Lösung nötig ist. Die Schätzer für die Richtungsverteilung ergeben sich als Lösung von Optimierungsproblemen, die zum Teil aus Ideen der konvexen Geometrie resultieren. Diese Methode, die wir später kurz **KP-Methode** (nach den Autoren Kiderlen und Pfrang [41, 42]) nennen, wird in Abschnitt 6.2 detaillierter vorgestellt. Ihr großer Nachteil ist, dass durch die Einschränkung des Urbildraumes auf diskrete Maße, die (optische) Interpretation des Ergebnisses schwierig oder sogar unmöglich ist. Kleine Datenfehler können nämlich das Aussehen der Lösung sehr stark verändern (siehe beispielsweise [60] oder Abbildung 6.10). Um eine kontinuierliche Verteilungsdichte zu erhalten, was insbesondere eine visuelle Interpretation der Rekonstruktion ermöglicht, ist ein Nachbearbeitungsschritt notwendig, der allerdings einen großen Einfluss auf die Qualität des Ergebnisses haben kann (siehe Abschnitt 6.2).

Wir leiten im Folgenden das Verfahren der Approximativen Inversen zur numerischen Inversion der Kosinustransformation her. Mit Hilfe dieses Verfahrens ist es möglich, die Dichte der Richtungsverteilung direkt aus der Schnittzahlrose zu rekonstruieren. Die numerischen Ergebnisse sind in Kapitel 6.3 zu finden. Dort werden auch beide Verfahren verglichen und Vor- bzw. Nachteile aufgezeigt.

Bemerkung Im gemeinsamen Preprint [75] mit Malte Spiess (Universität Ulm) werden die asymptotischen Eigenschaften des durch die Approximative Inverse induzierten Schätzers untersucht. Unter anderem wird die fast sichere Konvergenz des Schätzers in der Supremumsnorm gezeigt und sein Verhalten bei großen Abweichungen beschrieben. Außerdem werden Berry-Esseen Schranken, inklusive Formeln für die Varianz, hergeleitet und aus einem Grenzwertsatz asymptotische Tests für die Richtungsverteilung abgeleitet und numerisch getestet.

Kapitel 4

Approximative Inverse (AI)

Sowohl die sphärische Radon- als auch die Kosinustransformation sollen mit Hilfe des Verfahrens der Approximativen Inversen (AI) numerisch invertiert werden. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird zunächst die Idee des Verfahrens vorgestellt und anschließend an die betrachteten Transformationen angepasst. Bei der Anwendung der Approximativen Inversen ist es notwendig, den auftretenden Regularisierungsparameter γ (datenabhängig) festzulegen. Eine Strategie dazu wird im zweiten Abschnitt vorgestellt. Daran anschließend werden die Nullräume der betrachteten Transformationen untersucht, um geeignete Messrichtungen auszuwählen. Das Kapitel wird mit Bedingungen an die sogenannten Mollifier geschlossen, welche die regularisierende Wirkung des Verfahrens sicherstellen.

4.1 Idee des Verfahrens

Die Approximative Inverse (AI) ist ein Regularisierungsverfahren, welches in [59] eingeführt und seitdem vielfach erfolgreich [27, 43, 47, 53, 55, 84] angewendet wurde.

Wir stellen nun das Konzept des Verfahrens vor. Dazu sei $B: X \to Y$ ein linearer, stetiger Operator zwischen den Hilberträumen X und Y. Die Aufgabe besteht darin, für gegebene Daten $g \in Y$ das inverse Problem Bf = g zu lösen. Ist dieses Problem schlecht gestellt, so haben bei direkter Berechnung von f kleine Fehler in den Daten einen sehr starken Einfluss auf die Lösung. Daher ist die Anwendung eines Regularisierungsverfahren zur Rekonstruktion von f erforderlich. Likht [49] erkannte, dass der Inversionsprozess stabilisiert werden kann, indem nur lineare Funktionale der gesuchten Lösung rekonstruiert werden. Eine Idee der Approximativen Inversen ist, dies auszunutzen und eine geglättete Version der Lösung, nämlich das lineare Funktional

$$f_{\gamma}(x) \coloneqq \langle f, e_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_X \tag{4.1}$$

zu berechnen mit der Eigenschaft

$$f_{\gamma} \to f \quad \text{für} \quad \gamma \searrow 0.$$

Der sogenannte **Mollifier** e_{γ} ist also eine Approximation an die Delta-Distribution. Um die gesuchte Lösung f_{γ} (ohne die Kenntnis von f) berechnen zu können, muss ein Hilfsproblem gelöst werden. Zu geeignetem Mollifier ist der **Rekonstruktionskern** ψ_{γ} aus der Gleichung

$$B^*\psi_{\gamma}(x,\cdot) = e_{\gamma}(x,\cdot) \tag{4.2}$$

zu bestimmen, wobei $B^* : Y \to X$ den adjungierten Operator zu B bezeichnet. Ist das Problem (4.2) gelöst, so folgt unter Verwendung von Bf = g:

$$f_{\gamma}(x) = \langle f, e_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_{X}$$
$$= \langle f, B^{*}\psi_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_{X}$$
$$= \langle g, \psi_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_{Y}.$$

Die Lösung f_{γ} lässt sich also durch ein Skalarprodukt der Datenfunktion g mit dem Rekonstruktionskern ψ_{γ} darstellen. Wird dieses Skalarprodukt numerisch berechnet, so führt dies offenbar zu leicht implementierbaren, schnellen Algorithmen. Allerdings ist die Lösung des Hilfsproblems (4.2) notwendig, um das Verfahren einsetzen zu können.

Bemerkung Man beachte, dass die Bestimmung des Rekonstruktionskernes aus (4.2) unabhängig von den gegebenen Daten g ist. Daher kann dieser vorberechnet werden, was zu sehr effizienten Algorithmen führt.

In [57] wurde die Idee der klassischen Approximativen Inversen erweitert. Durch eine Modifikation des Inversionsverfahrens lässt sich die Anwendung eines linearen Operators L auf die unbekannte Funktion direkt aus den Daten berechnen. Ist dieser Operator ein Differentialoperator, so können diese Informationen beispielsweise zur automatischen Kantenbestimmung verwendet werden [28, 57].

Um eine geglättete Version von Lf nämlich

$$(Lf)_{\gamma}(x) \coloneqq \langle Lf, e_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_X$$

direkt aus den Daten g zu berechnen, ist ein modifiziertes Hilfsproblem zu lösen. Für einen geeigneten Mollifier e_{γ} löse der Rekonstruktionskern ψ_{γ}^{L} die Gleichung

$$B^*\psi^L_{\gamma}(x,\cdot) = L^*e_{\gamma}(x,\cdot), \qquad (4.3)$$

wobei L^* den adjungierten Operator zu L bezeichnet. Es folgt

$$(Lf)_{\gamma}(x) = \langle Lf, e_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_{X} = \langle f, L^{*}e_{\gamma}(x, \cdot) \rangle_{X}$$
$$= \langle f, B^{*}\psi_{\gamma}^{L}(x, \cdot) \rangle_{X} = \langle g, \psi_{\gamma}^{L}(x, \cdot) \rangle_{Y}.$$

Also kann $(Lf)_{\gamma}$ als Skalarprodukt eines vorberechneten Rekonstruktionskerns ψ_{γ}^{L} mit der Datenfunktion g darstellt und somit direkt aus den Daten berechnet werden.

Die Approximative Inverse wird nun an die betrachteten Operatoren angepasst. Es sei dazu $X = Y = L^2(S^2)$ und A bezeichne entweder die Radon-, die Kosinus- oder die Sinustransformation. Aufgrund von (2.4) beziehungsweise Lemma 2.12 ist A ein stetiger Operator, der bezüglich des L^2 -Skalarproduktes selbstadjungiert ist, d. h. es gilt $\langle Af, g \rangle_{L^2(S^2)} = \langle f, Ag \rangle_{L^2(S^2)}$ für alle $f, g \in L^2(S^2)$. Das Hilfsproblem (4.2) hat daher in diesem Fall für jeden Rekonstruktionspunkt $\xi \in S^2$ die folgende Gestalt:

$$A\psi_{\gamma}(\xi, \cdot) = e_{\gamma}(\xi, \cdot). \tag{4.4}$$

Der gewählte Mollifier soll nun zwei Bedingungen erfüllen:

- 1. Das Bild von A enthält für die betrachteten Operatoren nur gerade Funktionen. Daher muss der Mollifier für einen festen Rekonstruktionspunkt ξ eine gerade Funktion sein, um die Lösbarkeit von (4.4) zu ermöglichen.
- 2. Weiter soll der Mollfier der Eigenschaft

$$\int_{\mathcal{S}^2} e_{\gamma}(\xi, \omega) \, \mathrm{d}\omega = 1 \qquad \text{für alle } \xi \in \mathcal{S}^2, \, \gamma > 0 \tag{4.5}$$

genügen. Diese Forderung garantiert, dass der Mittelwert der Lösung mit dem Mittelwert der gesuchten Lösung übereinstimmt und nicht von γ abhängt. Andernfalls würde dies zu unerwünschten Effekten bei der Rekonstruktion führen.

In unserem Fall lässt sich f_{γ} also für alle $\xi \in \mathcal{S}^2$ schreiben als

$$f_{\gamma}(\xi) = \int_{\mathcal{S}^2} f(\omega) e_{\gamma}(\xi, \omega) d\omega$$
$$= \int_{\mathcal{S}^2} g(\omega) \psi_{\gamma}(\xi, \omega) d\omega \rightleftharpoons A_{\gamma}^{\dagger} g(\xi).$$
(4.6)

Um diesen Ansatz numerisch anwenden zu können, ist das Integral mit Hilfe einer Quadraturformel aus Abschnitt 1.4 zu berechnen. Der Algorithmus besteht also aus zwei Schritten:

```
\begin{array}{l} \text{gegeben: Messwerte } g(\omega_i) \text{ und Integrationsgewichte } \mathbf{w}_i, i=1,\ldots n\\ \text{gesucht: Rekonstruktion } f_{\gamma}(\xi_j) \text{ an Auswertungsstellen } \xi_1,\ldots,\xi_m \in \mathcal{S}^2\\ \% \text{ Vorberechnung (unabhängig von den Messwerten)}\\ \text{Berechne } \psi(\xi_j,\omega_i) \text{ für } j=1,\ldots,m \text{ und } i=1,\ldots,n;\\ \% \text{ Rekonstruktionsschritt}\\ \text{datenwert=}[g(\omega_1),\ldots,g(\omega_n)];\\ \text{intgewichte=}[\mathbf{w}_1,\ldots,\mathbf{w}_n];\\ \text{Berechne } \text{ für } j=1,\ldots,m:\\ f_{\gamma}(\xi_j)=\!\!\mathbf{sum}(\text{ datenwert.}*\psi(\xi_j,:).*\text{ intgewichte});\\ \end{array}
```

Da der Operator A selbstadjungiert ist, muss nun statt Af = g zu lösen, ψ_{γ} aus dem Hilfsproblem $A\psi_{\gamma} = e_{\gamma}$ bestimmt werden, vgl. (4.4). Sehen diese Probleme auf den ersten Blick identisch aus, so können bei der Lösung des Hilfsproblems einige Vorteile ausgenutzt werden. Im Gegensatz zu den Daten g ist der Mollifier exakt und analytisch bekannt bzw. vorgegeben. Weiterhin kann eine besondere Struktur des Mollifiers gefordert werden, was die Lösung des Hilfsproblems stark vereinfacht, wie wir später sehen werden. **Bemerkung** Für unsere Transformationen liegt der gerade Mollifier $e_{\gamma}(\xi, \cdot)$ im Bild des entsprechenden Operators, falls $e_{\gamma}(\xi, \cdot) \in C_e^m(S^2)$ für hinreichend großes m gilt. Ist im Fall der sphärischen Radontransformation $m \ge 4$ (vgl. Lemma 2.4) beziehungsweise $m \ge 6$ im Fall der Kosinustransformation (vgl. Lemma 2.12), so existiert ein stetiger Rekonstruktionskern $\psi_{\gamma}(\xi, \cdot)$ mit $A\psi_{\gamma}(\xi, \cdot) = e_{\gamma}(\xi, \cdot)$. Die Lösbarkeit von (4.4) ist daher sichergestellt, falls der Mollifier geeignet gewählt ist.

Im Folgenden werden die Betrachtungen auf eine geeignete Klasse von Mollifiern eingeschränkt. Ein Mollifier wird **Mollifier vom Faltungstyp** genannt, falls er die folgende Struktur ausweist

$$e_{\gamma}(\xi,\omega) = \overline{e}_{\gamma}(\langle \xi,\omega \rangle). \tag{4.7}$$

Ist der Rekonstruktionspunkt ξ fest gewählt, so ist der Mollifier eine ξ -zonale Funktion. Des Weiteren hängt \overline{e}_{γ} sogar nur von $|\langle \xi, \omega \rangle|$ ab, da nach der ersten Forderung e_{γ} für festes ξ eine gerade Funktion ist.

Definition 4.1 (Sphärische Faltung) Seien $f \in L^2(S^2)$ und $g \in L^2[-1,1]$, so bezeichnet

$$g \star f \coloneqq \int_{\mathcal{S}^2} g(\langle \cdot, \omega \rangle) f(\omega) \,\mathrm{d}\omega \tag{4.8}$$

die sphärische Faltung von g mit f.

Für Mollifier vom Faltungstyp lässt sich f_{γ} als sphärische Faltung von e_{γ} mit f schreiben, d. h. es gilt

$$f_{\gamma}(\xi) = \int_{\mathcal{S}^2} e_{\gamma}(\langle \xi, \omega \rangle) f(\omega) \, \mathrm{d}\omega = (e_{\gamma} * f)(\xi) \,. \tag{4.9}$$

Außerdem folgt mit Hilfe des Funk-Hecke Theorems (Satz 1.7) für diese Klasse von Mollifiern:

$$\int_{\mathcal{S}^2} e_{\gamma}(\langle \xi, \omega \rangle) \, \mathrm{d}\omega = 2\pi \int_{-1}^1 e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t \, .$$

Die Forderung (4.5) gilt also für alle Rekonstruktionspunkte $\xi \in S^2$, sofern sie für einen bestimmten Punkt sichergestellt wurde.

In verschiedenen Anwendungen, wie zum Beispiel bei der im Kapitel 3 erläuterten Problemstellung, ist die gesuchte Funktion eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Die nachträgliche Normierung der Rekonstruktion auf Masse Eins stellt kein Problem dar. Wir gehen kurz auf die Frage ein, unter welchen Voraussetzungen die Approximative Inverse die Nicht-Negativität der Lösung erhält. Wir betrachten dazu nur **nicht-negative Mollifier**. Dies ist keine große Einschränkung, da bei der Verwendung von Mollifiern mit negativen Werten oft unerwünschte Artefakte in der Rekonstruktion zu sehen sind. Alle konkreten Beispiele von Mollifiern, die später betrachtet werden, sind ebenfalls nicht-negativ. **Lemma 4.2** Die Lösung f von Af = g sei nicht-negativ, wobei A die sphärische Radonoder die Kosinustransformation bezeichnet. Weiter sei der Mollifier eine gerade, stetige, nicht-negative Funktion und liege im Bild von A. Dann ist die mittels Approximativer Inverse erhaltene Lösung ebenfalls nicht-negativ, sofern exakte Daten zur Verfügung stehen.

Beweis. Da nach Voraussetzung der Mollifier e_{γ} im Bild von A liegt und die Abbildung injektiv ist, existiert genau eine Funktion ψ_{γ} mit $A\psi_{\gamma} = e_{\gamma}$. Daher gilt für alle $\xi \in S^2$:

$$f_{\gamma}(\xi) = \langle g, \psi_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} = \langle f, e_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \ge 0.$$

Bemerkung Da in Anwendungen nur gestörte Daten zur Verfügung stehen und zudem auch ein Fehler bei der numerischen Berechnung des Skalarproduktes $\langle g, \psi_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle$ auftritt, können wir a-priori nicht sicherstellen, dass unser Verfahren eine nicht-negative Lösung liefert. Es ist daher unter Umständen nötig, die Rekonstruktion nachträglich auf den Kegel der positiven Funktionen zu projizieren. Eine andere Möglichkeit besteht darin, den Regularisierungsparameter zu erhöhen, bis alle Werte positiv sind. Dies führt jedoch zu sehr glatten Rekonstruktionen und dadurch zum Verlust von Details in der Lösung.

4.2 Wahl des Regularisierungsparameters

Die Qualität der Rekonstruktion hängt entscheidend von der geeigneten Wahl des Regularisierungsparameters γ ab. Ist dieser zu klein gewählt, so haben Datenfehler einen zu starken Einfluss auf die Rekonstruktion, so dass diese unbrauchbar werden kann. Falls der Regularisierungsparameter zu groß gewählt ist, gehen Informationen in den Daten verloren, was zu verfälschten Rekonstruktionen führt. Es ist also wichtig, einen geeigneten Regularisierungsparameter bei der Anwendung des Verfahrens zu wählen.

Ein bekanntes Verfahren zur Parameterbestimmung ist das sogenannte **Diskrepanz Prinzip** (siehe z. B. [74]). Der Regularisierungsparameter wird so gewählt, dass

$$\|Af_{\gamma}^{\varepsilon} - g^{\varepsilon}\| \approx \epsilon$$

gilt. Dabei ist ε eine obere Schranke für den Datenfehler: $||g - g^{\varepsilon}|| \le \varepsilon$.

Da uns im Allgemeinen aber keine Information über die Größe von ε zur Verfügung steht, nutzen wir stattdessen eine andere Methode zur Wahl des Regularisierungsparameters, nämlich das **L-Kriterium**. Dieses Verfahren wurde von Hansen [31, 32] vorgeschlagen und stellt eine praktikable Möglichkeit zur Parameterwahl dar, obgleich diese Wahl aus theoretischer Sicht nicht optimal ist [29, 95].

Die sogenannte L-Kurve ist die doppelt-logarithmische Darstellung der Norm der Lösung $||f_{\gamma}^{\varepsilon}||$ gegen das Residuum $||Af_{\gamma}^{\varepsilon} - g^{\varepsilon}||$ als Funktion von γ . Dies führt häufig zu einer L-förmigen Kurve. Der Wert von γ , der zu dem "Knick" der L-Kurve führt, wird als Regularisierungsparameter gewählt, da dieser einen guten Kompromiss zwischen zu niedriger und zu starker Regularisierung darstellt. Um diesen automatisch zu bestimmen, setzen wir bei den numerischen Tests eine modifizierte Routine aus [30] ein.

Um das Residuum berechnen zu können, ist es notwendig, den Operator A auf f_{γ} anzuwenden. Im Falle der sphärischen Radontransformation ist dies auf zwei unterschiedliche Weisen möglich: Durch die Entwicklung der Daten in Kugelflächenfunktionen und anschließende Anwendung des Satzes 2.14 oder alternativ durch direkte Diskretisierung der Großkreise mittels (2.2) und Verwendung der Trapezregel. Die Diskretisierung der Großkreise ist im Vergleich deutlich aufwendiger. Sofern die Funktion sich gut durch wenige Kugelflächenfunktionen approximieren lässt, ist die Anwendung des Satzes 2.14 sinnvoll. Bei der Kosinustransformation kann man entweder direkt die Transformation durch eine numerische Integration über S^2 berechnen oder den Satz 2.14 nach Entwicklung der Daten verwenden. Hier scheint eine direkte Berechnung der Transformation zweckmäßig, da diese effizient umgesetzt werden kann.



Abbildung 4.1: Diskrete L-Kurve

Abbildung 4.1 zeigt einen typischen Verlauf der L-Kurve bei der sphärischen Radontransformation. Man sieht, dass die Form der Kurve einem "L" ähnelt. Da bei der numerischen Berechnung des Skalarproduktes $\langle g, \psi_{\gamma} \rangle_{L^2(S^2)}$ für sehr kleine γ mit den zur Verfügung stehenden Stützstellen Integrationsfehler entstehen, wird das Residuum der Norm für sehr kleine γ -Werte wieder größer.

Obgleich es auch Fälle gibt, in denen die L-Kurve nicht zu einer optimalen Wahl des Regularisierungsparameters führt [29, 95], hat sich bei den numerischen Tests zu dieser Arbeit herausgestellt, dass die Methode zur Wahl von γ geeignet ist. Dabei zeigte sich, dass die Verwendung der L^1 -Norm zu den besten Rekonstruktionsergebnissen führt.

4.3 Nullraum und Wahl der Messrichtungen

Da in praktischen Anwendungen nur eine endliche Anzahl von Messrichtungen zur Verfügung steht, stellt sich unmittelbar die Frage, wie viele Richtungen für eine gewünschte Auflösung benötigt werden. Ebenso bleibt zu klären, wie diese Richtungen optimal zu wählen sind, um einen möglichst "kleinen" Nullraum zu erhalten. Dazu werden im Folgenden die sogenannten *Geister* charakterisiert.

Bezeichnung Die *Geister* der Radontransformation sind die nicht trivialen Funktionen im Nullraum

$$\mathcal{N}_R^b = \left\{ f \in L_e^2(\mathcal{S}^2) \mid Rf(\omega_j) = 0, \ j = 1, \dots, b \right\},\$$

wenn die Transformation in b Messrichtungen beobachtet wird. Die Geister für die Kosinus- und Sinustransformation werden analog definiert.

Bemerkung Für die klassische Radontransformation sind Charakterisierungen der Geister schon länger bekannt [50, 51, 52, 68]. Unter anderem wurde mit Hilfe dieser Darstellungen gezeigt, dass im Wesentlichen nur hohe Frequenzen, also kleine Details, durch die Geister verfälscht werden.

Wird eine Funktion $f \in L^2(S^2)$ in Kugelflächenfunktionen

$$f = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=-m}^{m} \hat{f}_{ml} Y_{ml} \quad \text{mit } \hat{f}_{ml} = \langle Y_{ml}, f \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)}$$

entwickelt, so folgt mit Satz 2.14:

$$Rf = \sum_{m=0}^{\infty} \nu_m \sum_{l=-m}^{m} \hat{f}_{ml} Y_{ml} = \sum_{m=0}^{\infty} \nu_{2m} \sum_{l=-2m}^{2m} \hat{f}_{2m,l} Y_{2m,l} .$$
(4.10)

Offensichtlich können nur die Entwicklungskoeffizienten $\hat{f}_{2m,l}$ der Lösung aus den gegebenen Daten Rf bestimmt werden, also nur der gerade Anteil der Lösung, selbst wenn die Daten auf der ganzen Sphäre bekannt sind. Nach Satz 2.14 sind die in (4.10) auftretenden Koeffizienten ν_{2m} ungleich Null für alle $m \in \mathbb{N}_0$.

Bemerkung Die Entwicklungen von Kf und Sf für $f \in L^2(S^2)$ haben nach Satz 2.14 beziehungsweise Korollar 2.15 eine analoge Darstellung zu (4.10).

Nach Korollar 1.9 gilt

$$\mathbb{P}_{e}^{2M}\left(\mathcal{S}^{2}\right) = \bigoplus_{m=0}^{M} \mathcal{H}_{2m}$$

und daher ist $\{Y_{2m,l} | m = 0, ..., M, l = -2m, ..., 2m\}$ eine Basis von $\mathbb{P}_e^{2M}(\mathcal{S}^2)$. Da die Kugelflächenfunktionen linear unabhängig sind, ist die Dimension des Raumes gemäß Lemma 1.10 gegeben durch

$$\dim \mathbb{P}_e^{2M}(\mathcal{S}^2) = \binom{2M+2}{2}.$$

Satz 4.3 (Interpolationsbedingung)

Es bezeichne A die Radon-, die Kosinus- oder die Sinustransformation. Weiter sei $M \in \mathbb{N}_0$ so gewählt, dass folgende Bedingungen erfüllt sind:

- a) $b \ge \binom{2M+2}{2} = (M+1)(2M+1)$.
- b) Es gibt kein Polynom $0 \neq p \in \mathbb{P}_e^{2M}(\mathcal{S}^2)$ mit $p(\omega_j) = 0$ für alle $j = 1, \ldots, b$.

Ist $Rf \in \mathbb{P}_e^{2M}$, so gilt für die Entwicklungskoeffizienten $\hat{f}_{2m,l}$ der Geister $f \in \mathcal{N}_A^b$:

$$\hat{f}_{2m,l} = 0 \quad f \ddot{u}r \ alle \qquad m \in \mathbb{N} \quad und \quad l = -2m, \dots 2m.$$

$$(4.11)$$

Beweis. Wir führen den Beweis für die Radontransformation. Für die anderen Transformationen kann (der vorangegangenen Bemerkung folgend) analog argumentiert werden. Da nach Voraussetzung $Rf \in \mathbb{P}_e^{2M}$ gilt, hat Rf die Basisdarstellung

$$Rf(\omega) = \sum_{m=0}^{M} \sum_{l=-2m}^{2m} c_{2m,l} Y_{2m,l}(\omega).$$
(4.12)

Des Weiteren ist Rf durch die Werte $Rf(\omega_j)$ für j = 1, ..., b nach Voraussetzung b) eindeutig bestimmt. Daher folgt aus der Bedingung $Rf(\omega_j) = 0$ für j = 1, ..., b, schon $c_{2m,l} = 0$ für alle m = 0, ..., M und l = -2m, ..., 2m. Andererseits gilt nach (4.10)

$$Rf = \sum_{m=0}^{\infty} \nu_{2m} \sum_{l=-2m}^{2m} \hat{f}_{2m,l} Y_{2m,l} .$$

Da die Kugelflächenfunktionen ein Orthonormalsystem bilden, folgt hieraus

$$\nu_{2m} f_{2m,l} = c_{2m,l} \qquad \text{für alle } m = 0, \dots, M \text{ und } l = -2m, \dots, 2m,$$
$$\hat{f}_{2m,l} = 0 \qquad \text{für alle } m > M \text{ und } l = -2m, \dots, 2m.$$

Es gilt $\nu_{2m} \neq 0$ für alle $m = 0, \dots, M$ (Satz 2.14) und somit ist die Behauptung gezeigt. \Box

Werden die Messrichtungen gemäß obiger Interpolationsbedingung gewählt, so werden die Entwicklungskoeffizienten von f nicht von den Geistern beeinflusst, sofern $Rf \in \mathbb{P}_e^{2M}$ gilt. Sie können also eindeutig aus den gegebenen Daten bestimmt werden.

Beispiel 4.4 Ist $b = (n + 1)^2$, also gleich der Dimension von \mathbb{P}^n , und die Menge $\{\omega_j \mid j = 1, \ldots, d_n\} \subset S^2$ ein Fundamentalsystem (Definition 1.17), so ist das einzige Polynom $p \in \mathbb{P}^n(S^2)$, das auf dieser Menge verschwindet, das Nullpolynom. Damit gelten die Bedingungen aus obigem Satz für $M = \frac{n}{2}$, falls n gerade und für $M = \frac{(n-1)}{2}$, falls n ungerade ist. Die Extremalsysteme aus Abschnitt 1.4, die nach Definition insbesondere Fundamentalsysteme sind, bieten sich daher als Messrichtungen an. Eine Möglichkeit, die Wahl der Messrichtungen ausgehend von Fundamentalsystemen zu verbessern, wird im Ausblick des Abschnitts aufgezeigt.

Beispiel 4.5 Nun wird eine Punktmenge betrachtet, die aus den Produktregeln entsteht (Abschnitt 1.4), wobei sowohl der Polarwinkel als auch der Azimutwinkel in n + 1 Teile zerlegt sind. Weiterhin wird die Trapezregel als Integrationsregel bezüglich des Azimutwinkels genutzt. Aus

$$\sin\left(-\frac{n+1}{2}\frac{2k\pi}{n+1}\right) = \sin(-\pi k) = 0 \qquad f \ddot{u}r \ alle \ k = 1, \dots, n+1$$

folgt für ungerade n

$$Y_{m,-\frac{n+1}{2}}(\omega_j) = 0$$
 für alle $j = 1, ..., (n+1)^2$ und $m = \frac{n+1}{2}, ..., n.$

Diese Punktmenge bildet daher kein Fundamentalsystem, falls n ungerade ist. Es werden daher nur die Entwicklungskoeffizienten $c_{2m,k}$ für $m \leq \frac{n+1}{2}$ in (4.12) eindeutig bestimmt. Folglich sind die Koeffizienten $\hat{f}_{2m,k}$ für $m = \frac{n+1}{2}, \ldots, M$ und $k = -2m, \ldots, m$ bei der Verwendung dieser Punktmengen nicht eindeutig aus den Daten festgelegt. Die Verwendung dieser Messrichtungen ist für die betrachteten Transformationen daher nicht sinnvoll, da der Nullraum sehr groß ist. Verschiedene numerische Tests haben diese Beobachtung bestätigt.

Bemerkung Die Extremalsysteme stellen eine geeignete Möglichkeit dar, die Messrichtungen für die betrachteten Operatoren zu wählen. Ein Nachteil ist, dass die numerisch berechneten Punktmengen nicht symmetrisch um den Ursprung verteilt sind [88]. Es stellt sich die Frage, ob es Fundamentalsysteme F mit dieser Eigenschaft gibt, d. h. für die mit $\omega \in F$ auch $-\omega \in F$ gilt. Offensichtlich ist dies nur für ungerade n möglich, da in diesem Fall die Anzahl der Richtungen in F gerade ist, nämlich gleich $(n + 1)^2$. Der Vorteil solcher Systeme bestünde darin, dass für die numerische Integration gerader Funktionen nur die Hälfte der Stützstellen benötigt würde.

Eine Möglichkeit, ein punktsymmetrisches Fundamentalsystem zu konstruieren, welches eine ähnliche Struktur wie die Punktmengen aus den Produktregeln aufweist, bieten die Punktemengen aus [14, 15, 70]. Ein Spezialfall ist die in Polarkoordinaten gegebene Menge $\{(t_j, \varphi_k^j) | j, k = 1, ..., n + 1\}$ mit

a) t_1, \ldots, t_{n+1} die Nullstellen des Legendre-Polynoms P_{n+1} ,

b)
$$\varphi_k^j = \begin{cases} \frac{2\pi k}{n+1}, & \text{falls } j \text{ ungerade} \\ \frac{\pi(2k-1)}{n+1}, & \text{falls } j \text{ gerade.} \end{cases}$$

Diese Menge bildet ein Fundamentalsystem [14] und ist für ungerade n symmetrisch zum Ursprung. Leider ist die Berechnung der zugehörigen Integrationsgewichte über das lineare Gleichungssystem $G_{d_n}w = \iota_n$ (vgl. (1.41)) numerisch nicht möglich, da die Kondition der Matrix G_{d_n} für große n sehr schlecht ist. Daher lässt sich dieser Ansatz hier nicht unmittelbar anwenden.

Ausblick: In dieser Arbeit werden die bekannten (nicht punktsymmetrischen) Extremalsysteme, die unter http://web.maths.unsw.edu.au/~rsw/Sphere/Extremal/New/ zur Verfügung stehen, als Messrichtungen verwendet. Diese sind nach den vorigen Ausführungen dazu gut geeignet. Um die Auswahl der Messrichtungen für die betrachteten Transformationen weiter zu verbessern, bietet es sich an, Extremalsysteme, die punktsymmetrisch auf der Sphäre verteilt sind, zu konstruieren und die zugehörigen Integrationsgewichte numerisch zu berechnen. Dies kann zu einer Verbesserung der Algorithmen führen, da nur ungefähr die Hälfte der Datenpunkte benötigt wird, um dieselbe Auflösung in der Rekonstruktion zu erreichen.

4.4 Regularisierungseigenschaften des Verfahrens

In diesem Kapitel werden die Regularisierungseigenschaften des Verfahrens untersucht. Es werden Bedingungen an die Mollifier hergeleitet, die die regularisierende Wirkung der Approximativen Inversen für die betrachteten Operatoren sicherstellen. Schließlich wird gezeigt, dass die in Kapitel 5 betrachteten Mollifier diesen Bedingungen genügen. Zur besseren Übersicht sind die leicht technischen Beweise in den Anhang ausgegliedert.

Es bezeichne A^{\dagger} die verallgemeinerte Inverse des Operators A, wobei A für die sphärische Radon- oder die Kosinustransformation steht. Weiter seien g = Af und $g^{\varepsilon} \coloneqq g + \delta^{\varepsilon}$ für eine Störung δ^{ε} mit $\|\delta^{\varepsilon}\|_{L^2(S^2)} \leq \varepsilon$ sowie A^{\dagger}_{γ} die Approximative Inverse gemäß (4.6). Der Fehler der Rekonstruktion aus den Daten g^{ε} kann mittels der Dreiecksungleichung nach oben abgeschätzt werden durch

$$E_{\text{gesamt}} \coloneqq \|A_{\gamma}^{\dagger}g^{\varepsilon} - A^{\dagger}g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \leq \underbrace{\|A_{\gamma}^{\dagger}g^{\varepsilon} - A_{\gamma}^{\dagger}g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})}}_{E_{\text{daten}}} + \underbrace{\|A_{\gamma}^{\dagger}g - A^{\dagger}g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})}}_{E_{\text{appr}}}.$$
(4.13)

Hierbei bezeichnet E_{daten} den *Datenfehler*, welcher durch die Störung δ^{ε} versucht wird. Der Fehler, der durch die Approximation von A_{γ}^{\dagger} an A^{\dagger} entsteht, wird Approximationsfehler E_{appr} genannt.

Wir führen nun das Konzept der Regularisierung im Kontext sphärischer Transformationen ein.

Definition 4.6 Eine Regularisierung der verallgemeinerten Inversen A^{\dagger} zur Bestimmung einer Lösung f aus Af = g ist eine Familie von Operatoren $\{A^{\dagger}_{\gamma}\}_{\gamma>0}$ mit einer Abbildung $\gamma : \mathbb{R}^+ \times L^2(S^2) \to \mathbb{R}^+$, so dass für alle $g \in D(A^{\dagger})$ und alle g^{ε} mit $||g-g^{\varepsilon}||_{L^2(S^2)} \leq \varepsilon$

$$\lim_{\varepsilon \to 0, \, g^\varepsilon \to g} A_{\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)} g^\varepsilon = A^{\dagger} g$$

gilt.

Diese Definition besagt, dass der Gesamtfehler E_{gesamt} gegen 0 konvergiert, falls die Datenstörung ε gegen 0 strebt.

Es sei daran erinnert, dass sowohl für die Radon- als auch für die Kosinustransformation Normabschätzungen der Form

$$a\|f\|_{H^{-\beta}(\mathcal{S}^2)} \le \|Af\|_{L^2(\mathcal{S}^2)} \le a^{-1}\|f\|_{H^{-\beta}(\mathcal{S}^2)}$$
(4.14)

mit einer Konstanten a > 0 und entsprechendem β ($\beta = \frac{1}{2}$ für A = R, $\beta = \frac{5}{2}$ für A = K) gelten (siehe Satz 2.16). Um zu zeigen, dass die entwickelte Methode zu einer Regularisierung führt, wird das folgende Resultat [40, Theorem 3.1] verwendet, welches eine geeignete Charakterisierung von Regularisierungen in Sobolev-Räumen angibt.

Satz 4.7 [40, Theorem 3.1] Sei $M_{\gamma}: H^{-\beta}(S^2) \to L^2(S^2)$ eine Familie linearer Operatoren mit

- a) $\|M_{\gamma}f\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \leq k(\gamma)\|f\|_{H^{-\beta}(\mathcal{S}^{2})}, \quad \forall f \in \mathcal{N}(A)^{\perp},$
- b) $\lim_{\gamma \to 0} \|M_{\gamma}f f\|_{(\mathcal{S}^2)} = 0, \qquad \forall f \in \mathcal{N}(A)^{\perp},$

c)
$$k(\gamma) \varepsilon \to 0$$
 für $\varepsilon, \gamma \to 0$,

wobei $\mathcal{N}(A)$ den Nullraum des Operators A bezeichnet. Dann ist $A_{\gamma}^{\dagger} = M_{\gamma}A^{\dagger}$ eine Regularisierung von A^{\dagger} .

Beweis. Es wird die Beweisstrategie aus [40] verfolgt, die in diesem Fall analog angewendet werden kann. Es bezeichne \tilde{A}^{\dagger} die Fortsetzung von A^{\dagger} auf ganz $L^2(S^2)$. Aufgrund der linken Seite von Bedingung (4.14) gilt:

$$\|A^{\dagger}g\|_{H^{-\beta}(\mathcal{S}^{2})} \le a^{-1} \|AA^{\dagger}g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} = a^{-1} \|P_{\overline{\mathcal{R}}(A)}g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \le a^{-1} \|g\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})},$$

wobei $P_{\overline{\mathcal{R}}(A)}$ die Projektion von $L^2(\mathcal{S}^2)$ auf $\overline{\mathcal{R}}(A)$ bezeichnet. Also lässt sich A^{\dagger} fortsetzen zu $\tilde{A}^{\dagger}: H^{-\beta}(\mathcal{S}^2) \to L^2(\mathcal{S}^2)$ mit $\|\tilde{A}^{\dagger}\| \leq a^{-1}$.

Sei $g \in D(A) = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$ und $g^{\varepsilon} \in L^{2}(\mathcal{S}^{2})$ mit $||g^{\varepsilon} - g||_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \leq \varepsilon$, so folgt:

$$\begin{split} \|A_{\gamma}^{\dagger}g^{\varepsilon} - A^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} &\leq \|A_{\gamma}^{\dagger}g^{\varepsilon} - A_{\gamma}^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} + \|A_{\gamma}^{\dagger}g - A^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} \\ &= \|M_{\gamma}A^{\dagger}(g^{\varepsilon} - g)\|_{L^{2}(S^{2})} + \|M_{\gamma}\tilde{A}^{\dagger}g - \tilde{A}^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} \\ &\leq k(\gamma)\|\tilde{A}^{\dagger}(g^{\varepsilon} - g)\|_{H^{-\beta}(S^{2})} + \|M_{\gamma}\tilde{A}^{\dagger}g - \tilde{A}^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} \\ &\leq k(\gamma)\varepsilon a^{-1} + \|M_{\gamma}\tilde{A}^{\dagger}g - \tilde{A}^{\dagger}g\|_{L^{2}(S^{2})} \,. \end{split}$$

Die rechte Seite konvergiert für $\varepsilon, \gamma \to 0$ aufgrund der Bedingung c) gegen Null .

Die Bedingung a) des Satzes wird verwendet, um die Konvergenz des Datenfehlers gegen 0 sicherzustellen, während b) zur Konvergenz des Approximationsfehlers gebraucht wird, wie man im Beweis sieht.

Wir definieren nun die Regularisierungsoperatoren M_{γ} als sphärische Faltung

$$M_{\gamma}f(x) \coloneqq (e_{\gamma} \star f)(x) = \int_{\mathcal{S}^2} e_{\gamma}(\langle x, y \rangle) f(y) \, \mathrm{d}y$$

wobei vorausgesetzt wird, dass der Mollifier e_{γ} eine gerade, stetige und nicht-negative Funktion ist. Daher ist auch die sphärische Faltung $e_{\gamma} * f$ selbst eine gerade Funktion. Es bietet sich an, die beiden Fehler getrennt voneinander zu untersuchen. Wir beginnen mit dem Datenfehler.

Lemma 4.8 (Datenfehlerabschätzung)

Seien $e_{\gamma} \in C_e^{2l}[-1,1], \gamma > 0, l \in \mathbb{N}$ mit $2\pi ||e_{\gamma}||_{L^1[-1,1]} = 1$ und $f \in L^2(\mathcal{S}^2)$. Dann existient eine Konstante $\tilde{c} = \tilde{c}(e_{\gamma})$ mit

$$||e_{\gamma} * f||_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \leq \tilde{c}||f||_{H^{-2l}(\mathcal{S}^{2})}.$$

Der Beweis wird im Anhang nachgeholt. Das Lemma stellt die Eigenschaft a) in Satz 4.7 sicher. Als nächstes untersuchen wir den Approximationsfehler. Ziel ist es, die Bedingung b) aus Satz 4.7 äquivalent so zu formulieren, dass diese später leicht für konkrete Mollifier gezeigt werden kann.

Lemma 4.9 (Approximationsfehler)

Sei e_{γ} eine gerade, stetige, nicht-negative Funktion mit $2\pi \|e_{\gamma}\|_{L^{1}[-1,1]} = 1$. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

a) $\lim_{\gamma \to 0} \|e_{\gamma} * f - f\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} = 0, \qquad \forall f \in L^{2}_{e}(\mathcal{S}^{2}).$ b) $\lim_{\gamma \to 0} (L_{2n}e_{\gamma}) = 1, \qquad \forall n \in \mathbb{N}.$ c) $\lim_{\gamma \to 0} \int_{0}^{\rho} e_{\gamma}(t) dt = 0, \qquad \forall \rho \in [0, 1).$

Der Beweis ist ebenfalls in den Anhang ausgelagert. Kombinieren wir nun die Aussagen aus Satz 4.7 und den Lemmata 4.8 und 4.9, so erhalten wir das folgende Ergebnis.

Satz 4.10 (Charakterisierung geeigneter Mollifier) Sei $M_{\gamma}f = e_{\gamma} * f$ eine sphärische Faltung, wobei e_{γ} folgende Eigenschaften besitze

a) $e_{\gamma} \in C_e^{2l}[-1,1]$ für ein $l \in \mathbb{N}$ mit $2l \ge \beta$ und β aus (4.14), b) $\lim_{\gamma \to 0} \int_0^{\rho} e_{\gamma}(t) dt = 0 \qquad \forall \rho \in [0,1),$ c) $\tilde{c}(\gamma) \varepsilon \to 0$ für $\varepsilon, \gamma \to 0$ mit $\tilde{c}(\gamma) = 4\pi^2 \max_{n\ge 0} \left\{ \left(n^2 + 1\right)^{2l} (L_n e_{\gamma})^2 \right\}.$

Dann ist $A_{\gamma}^{\dagger} = M_{\gamma}A^{\dagger}$ eine Regularisierung von A^{\dagger} , wobei A die sphärische Radon- oder Kosinustransformation bezeichnet.

Wir untersuchen speziell die beiden Mollifier, die in Kapitel 5 betrachtet werden, auf ihre Eignung für die betrachteten Transformationen. In Polarkoordinaten sind diese gegeben durch

Typ (a)
$$e_{\gamma}^{\nu}(t) = \frac{1}{c_{\nu}(\gamma)} \begin{cases} \left(1 - \frac{1 - t^2}{\gamma^2}\right)^{\nu}, & t \in \left[\sqrt{1 - \gamma^2}, 1\right] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $\nu \in \mathbb{N}$ und $c_{\nu}(\gamma)$ so, dass $2\pi \|e_{\gamma}^{\nu}\|_{L^{1}[-1,1]} = 1$ gilt.

Typ (b)
$$e_{\gamma}(t) = \frac{1}{c(\gamma)} \exp\left(-\frac{1-t^2}{\gamma^2}\right) \text{ mit } c(\gamma) \text{ so, dass } 2\pi \|e_{\gamma}\|_{L^1[-1,1]} = 1 \text{ gilt.}$$

Diese beiden Mollifier sind nicht-negativ und erfüllen nach Konstruktion die Eigenschaft

$$1 = 2\pi \|e_{\gamma}\|_{L^{1}[-1,1]} = 2\pi \int_{-1}^{1} |e_{\gamma}(t)| dt = \int_{\mathcal{S}^{2}} e_{\gamma}(\langle x, y \rangle) dy.$$

Es sei daran erinnert, dass die betrachteten Transformationen die Bedingung (4.14) mit $\beta = \frac{1}{2}$ im Fall der sphärischen Radontransformation und $\beta = \frac{5}{2}$ im Fall der Kosinustransformation erfüllen.

Korollar 4.11 Sowohl die Mollifier von Typ (a) als auch von Typ (b) erfüllen die Bedingungen aus Satz 4.10 für die sphärische Radontransformation. Im Falle der Kosinustransformation führen nur die Mollifier von Typ (a) mit $\nu \ge 4$ und alle Mollifier vom Typ (b) zu einem Regularisierungsverfahren.

Beweis. Es ist nur die Bedingung b) des Satzes 4.10 für diese Mollifier zu zeigen. Für Mollifier vom Typ (a) ist dies offensichtlich, da die Länge ihres Träger für γ gegen Null selbst gegen Null konvergiert. Für Typ (b) folgt das Ergebnis mit der Regel von L'Hospital. Für $\rho \in [0, 1)$ gilt:

$$\begin{split} \lim_{\gamma \to 0} \int_{0}^{\rho} e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t &= \lim_{\gamma \to 0} c(\gamma)^{-1} \int_{0}^{\rho} \exp\left(-\frac{1-t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \mathrm{d}t \qquad \text{(Definition von } c(\gamma)\text{)} \\ &= (4\pi)^{-1} \lim_{\gamma \to 0} \frac{\int_{0}^{\rho} \exp\left(-\frac{1-t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \mathrm{d}t}{\int_{0}^{1} \exp\left(-\frac{1-t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \mathrm{d}t} \qquad \text{(Substitution)} \\ &= (4\pi)^{-1} \lim_{\gamma \to 0} \frac{\int_{0}^{\rho/\gamma} \exp\left(y^{2}\right) \mathrm{d}y}{\int_{0}^{1/\gamma} \exp\left(y^{2}\right) \mathrm{d}y} \qquad \text{(Regel von L'Hospital)} \\ &= (4\pi)^{-1} \lim_{\gamma \to 0} \frac{-\frac{\rho}{\gamma^{2}} \exp\left(\frac{\rho^{2}}{\gamma^{2}}\right)}{-\frac{1}{\gamma^{2}} \exp\left(\frac{1}{\gamma^{2}}\right)} \\ &= (4\pi)^{-1} \lim_{\gamma \to 0} \left(\rho \exp\left(\frac{\rho^{2}-1}{\gamma^{2}}\right)\right) \\ &= 0 \,. \end{split}$$

Kapitel 5

Numerische Inversion in \mathbb{R}^3

In diesem Kapitel werden Rekonstruktionskerne sowohl für die sphärische Radontransformation als auch für die Kosinus- und Sinustransformation in \mathbb{R}^3 berechnet. Dazu zeigen wir zuerst, dass für Mollifier vom Faltungstyp (4.7) die zugehörigen Rekonstruktionskerne durch Lösen einer Abel'schen Integralgleichung gewonnen werden können. Die Lösung des Hilfsproblems erfolgt im Allgemeinen numerisch, hier mit Hilfe der Approximativen Inversen. Dies ermöglicht für beliebige Mollifier die approximative Berechnung der zugehörigen Rekonstruktionskerne. Für bestimmte Mollifier lassen sich diese auch analytisch berechnen. Dies wird im zweiten Abschnitt anhand zweier Beispiele aufgezeigt. Daran anschließend wird ein Rekonstruktionskern für die Radontransformation hergeleitet, der es ermöglicht, den Laplace-Beltrami Operator angewendet auf die Lösung f direkt aus den Daten g zu rekonstruieren. Mit der expliziten Angabe eines Rekonstruktionskerns für die Kosinustransformation sowie eines Konstruktionsprinzips für die Sinustransformation schließen wir das Kapitel.

Wie bereits im vorangegangenen Kapitel, werden nur Mollifier vom Faltungstyp betrachtet, d. h. es gelte stets

$$e_{\gamma}(\xi,\omega) = \overline{e}_{\gamma}(\langle \xi,\omega \rangle) = \overline{e}_{\gamma}(\cos \alpha) \qquad \xi,\omega \in \mathcal{S}^2,$$

wobei $\alpha \coloneqq \langle (\xi, \omega)$ den Winkel zwischen ξ und ω bezeichnet. Dadurch ist die Normierungsbedingung (4.5) für alle Rekonstruktionspunkte ξ erfüllt, sofern sie für einen bestimmten Punkt gilt. Da die Radontransformation nach Lemma 2.5 rotationsinvariant ist, genügt es den Rekonstruktionskern für einen festen Rekonstruktionspunkt ξ zu berechnen. Für diesen Zweck wird der Nordpol e_3 ausgewählt. Durch Rotation des Kerns erhält man die Rekonstruktionskerne zu anderen Rekonstruktionspunkten. Beschreibt man $\omega \in S^2$ in Kugelkoordinaten, so entspricht der Polarwinkel θ nach Definition gerade dem Winkel zwischen ω und e_3 , also α . Für $\xi = e_3$ ist der Mollifier also eine rotationssymmetrische Funktion und nach Satz 2.7 lässt sich die Gleichung $R\psi_{\gamma} = e_{\gamma}$ daher als Abel'sche Integralgleichung

$$\frac{2}{\pi} \int_{0}^{y} \frac{\psi_{\gamma}(\cos^{-1}t)}{\sqrt{y^2 - t^2}} \, \mathrm{d}t = e_{\gamma}(\sin^{-1}y), \qquad y \in (0, 1]$$
(5.1)

schreiben. Daraus lässt sich mit Hilfe der Lösungsformel (2.9) eine explizite Integraldarstellung für den Rekonstruktionskern angeben. **Korollar 5.1** Für einen gewählten rotationssymmetrischen C^1 -Mollifier e_{γ} ist der zugehörige Rekonstruktionskern ψ_{γ} für $t \in [0, 1]$ gegeben durch

$$\Psi_{\gamma}(t) = E_{\gamma}(0) + t \int_{0}^{t} \frac{E_{\gamma}'(y)}{\sqrt{t^2 - y^2}} \, \mathrm{d}y \,, \tag{5.2}$$

wobei $\Psi_{\gamma}(t) \coloneqq \psi_{\gamma}\left(\cos^{-1}t\right)$ und $E_{\gamma}(y) \coloneqq e_{\gamma}\left(\sin^{-1}y\right)$ gilt.

Das Verfahren der Approximativen Inversen ermöglicht durch die Wahl eines Mollifiers vom Faltungstyp, das allgemeine Rekonstruktionsproblem Rf = g auf ein Hilfsproblem $R\psi_{\gamma} = e_{\gamma}$ mit rotationssymmetrischen Funktionen e_{γ} und ψ_{γ} auszulagern. Zur Berechnung des Rekonstruktionskerns muss daher nur ein 1D-Problem in Form einer Abel'schen Integralgleichung gelöst werden. Ausgehend von dieser Integraldarstellung kann man nun zu jedem Mollifier durch Anwendung einer Quadraturmethode numerisch eine Lösung Ψ_{γ} berechnen [24]. Im nächsten Abschnitt wird ein alternativer Weg vorgeschlagen, da die Approximative Inverse elegant zur Lösung von Abel'schen Integralgleichungen vom Typ (5.1) genutzt werden kann. Für einige Mollifier ist es auch möglich, den zugehörigen Kern analytisch zu berechnen, was in Abschnitt 5.2 anhand zweier Beispiele aufgezeigt wird.

5.1 Numerische Lösung der Abel'schen Integralgleichung mittels Approximativer Inverser

In diesem Abschnitt wird das Verfahren der Approximativen Inversen auf die Abel'sche Integralgleichung (5.1) angewendet. Wir gehen dabei ähnlich wie in [54] vor, wo dies für eine klassische Abel'sche Integralgleichung vorgeschlagen wurde. Hierbei soll insbesondere eine korrekte Rekonstruktion der gesuchten Funktion an den Rändern des Intervalls sichergestellt werden. Im Gegensatz zu [46, Kapitel 3.5], wo dies durch eine künstliche Fortsetzung des dort betrachteten Operators auf ein größeres Intervall erreicht wurde, wird hier einen anderer Lösungsansatz vorgeschlagen: eine geeignete Modifikation des Mollifiers.

Wir betrachten den Operator

$$\bar{A}: L_2(0,1) \to L_2(0,1), \quad \bar{A}f(y) = \frac{2}{\pi} \int_0^y \frac{f(t)}{\sqrt{y^2 - t^2}} \, \mathrm{d}t,$$
 (5.3)

dessen adjungierter Operator gegeben ist durch

$$\bar{A}^*g(t) = \frac{2}{\pi} \int_t^1 \frac{g(y)}{\sqrt{y^2 - t^2}} \, \mathrm{d}y \,.$$
(5.4)

Nach [24, Formel 1.B.6.ii)] folgt aus $\bar{A}^* \tilde{\psi}_{\gamma} = \tilde{e}_{\gamma}$ die Bestimmungsgleichung

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t\,\tilde{e}_{\gamma}(x,1)}{\sqrt{1-t^2}} - t\,\int_{t}^{1}\frac{\frac{\partial}{\partial y}\,\tilde{e}_{\gamma}(x,y)}{\sqrt{y^2-t^2}}\,\mathrm{d}y\,.$$
(5.5)

Bemerkung Man sieht unmittelbar, dass der erste Summand für $t \to 1$ Probleme bereitet, sofern $\tilde{e}_{\gamma}(x,1)$ nicht für alle Rekonstruktionspunkte x gleich Null ist. Dies sollte bei der Berechnung des Rekonstruktionskernes beziehungsweise bei der Wahl des Mollifiers bedacht werden. Wählt man einen Mollifier vom Faltungstyp auf $[0,1] \times [0,1]$, d. h. setzt man $e_{\gamma}(x,y) \coloneqq \gamma^{-1}\bar{e}\left(\frac{x-y}{\gamma}\right)$ mit $\int_{0}^{1} \bar{e}(x) dx = 1$, und es gilt $\bar{e}(0) \neq 0$, so folgt $e_{\gamma}(1,1) \neq 0$. Beispiele für \bar{e} , wie die Gaußfunktion oder abgeschnittene Polynome (siehe [85]), erfüllen diese Eigenschaft. Es ist also notwendig, die Mollifier an den Intervallgrenzen geeignet zu modifizieren.

Als konkretes Beispiel wird der stückweise lineare Mollifier betrachtet, der gegeben ist durch

$$\tilde{e}_{\gamma}(x,y) = \gamma^{-1} \begin{cases} 0, & y < x - \gamma \\ \frac{y-x}{\gamma} + 1, & x - \gamma \le y < x \\ \frac{x-y}{\gamma} + 1, & x \le y < x + \gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$
(5.6)

Die Rekonstruktionskerne für andere Mollifier, wie zum Beispiel abgeschnittene Polynome von höherem Grad [85], können analog berechnet werden.

Liegt der Träger des Mollifiers aus (5.6) im Intervall [0,1], so gilt $\int_0^1 \tilde{e}_{\gamma}(x, y) \, dy = 1$. Wir berechnen jetzt den zugehörigen Rekonstruktionskern, wobei einige Fälle zu unterscheiden sind.

a) Um die Notation zu vereinfachen, definieren wir $h(x,t) \coloneqq \ln(x + \sqrt{x^2 - t^2})$. Wegen

$$\int_{a}^{b} \frac{1}{\sqrt{y^{2} - t^{2}}} \, \mathrm{d}y = h(b, t) - h(a, t) \,,$$

berechnet sich für $x - \gamma \ge 0$ und $x + \gamma \le 1$ der Rekonstruktionskern als

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t}{\gamma^2} \begin{cases} h(x+\gamma,t) - 2h(x,t) + h(x-\gamma,t), & 0 \le t < x-\gamma \\ h(x+\gamma,t) - 2h(x,t) + \ln(t), & x-\gamma \le t < x \\ h(x+\gamma,t) - \ln(t), & x \le t < x+\gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

b) Am linken Rand des Intervalls führt die folgende Überlegung weiter: Setzt man die Funktion f ungerade über die Null hinweg fort, d. h. für y > 0 definiert man

$$f(-y) \coloneqq 2f(0) - f(y) \,,$$

so gilt für $x < \gamma$ unter Verwendung dieser Fortsetzung

$$f_{\gamma}(x) = \int_{0}^{x+\gamma} \tilde{e}_{\gamma}(x,y)f(y) \,\mathrm{d}y + \int_{x-\gamma}^{0} \tilde{e}_{\gamma}(x,y)f(y) \,\mathrm{d}y$$
$$= \int_{0}^{\gamma-x} (\tilde{e}_{\gamma}(x,y) - \tilde{e}_{\gamma}(x,-y))f(y) \,\mathrm{d}y + \int_{\gamma-x}^{x+\gamma} \tilde{e}_{\gamma}(x,y)f(y) \,\mathrm{d}y + 2f(0) \int_{x-\gamma}^{0} \tilde{e}_{\gamma}(x,y) \,\mathrm{d}y.$$

In diesem Fall erhält man also einen neuen Mollifier \hat{e}_{γ} , der sich stückweise aus dem ursprünglichen Mollifier zusammensetzt. Zusätzlich tritt ein weiterer Summand auf, der von f(0) abhängt. Konkret ist der neue Mollifier gegeben durch

$$\widehat{e}_{\gamma}(x,t) = \begin{cases} \widetilde{e}_{\gamma}(x,y) - \widetilde{e}_{\gamma}(x,-y), & 0 \le y < \gamma - x \\ \widetilde{e}_{\gamma}(x,y), & \gamma - x \le y < x + \gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Hinzu kommt noch der Summand $2f(0)\int_{x-\gamma}^{0} \tilde{e}_{\gamma}(x,y) \, dy = f(0)\frac{(x-\gamma)^2}{\gamma^2}$, welcher bei Nullrandwert von f verschwindet.



Abbildung 5.1: Mollifier mit $\gamma = 0.3$ für verschiedene Rekonstruktionspunkte x.

Wir müssen eine weitere Fallunterscheidung durchführen. Ist $x - \gamma < 0$ und $\gamma < 2x$, d. h. liegt maximal ein Viertel des Trägers unterhalb von Null (vgl. Abb. 5.1(b)), so ist der Rekonstruktionskern gegeben durch

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t}{\gamma^2} \begin{cases} 2\ln(t) + h(x+\gamma,t) - 2h(x,t) + h(x-\gamma,t) - h(\gamma-x,t), & t < \gamma - x \\ h(x+\gamma,t) - 2h(x,t) + \ln(t), & \gamma - x \le t < x \\ h(x+\gamma,t) - \ln(t), & x \le t < x + \gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für $x - \gamma < 0$ und $\gamma > 2x$ (siehe Abb. 5.1(c)) gilt

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t}{\gamma^2} \begin{cases} 2\ln(t) + h(x+\gamma,t) - 2h(x,t) + h(\gamma-x,t), & t < x \\ h(x+\gamma,t) - h(\gamma-x,t), & x \le t < \gamma-x \\ h(x+\gamma,t) - \ln(t), & \gamma-x \le t < x+\gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

c) Am rechten Intervallrand kann man analog vorgehen, die Funktion f also ungerade über die Eins hinweg fortsetzen. Auch hier sind zwei Fälle zu unterscheiden. Ist $x + \gamma > 1$ und $\gamma \leq 2(1 - x)$, so ist der Rekonstruktionskern gegeben durch

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t}{\gamma^2} \begin{cases} 2h(1,t) - h(2 - x - \gamma, t) - 2h(x,t) + h(x - \gamma, t), & t < x - \gamma \\ 2h(1,t) - h(2 - x - \gamma, t) + \ln(t) - 2h(x,t), & x - \gamma \le t < x \\ 2h(1,t) - h(2 - x - \gamma, t) - \ln(t), & x \le t < 2 - x - \gamma \\ 2h(1,t) - 2\ln(t), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Im Fall $x + \gamma > 1$ und $\gamma > 2(1 - x)$ ergibt sich

$$\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) = \frac{t}{\gamma^2} \begin{cases} 2h(1,t) - h(2 - x - \gamma, t) - 2h(x,t) + h(x - \gamma, t), & t < x - \gamma \\ 2h(1,t) - h(2 - x - \gamma, t) + \ln(t) - 2h(x,t), & x - \gamma \le t < 2 - x - \gamma \\ h(x,t) - h(1,t), & 2 - x - \gamma \le t < x \\ h(x,t) - 2\ln(t), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Bemerkung Der Vorteil der so gewählten Fortsetzung ist, dass $\tilde{e}_{\gamma}(x, 1) = 0$ gilt und somit der erste Summand in (5.5) verschwindet. Wählt man am rechten Intervallrand eine andere Fortsetzung zum Beispiel eine gerade Fortsetzung oder verzichtet auf eine solche, führt der Summand $\frac{t \tilde{e}_{\gamma}(x, 1)}{\sqrt{1-t^2}}$ zu numerischen Problemen, da der Nenner für $t \to 1$ gegen Null konvergiert.

Nach Formel (2.9) ist eine Inversionsformel für die Abel'sche Integralgleichung $\bar{A}f = g$ mit \bar{A} aus (5.3) gegeben durch

$$f(t) = g(0) + t \int_{0}^{t} \frac{g'(x)}{\sqrt{t^2 - x^2}} dx, \qquad 0 < t \le 1.$$

Setzt man nun die Variable t gleich Null, so erhält man

$$f(0) = g(0)$$

und die obige Inversionsformel gilt für $0 \le t \le 1$. Etwas schwieriger ist es, f(1) sinnvoll aus den gegebenen Daten g zu schätzen. Eine Möglichkeit ist, den Wert über die Beziehung

$$f(1) = g(0) + \int_{0}^{1} \frac{g'(x)}{\sqrt{1 - x^2}} \,\mathrm{d}x$$

numerisch zu berechnen. Dieser Näherungswert wird im Folgenden mit $\tilde{f}(1)$ bezeichnet. Insgesamt erhält man die folgende Inversionsformel

$$f_{\gamma}(x) = \int_{0}^{1} g(t)\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) dt + \begin{cases} g(0) \frac{(x-\gamma)^{2}}{\gamma^{2}}, & \text{falls } x < \gamma \\ \tilde{f}(1) \frac{(1-x-\gamma)^{2}}{\gamma^{2}}, & \text{falls } x + \gamma > 1 , \end{cases}$$
(5.7)

wobei der Rekonstruktionskern $\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t)$ entsprechend der Herleitung (abhängig von x

und γ) einzusetzen ist. Ein numerisches Testbeispiel zur Inversion der Abel'schen Integralgleichung mit Hilfe der Approximativen Inversen befindet sich im Anhang A.1.

Bemerkung Liegt a-priori die Information vor, dass die Funktion f, die aus Rf = g bestimmt werden soll, rotationssymmetrisch ist, so lässt sich der Rekonstruktionsprozess vereinfachen. In diesem Fall kann nämlich das eben hergeleitete Regularisierungsverfahren unmittelbar zur Rekonstruktion aus gestörten Daten verwendet werden.

5.2 Berechnung von Rekonstruktionskernen für die Radontransformation

Für beliebige Mollifier vom Faltungstyp kann man, wie im ersten Abschnitt des Kapitels beschrieben, den zugehörigen Rekonstruktionskern approximativ berechnen. Hier werden nun mit Hilfe der Inversionsformel (5.2) für einige konkrete Mollifier die Rekonstruktionskerne analytisch berechnet, was die spätere Implementierung vereinfacht und die notwendigen Vorberechnungen beschleunigt.

Modifizierter Gauß-Mollifier

Wie bisher, wird als Rekonstruktionspunkt ξ der Nordpol e_3 gewählt, um die zugehörigen Kerne zu berechnen. Als erstes Beispiel betrachten wir die Gaußfunktion

$$E_{\gamma}(x) = \frac{1}{c(\gamma)} \exp\left(-\frac{x^2}{\gamma^2}\right), \qquad x \in [0,1].$$
(5.8)

Unter Verwendung des Zusammenhangs $E_{\gamma}(x) = e_{\gamma}(\sin^{-1} x)$ folgt die Darstellung

$$e_{\gamma}(\theta) = \frac{1}{c(\gamma)} \exp\left(-\frac{\sin^2 \theta}{\gamma^2}\right), \qquad \theta \in [0, \pi/2].$$
(5.9)



Abbildung 5.2: Gauß-Mollifier (Rekonstruktionspunkt $\xi = [0, 0, 1], \gamma = 0.2$).

Dieser Mollifier ist also eine Gaußkurve, deren Argument der Sinus des Polarwinkels θ ist.

Die Konstante $c(\gamma)$ ist nun so zu bestimmen, dass der Mittelwert des Mollifiers über der Sphäre S^2 gleich Eins ist. Um diese geeignet angeben zu können, wird die Fehlerfunktion erf (error function) benötigt

$$\operatorname{erf}(x) \coloneqq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} \exp\left(-t^{2}\right) \mathrm{d}t.$$

Die komplexe Fehlerfunktion erfi ist definiert durch $\operatorname{erfi}(x) \coloneqq -\operatorname{i} \operatorname{erf}(\operatorname{i} x)$. Wie man leicht nachrechnet, gilt

$$\operatorname{erfi}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} \exp\left(t^{2}\right) \mathrm{d}t.$$
(5.10)

Mit wachsenden Argumenten steigen die Funktionswerte der komplexen Fehlerfunktion sehr schnell an; ihr Funktionsgraph ist in Abbildung 5.3(a) skizziert. Insbesondere führt dies zu erheblichen Problemen bei der numerischen Approximation der Funktion für Argumente größer als dreißig.

Da der Mollifier eine gerade Funktion und unabhängig vom Azimutwinkel φ ist, folgt mit der Substitution $z = t\gamma^{-1}$, $dz = \gamma^{-1} dt$ die folgende Darstellung

$$\begin{aligned} c(\gamma) &= 4\pi \int_{0}^{\pi/2} \exp\left(-\frac{\sin^{2}\theta}{\gamma^{2}}\right) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \\ &= 4\pi \int_{0}^{1} \exp\left(-\frac{1-t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \mathrm{d}t \\ &= 4\pi \exp\left(-\frac{1}{\gamma^{2}}\right) \int_{0}^{1/\gamma} \gamma \exp\left(z^{2}\right) \mathrm{d}z \\ &= 2\pi^{3/2}\gamma \, \exp\left(-\frac{1}{\gamma^{2}}\right) \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\gamma}\right). \end{aligned}$$

Mit $E_{\gamma}(x) = \frac{1}{c(\gamma)} \exp\left(-\frac{x^2}{\gamma^2}\right), x \in [0, 1]$, folgt aus Formel (5.2) die Identität

$$\Psi_{\gamma}(t) = E_{\gamma}(0) + t \int_{0}^{t} \frac{E_{\gamma}'(y)}{\sqrt{t^{2} - y^{2}}} \, \mathrm{d}y$$
$$= \frac{1}{c(\gamma)} \left(1 - \frac{t}{\gamma^{2}} \int_{0}^{t} \frac{2y \exp\left(-\frac{y^{2}}{\gamma^{2}}\right)}{\sqrt{t^{2} - y^{2}}} \, \mathrm{d}y \right).$$
(5.11)

Das folgende Lemma hilft bei der Berechnung des Integral in (5.11) weiter.

Lemma 5.2 Es gilt:

$$\int_{0}^{t} \frac{2y \exp\left(-\frac{y^2}{\gamma^2}\right)}{\sqrt{t^2 - y^2}} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\gamma \exp\left(-\frac{t^2}{\gamma^2}\right) \operatorname{erfi}\left(\frac{t}{\gamma}\right). \tag{5.12}$$

Beweis. Mit der Substitution $x = t^2 - y^2$, dx = -2y dy gilt

$$\int_{0}^{t} \frac{2y \exp\left(-\frac{y^{2}}{\gamma^{2}}\right)}{\sqrt{t^{2} - y^{2}}} dy = \int_{0}^{t^{2}} \frac{\exp\left(\frac{x - t^{2}}{\gamma^{2}}\right)}{\sqrt{x}} dx$$
$$= \exp\left(-\frac{t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \int_{0}^{t^{2}} \frac{\exp\left(\frac{x}{\gamma^{2}}\right)}{\sqrt{x}} dx$$
$$= 2 \exp\left(-\frac{t^{2}}{\gamma^{2}}\right) \int_{0}^{t} \exp\left(\frac{z^{2}}{\gamma^{2}}\right) dz,$$

wobei im letzten Schritt die Substitution $z = \sqrt{x}$, $dz = \frac{1}{2\sqrt{x}} dx$ verwendet wurde. Mit der Substitution $u = \frac{z}{\gamma}$, $du = \frac{1}{\gamma} dz$ folgt nach Definition der erfi-Funktion in (5.10) schließlich

$$\int_{0}^{t} \exp\left(\frac{z^{2}}{\gamma^{2}}\right) dz = \int_{0}^{t/\gamma} \exp\left(u^{2}\right) du = \frac{\sqrt{\pi}\gamma}{2} \operatorname{erfi}\left(\frac{t}{\gamma}\right).$$

Korollar 5.3 Der zum Gauß-Mollifier gehörende Rekonstruktionskern, den wir kurz Gauß-Rekonstruktionskern oder Gauß-Kern nennen, ist gegeben durch

$$\Psi_{\gamma}(t) = \frac{1}{c(\gamma)} \left(1 - \frac{\sqrt{\pi}t}{\gamma} \exp\left(-\frac{t^2}{\gamma^2}\right) \operatorname{erfi}\left(\frac{t}{\gamma}\right) \right), \qquad t \in [0,1]$$

mit

$$c(\gamma) = 2 \pi^{3/2} \gamma \exp\left(-\frac{1}{\gamma^2}\right) \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\gamma}\right).$$

Leider bereitet die Berechnung des Kerns für kleine Werte von γ numerische Schwierigkeiten, da der Wert erfi $\left(\frac{1}{\gamma}\right)$ sehr schnell wächst. Um einen Ausweg hierfür aufzuzeigen, wird nun das sogenannte Dawson Integral [1] eingeführt, welches für $x \in \mathbb{R}$ definiert ist durch

$$D(x) \coloneqq \exp\left(-x^2\right) \int_0^x \exp\left(y^2\right) dy$$

$$= \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \exp\left(-x^2\right) \operatorname{erfi}(x) .$$
(5.13)

Das Dawson Integral D ist eine ungerade Funktion, mit $D(x) \approx x$ für $x \approx 0$ und $D(x) \approx \frac{1}{2x}$ für große x. Es existieren Software-Pakete, die das Dawson Integral für reellwertige x stabil und mit hoher Genauigkeit approximieren.



Abbildung 5.3: Dawson Integral und Fehlerfunktion.

Aus Korollar 5.3 erhalten wir das folgende Resultat.

Satz 5.4 Der zum Gauß-Mollifier gehörige Rekonstruktionskern ist für $t = \langle \xi, \omega \rangle$ gegeben durch

$$\Psi_{\gamma}(\langle \xi, \omega \rangle) = \frac{1}{c(\gamma)} \left(1 - \frac{2\langle \xi, \omega \rangle}{\gamma} D\left(\frac{\langle \xi, \omega \rangle}{\gamma}\right) \right), \qquad \omega, \xi \in \mathcal{S}^2$$
(5.14)

mit $c(\gamma) = 4\pi\gamma D(\gamma^{-1})$, wobei das Dawson Integral D gemäß (5.13) gegeben ist.

Diese Darstellung des Gauß-Rekonstruktionskerns wird bei den numerischen Tests zu dieser Arbeit verwendet. Die Abbildung 5.4 zeigt den Kern für drei verschiedene Regularisierungsparameter. Die Verwendung dieser analytischen Darstellung hat den Vorteil, dass sie an den im Algorithmus benötigten Stellen mit hoher Genauigkeit ausgewertet werden kann, was die Implementierung stark vereinfacht. Außerdem sind die entsprechenden Vorberechnungen des Rekonstruktionskerns deutlich schneller, da keine Abel'schen Integralgleichungen (für jeden Rekonstruktionspunkt eine) numerisch gelöst werden müssen.



Abbildung 5.4: Rekonstruktionskern zum Gauß-Mollifier.

Bemerkung Soll der zugehörige Rekonstruktionskern durch die numerische Lösung der Abel'schen Integralgleichung mittels AI approximativ bestimmt werden, so stehen die gegebenen Daten, d. h. in diesem Fall der Mollifier, analytisch und ohne Fehler zur Verfügung. Daher kann ein sehr kleiner Regularisierungsparameter γ gewählt werden und es ist nicht notwendig, den Wert an der Stelle 1 zu kennen. Stattdessen wird die Funktion einfach von $1 - \gamma$ an konstant fortgesetzt. Die numerische Lösung stimmt nahezu mit der analytischen überein. Im Fall des Gauß-Rekonstruktionskerns ist der punktweise absolute Fehler zur analytischen Lösungen bei Verwendung von 10000 Datenpunkten kleiner als 0.0035.

Abgeschnittene Polynome

Wir betrachten für $\nu \in \mathbb{N}$ die folgende Familie von Funktionen

$$e_{\gamma}^{\nu}(\theta) = \frac{1}{c_{\nu}(\gamma)} \begin{cases} \left(1 - \frac{\sin^2 \theta}{\gamma^2}\right)^{\nu}, & \theta \in [0, \sin^{-1}(\gamma)] \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$
(5.15)

wobei $c_{\nu}(\gamma)$ so zu bestimmen ist, dass der Mittelwert von e_{γ}^{ν} über S^2 gleich Eins ist. Aus $E_{\gamma}^{\nu}(x) = e_{\gamma}^{\nu}(\sin^{-1}x)$ folgt nach obiger Definition für alle $\nu \in \mathbb{N}$:

$$E_{\gamma}^{\nu}(x) = e_{\gamma}^{\nu}(\sin^{-1}x) = \frac{1}{c_{\nu}(\gamma)} \begin{cases} \left(1 - \frac{x^2}{\gamma^2}\right)^{\nu}, & \text{falls } x \le \gamma \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$
(5.16)

Die folgende Abbildung zeigt die Funktionen für $\nu = 1, 2, 3$. Je größer ν gewählt ist, desto glatter ist der Übergang der Funktion an der Stelle $\theta = \sin^{-1}(\gamma)$.



Abbildung 5.5: ν -Mollifier für $\nu = 1, 2, 3$ (Rekonstruktionspunkt [0, 0, 1], $\gamma = 0.3$)
Erster Fall: $\nu = 1$

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall. Die Normierungskonstante $c_1(\gamma)$ ist gegeben durch

$$c_1(\gamma) = 4\pi \int_0^{\arcsin\theta} 1 - \frac{\sin^2\theta}{\gamma^2} \sin\theta \,\mathrm{d}\theta$$
$$= 4\pi \int_{\sqrt{1-\gamma^2}}^1 1 - \frac{1-x^2}{\gamma^2} \,\mathrm{d}x$$
$$= 4\pi \left(1 + \frac{2}{3\gamma^2} \left(\sqrt{1-\gamma^2} - 1\right) - \frac{2}{3}\sqrt{1-\gamma^2}\right).$$

Mit

$$c_{1}(\gamma) \int_{0}^{t} \frac{(E_{\gamma}^{1})'(x)}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x = \begin{cases} -\frac{2}{\gamma^{2}} \int_{0}^{t} \frac{x}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x, & \text{falls } t < \gamma \\ -\frac{2}{\gamma^{2}} \int_{0}^{\gamma} \frac{x}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x, & \text{sonst} \end{cases}$$
$$= \begin{cases} -\frac{2t}{\gamma^{2}}, & \text{falls } t < \gamma \\ -\frac{2}{\gamma^{2}} \left(t - \sqrt{t^{2} - \gamma^{2}}\right), & \text{sonst} \end{cases}$$

lässt sich der entsprechende Rekonstruktionskern wie folgt angeben.

Lemma 5.5 Für $\nu = 1$ ist der zugehörige Rekonstruktionskern gegeben durch

$$\psi^{1}(\theta) = \Psi^{1}_{\gamma}(\cos\theta) = \frac{1}{c_{1}(\gamma)} \begin{cases} 1 - \frac{2\cos^{2}\theta}{\gamma^{2}}, & falls \ \cos\theta < \gamma \\ 1 - \frac{2\cos\theta}{\gamma^{2}} \left(\cos\theta - \sqrt{\cos^{2}\theta - \gamma^{2}}\right), & sonst \end{cases}$$

mit

$$c_1(\gamma) = 4\pi \left(1 + \frac{2}{3\gamma^2} \left(\sqrt{1 - \gamma^2} - 1\right) - \frac{2}{3}\sqrt{1 - \gamma^2}\right).$$

Allgemeiner Fall: $\nu \in \mathbb{N}$

Um den Rekonstruktionskern für allgemeines $\nu \in \mathbb{N}$ angeben zu können, definieren wir

$$L(k,l) := \frac{(2k)!!}{(2l+1)!!(2(k-l))!!} = \begin{cases} 1, & \text{für } k = l = 0\\ \frac{2k \cdot (2k-2) \cdot \ldots \cdot (2(k-l)+2)}{(2l+1) \cdot \ldots \cdot 3 \cdot 1}, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Hierbei bezeichnet k!! die sogenannte Doppelfakultät, welche fürk>0gegeben ist durch

$$k!! = \begin{cases} k \cdot (k-2) \cdot (k-4) \cdot \dots \cdot 2, & \text{für } k \text{ gerade} \\ k \cdot (k-2) \cdot (k-4) \cdot \dots \cdot 1, & \text{für } k \text{ ungerade}. \end{cases}$$

Außerdem setzt man 0!! = 1. Dadurch ergibt sich

$$L(k,k) = \frac{(2k)!!}{(2k+1)!!}.$$

Um die zugehörigen Rekonstruktionskerne zu berechnen, wird die folgende Rechenregel benötigt.

Lemma 5.6 Für $b \in [0, t]$ und $k \in \mathbb{N}_0$ gilt:

$$\int_{0}^{b} \frac{(-1)^{k} x^{2k+1}}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x = (-1)^{k} \left(L(k,k) t^{2k+1} - \sum_{l=0}^{k} L(k,l) b^{2(k-l)} \left(\sqrt{t^{2} - b^{2}} \right)^{2l+1} \right).$$
(5.17)

Für b = t erhält man hieraus

$$\int_{0}^{t} \frac{(-1)^{k} x^{2k+1}}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x = (-1)^{k} L(k,k) t^{2k+1} \,.$$
(5.18)

Beweis. Die Behauptung folgt mittels Induktion. Der Induktionsanfang k = 0 wurde schon im Fall $\nu = 1$ gezeigt. Im Induktionsschritt ist eine partielle Integration durchzuführen. Hierbei nutzt man die Eigenschaft, dass für $m \in \mathbb{N}_0$

$$H_m(x) = -\frac{1}{2m+1} \left(\sqrt{t^2 - x^2}\right)^{2m+1}$$

eine Stammfunktion zu

$$G_m(x) = x \left(\sqrt{t^2 - x^2}\right)^{2m-1}$$

ist.

Satz 5.7 Für $\nu \in \mathbb{N}$ ist der zum Mollifier $E_{\gamma}^{\nu}(x)$ gehörende ν -**Rekonstruktionskern** $\psi_{\gamma}^{\nu}(\theta) = \Psi_{\gamma}^{\nu}(\cos \theta)$ gegeben durch

$$\Psi_{\gamma}^{\nu}(t) = \frac{1}{c_{\nu}(\gamma)} \begin{cases} 1 - 2\nu \sum_{k=0}^{\nu-1} (-1)^{k} {\binom{\nu-1}{k}} L(k,k) \left(\frac{t}{\gamma}\right)^{2(k+1)}, & falls \ t < \gamma \\ 1 - 2\nu \sum_{k=0}^{\nu-1} (-1)^{k} {\binom{\nu-1}{k}} L(k,k) \left(\frac{t}{\gamma}\right)^{2(k+1)} + \\ (-1)^{\nu-1} \frac{2\nu t}{\gamma} \left(\frac{\sqrt{t^{2}-\gamma^{2}}}{\gamma}\right)^{2\nu-1} L(\nu-1,\nu-1), & sonst \end{cases}$$
(5.19)

mit

$$c_{\nu}(\gamma) = 4\pi \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right)^{\nu} \left(-\sqrt{1 - \gamma^2}L(\nu, \nu) + \sum_{k=0}^{\nu} {\nu \choose k} (\gamma^2 - 1)^{-k} (2k+1)^{-1}\right).$$
(5.20)

Beweis. Mit $(E_{\gamma}^{\nu})'(x) = -\frac{2x\nu}{c_{\nu}(\gamma)\gamma^2} \left(1 - \frac{x^2}{\gamma^2}\right)^{\nu-1}$ folgt

$$c_{\nu}(\gamma) \int_{0}^{t} \frac{(E_{\gamma}^{\nu})'(x)}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x = -2\nu \sum_{k=0}^{\nu-1} {\nu-1 \choose k} \gamma^{-2(k+1)} \int_{0}^{\min(t,\gamma)} \frac{(-1)^{k} x^{2k+1}}{\sqrt{t^{2} - x^{2}}} \, \mathrm{d}x =: I.$$

Im Fall $t \geq \gamma$ gilt nach Lemma 5.6

$$I = -2\nu \sum_{k=0}^{\nu-1} (-1)^{k} {\binom{\nu-1}{k}} \gamma^{-2(k+1)} \left(L(k,k) t^{2k+1} - \sum_{l=0}^{k} L(k,l) \gamma^{2(k-l)} \left(\sqrt{t^{2} - \gamma^{2}} \right)^{2l+1} \right)$$

$$= \underbrace{-2\nu \sum_{k=0}^{\nu-1} (-1)^{k} {\binom{\nu-1}{k}} L(k,k) \gamma^{-1} \left(\frac{t}{\gamma}\right)^{2k+1}}_{:=I_{1}}$$

$$+ \underbrace{2\nu \gamma^{-1} \sum_{k=0}^{\nu-1} (-1)^{k} {\binom{\nu-1}{k}} \sum_{l=0}^{k} L(k,l) \left(\frac{\sqrt{t^{2} - \gamma^{2}}}{\gamma} \right)^{2l+1}}_{::I_{2}}.$$

Da für allen>0

$$\sum_{k=0}^{n} (-1)^{k} \frac{1}{(n-k)!k!} = \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (-1)^{k} 1^{n-k} = \frac{1}{n!} (1-1)^{n} = 0$$

gilt, ergibt sich mit $(2k)!! = 2^k k!$ die folgende Identität:

$$\begin{split} I_2 &= 2\nu\gamma^{-1}\sum_{l=0}^{\nu-1} \left(\frac{\sqrt{t^2 - \gamma^2}}{\gamma}\right)^{2l+1} \sum_{k=l}^{\nu-1} (-1)^k {\binom{\nu-1}{k}} L(k,l) \\ &= 2\nu\gamma^{-1}\sum_{l=0}^{\nu-1} \left(\frac{\sqrt{t^2 - \gamma^2}}{\gamma}\right)^{2l+1} \frac{2^l(\nu-1)!}{(2l+1)!!} \sum_{k=l}^{\nu-1} (-1)^k \frac{1}{(\nu-1-k)!(k-l)!} \\ &= 2\nu\gamma^{-1}\sum_{l=0}^{\nu-1} \left(\frac{\sqrt{t^2 - \gamma^2}}{\gamma}\right)^{2l+1} \frac{2^l(\nu-1)!}{(2l+1)!!} \underbrace{\sum_{k=0}^{\nu-1-l} (-1)^{k+l} \frac{1}{(\nu-1-k-l)!k!}}_{=0 \text{ für } l \neq \nu-1} \\ &= 2\nu\gamma^{-1} \left(\frac{\sqrt{t^2 - \gamma^2}}{\gamma}\right)^{2\nu-1} \frac{2^{\nu-1}(\nu-1)!}{(2\nu-1)!!} (-1)^{\nu-1} \\ &= (-1)^{\nu-1} 2\nu\gamma^{-1} \left(\frac{\sqrt{t^2 - \gamma^2}}{\gamma}\right)^{2\nu-1} \frac{(2\nu-2)!!}{(2\nu-1)!!} \,. \end{split}$$

Mit Formel (5.2) folgt die Darstellung des Rekonstruktionskerns (5.19). Die Normierungskonstante ergibt sich durch die folgende Rechnung:

$$\begin{split} c_{\nu}(\gamma) &= 4\pi \int_{\sqrt{1-\gamma^2}}^{1} \left(1 - \frac{1-x^2}{\gamma^2}\right)^{\nu} dx \\ &= 4\pi \sum_{k=0}^{\nu} \binom{\nu}{k} \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right)^{\nu-k} \gamma^{-2k} \int_{\sqrt{1-\gamma^2}}^{1} x^{2k} dx \\ &= 4\pi \sum_{k=0}^{\nu} \binom{\nu}{k} \frac{(\gamma^2 - 1)^{\nu-k}}{\gamma^{2\nu}(2k+1)} \left(1 - \left(\sqrt{1-\gamma^2}\right)^{2k+1}\right) \\ &= 4\pi \left(\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2}\right)^{\nu} \left[\sum_{k=0}^{\nu} \left(\binom{\nu}{k} \frac{1}{(\gamma^2 - 1)^k(2k+1)}\right) - \sqrt{1-\gamma^2} \sum_{k=0}^{\nu} (-1)^k \binom{\nu}{k} (2k+1)^{-1}\right] \\ &= 4\pi \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right)^{\nu} \left[\sum_{k=0}^{\nu} \left(\binom{\nu}{k} (\gamma^2 - 1)^{-k} (2k+1)^{-1}\right) - \sqrt{1-\gamma^2} L(\nu,\nu)\right], \end{split}$$

da nach Formel 0.160 aus [25] mit $a=\frac{3}{2}$ und $b=\frac{1}{2}$

$$\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{\nu}(-1)^{k}\binom{\nu}{k}\binom{k+\frac{1}{2}}{1}^{-1} = \frac{1}{2}B\left(\nu+1,\frac{1}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\nu+1\right)\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\nu+\frac{3}{2}\right)} = L(\nu,\nu),$$

gilt, wobei B die Beta-Funktion und Γ die Gamma-Funktion bezeichnet. Darüber hinaus wurden die bekannten Beziehungen

$$(2\nu)!! = 2^{\nu} \Gamma(\nu+1)$$
 und $(2\nu+1)!! = \frac{2^{\nu} \Gamma(\nu+\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2})}$

ausgenutzt.

Die Spezialfälle $\nu = 2$ und $\nu = 3$

Wir geben nun zwei Spezialfälle an, die später in den numerischen Tests Verwendung finden.

Korollar 5.8

a) Der zu $E_{\gamma}^{2}(x)$ gehörende Rekonstruktionskern ist gegeben durch $\psi_{\gamma}^{2}(\theta) = \Psi_{\gamma}^{2}(\cos \theta)$ mit

$$\Psi_{\gamma}^{2}(t) = \frac{1}{c_{2}(\gamma)} \begin{cases} 1 - \frac{4t^{2}}{\gamma^{2}} + \frac{8t^{4}}{3\gamma^{4}}, & falls \ t < \gamma \\ 1 - \frac{4t^{2}}{\gamma^{2}} + \frac{8t\left(t^{3} - \left(t^{2} - \gamma^{2}\right)^{3/2}\right)}{3\gamma^{4}}, & sonst \end{cases}$$
(5.21)

und

$$c_2(\gamma) = 4\pi \left(1 - \gamma^{-2}\right)^2 \left(1 + \frac{2}{3} \left(\gamma^2 - 1\right)^{-1} + \frac{1}{5} \left(\gamma^2 - 1\right)^{-2} - \frac{8}{15} \sqrt{1 - \gamma^2}\right).$$

b) Der 3-Rekonstruktionskern ist gegeben durch $\psi^3_{\gamma}(\theta) = \Psi^3_{\gamma}(\cos \theta)$ mit

$$\Psi_{\gamma}^{3}(t) = \frac{1}{c_{3}(\gamma)} \begin{cases} 1 - \frac{6t^{2}}{\gamma^{2}} + \frac{8t^{4}}{\gamma^{4}} - \frac{16t^{6}}{5\gamma^{6}}, & falls \ t < \gamma \\ 1 - \frac{6t^{2}}{\gamma^{2}} + \frac{8t^{4}}{\gamma^{4}} - \frac{16t\left(t^{5} - \left(t^{2} - \gamma^{2}\right)^{5/2}\right)}{5\gamma^{6}}, & sonst \end{cases}$$
(5.22)

und

$$c_{3}(\gamma) = 4\pi \left(1 - \gamma^{-2}\right)^{3} \left(1 + \left(\gamma^{2} - 1\right)^{-1} + \frac{3}{5}\left(\gamma^{2} - 1\right)^{-2} + \frac{1}{7}\left(\gamma^{2} - 1\right)^{-3} - \frac{16}{35}\sqrt{1 - \gamma^{2}}\right).$$



Abbildung 5.6: Rekonstruktionskerne zum ν -Mollifier.

Die obige Abbildung veranschaulicht die Rekonstruktionskerne für $\nu = 1, 2, 3$ bei festem Regularisierungsparameter $\gamma = 0.2$ bzw. $\gamma = 0.3$. Je größer ν gewählt ist, desto glatter ist der Übergang des Kerns an der Stelle $t = \gamma$. Auf der anderen Seite vergrößert sich bei festem Regularisierungsparameter γ der Wertebereich des Kerns je größer ν ist. Der Einfluss des Parameters ν auf das Rekonstruktionsergebnis wird bei den numerischen Tests in Kapitel 6.1 aufgezeigt.

5.3 Direkte Rekonstruktion von Kanten

In verschiedenen Anwendungen sollen bestimmte Eigenschaften der Lösung, sogenannte *Features*, wie zum Beispiel Kanten, rekonstruiert werden. Gewöhnlich folgt daher nach der Rekonstruktion ein Bildbearbeitungschritt, der unabhängig von dieser durchgeführt wird. In [57, 58] wurde jedoch gezeigt, dass mit Hilfe der Approximativen Inverse auch lineare Transformationen der Lösung direkt aus den gegebenen Daten berechnet werden können, ohne die eigentliche Funktion selbst zuvor zu rekonstruieren. Wichtige Beispiele sind der Gradient und der Laplace Operator der Lösung. Diese ermöglichen die direkte Berechnung von Kantenbildern aus den Daten [28, 57], also die Kombination von Bildrekonstruktion und Bildanalyse. In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass im Fall der sphärischen Radontransformation der Laplace-Beltrami Operator der Lösung direkt aus

den Daten rekonstruiert werden kann. Diese Informationen können beispielsweise zur automatischen Kantenbestimmung verwendet werden.

Die ersten beiden Ableitungen des Dawson Integrals sind, wie man leicht nachrechnet, gegeben durch

$$D'(x) = 1 - 2xD(x)$$
 bzw. $D''(x) = (4x^2 - 2)D(x) - 2x$.

Mit der Produktregel erhält man hieraus nach Zusammenfassen der Terme das folgende Resultat.

Satz 5.9 Für den Rekonstruktionskern aus Satz 5.4

$$\Psi_{\gamma}(\langle \xi, \omega \rangle) = \frac{1}{c(\gamma)} \left(1 - \frac{2\langle \xi, \omega \rangle}{\gamma} D\left(\frac{\langle \xi, \omega \rangle}{\gamma}\right) \right), \qquad \xi, \omega \in \mathcal{S}^2$$

gilt mit $t = \langle \xi, \omega \rangle$

$$\Psi_{\gamma}'(t) = -\frac{2}{c(\gamma)\gamma^{3}} \left(\left(\gamma^{2} - 2t^{2}\right) D\left(\frac{t}{\gamma}\right) + t\gamma \right)$$

$$\Psi_{\gamma}''(t) = \frac{4}{c(\gamma)\gamma^{5}} \left(\left(3\gamma^{2}t - 2t^{3}\right) D\left(\frac{t}{\gamma}\right) + t^{2}\gamma - \gamma^{3} \right)$$

Daraus folgt

$$\Delta_{\mathcal{S}^2}\Psi_{\gamma}(\langle\xi,\omega\rangle) = \frac{4}{c(\gamma)\gamma^5} \left(D\left(\frac{\langle\xi,\omega\rangle}{\gamma}\right)\langle\xi,\omega\rangle k_1 + \gamma k_2 \right)$$
(5.23)

mit

$$k_{1} = \gamma^{2} \left(\gamma^{2} - 5t^{2} + 3 \right) + 2t^{2} \left(t^{2} - 2 \right)$$

$$k_{2} = \gamma^{2} \left(2t^{2} - 1 \right) + t^{2} \left(1 - t^{2} \right),$$

wobei in (5.23) der Laplace-Beltrami Operator Δ_{S^2} bezüglich der Variablen ω angewendet wird.

Beweis. Die erste Behauptung kann durch direkte Rechnung gezeigt werden. Der zweite Teil des Satzes folgt unter Verwendung der Rechenregel für zonale Funktionen aus Lemma 1.4. □

Da sowohl der Laplace-Beltrami Operator als auch die sphärische Radontransformation bezüglich des L^2 -Skalarproduktes selbstadjungiert sind und weiterhin die Radontransformation mit dem Laplace-Beltrami Operator vertauscht werden kann, gilt:

$$\begin{aligned} (\Delta_{\mathcal{S}^2} f)_{\gamma} \left(\xi\right) &= \langle \Delta_{\mathcal{S}^2} f, e_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} \\ &= \langle f, \Delta_{\mathcal{S}^2} R \Psi_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} \\ &= \langle f, R \Delta_{\mathcal{S}^2} \Psi_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} \\ &= \langle g, \Delta_{\mathcal{S}^2} \Psi_{\gamma}(\xi, \cdot) \rangle_{L^2(\mathcal{S}^2)} \,. \end{aligned}$$

Daher kann mit dem Rekonstruktionskern aus (5.23) direkt eine geglättete Version des Laplace-Beltrami Operators der Lösung berechnet werden. Durch die Berechnung der Nulldurchgänge von $(\Delta_{S^2} f)_{\gamma}$, können Kantenbilder der Lösung rekonstruiert werden. Ein numerisches Beispiel hierzu ist in Abschnitt 6.1 zu finden.

Bemerkung (Heuristik zur Wahl des Regularisierungsparameters)

Zunächst ist an dieser Stelle offen, wie der Regularisierungsparameter für die Rekonstruktion des Laplace-Beltrami Operators gewählt werden sollte, da das Problem um zwei Stufen schlechter gestellt ist als die Rekonstruktion von f selbst [57]. Daher ist eine stärkere Regularisierung erforderlich. In unserem Fall bietet sich als Ausweg an, die Kosinustransformation zu nutzen, um einen geeigneten Regularisierungsparameter zu bestimmen. Diese Transformation glättet ebenfalls aufgrund des Zusammenhangs (2.17) zwei Stufen stärker als die Radontransformation. Dies führt zu folgender Vorgehensweise:

Wähle mit dem L-Kriterium einen geeigneten Regularisierungsparameter für die Inversion der Kosinustransformation ausgehend von den gegebenen Daten und nutze anschließend denselben Parameter zur Rekonstruktion des Laplace-Beltrami Operators.

Es stellt sich bei den Tests in Abschnitt 6.1 heraus, dass diese Wahl von γ zu guten Ergebnissen führt.

5.4 Berechnung der Kerne für die Kosinus- und Sinustransformation

Ziel dieses Kapitels ist es, Rekonstruktionskerne für die Kosinus- und die Sinustransformation zu berechnen. Es zeigt sich, dass diese aus den Rekonstruktionskernen für die sphärische Radontransformation abgeleitet werden können.

Ausgangspunkt ist der Zusammenhang (2.17) zwischen der sphärischen Radon- und der Kosinustransformation

$$\Box_d K = R,$$

welcher durch den Box-Operator aus (2.15) gegeben ist. Aufgrund der Kommutativität von \square_3 und R^{-1} (die Kugelflächenfunktionen sind die Eigenfunktionen beider Operatoren), folgt hieraus [90]:

$$\Box_3 R^{-1} = R^{-1} \Box_3 = K^{-1} \,. \tag{5.24}$$

Somit ist es möglich, die Rekonstruktionskerne für die Kosinustransformation aus den Kernen für die sphärische Radontransformation abzuleiten. Für einen gewählten Mollifier e_{γ} bezeichne Ψ_{γ} bzw. Ψ_{γ}^{K} den zugehörigen Rekonstruktionskern für die Radon- bzw. für die Kosinustransformation. Da die Kosinustransformation selbstadjungiert ist, folgt für $e_{\gamma} \in \mathcal{R}(K)$

$$\begin{split} K^*\Psi^K_\gamma &= e_\gamma & \Longleftrightarrow \quad K\Psi^K_\gamma &= e_\gamma \\ & \Longleftrightarrow \quad \Psi^K_\gamma &= K^{-1}e_\gamma &= \Box_3 R^{-1}e_\gamma &= \Box_3 \Psi_\gamma \,. \end{split}$$

Die Rekonstruktionskerne für die Kosinustransformation können also berechnet werden,

indem der Box-Operator auf die im vorigen Kapitel bestimmten Kerne für die Radontransformation anwendet wird, d. h. es gilt $\Psi_{\gamma}^{K} = \Box_{3} \Psi_{\gamma}$.

Für die Kosinustransformation beschränken wir uns in dieser Arbeit auf den Gauß-Mollifier. Mit Satz 5.9 und Satz 5.4 erhält man das folgende Resultat.

Korollar 5.10 (Rekonstruktionskern für die Kosinustransformation) Für $t = \langle \xi, \omega \rangle, \ \xi, \omega \in S^2$ ist der Rekonstruktionskern zum Gauß-Mollifier gegeben durch

$$\Psi_{\gamma}^{K}(\langle\xi,\omega\rangle) = \frac{1}{2c(\gamma)\gamma^{5}\pi} \left(D\left(\frac{\langle\xi,\omega\rangle}{\gamma}\right)\langle\xi,\omega\rangle k_{1} + \gamma k_{2} \right)$$
(5.25)

mit

$$k_{1} = 4t^{2} (t^{2} - 1) + \gamma^{2} (6 - 10t^{2}),$$

$$k_{2} = -2t^{2} (t^{2} - 1) + \gamma^{2} (4t^{2} + \gamma^{2} - 2),$$

$$c(\gamma) = 4\pi\gamma D (\gamma^{-1}).$$

Eine Darstellung dieses Rekonstruktionskerns mit Hilfe der erfi-Funktion ist in [60] zu finden. Abbildung 5.7 zeigt den Rekonstruktionskern zum einen als 3D-Plot, um einen besseren Eindruck des Rekonstruktionskerns als Funktion über S^2 zu vermitteln, und zum anderen als Funktion von t für verschiedene Regularisierungsparameter γ .



Abbildung 5.7: Rekonstruktionskern der Kosinustransformation zum Gauß-Mollifier

Bemerkung (Konstruktion der Rekonstruktionskerne mit Hilfe der Eigenfunktionen) Wie in [54] gezeigt, ist die Tikhonov-Philipps Regularisierung als Spezialfall im Verfahren der Approximativen Inversen enthalten. Der entsprechende Rekonstruktionskern wird mit Hilfe des singulären Systems des betrachteten Operators dargestellt. Diese Konstruktion kann sowohl für sphärische Radontransformation als auch für die Kosinus- und Sinustransformation mit Hilfe des Satzes 2.14 bzw. des Korollars 2.15 durchgeführt werden, wobei das Additionstheorem (Satz 1.6) genutzt werden kann, um eine Darstellung des Kerns in Legendre-Polynomen zu erhalten. Für diesen Rekonstruktionskern können viele theoretische Resultate leicht gezeigt werden, jedoch ist mit mäßigen numerischen Resultaten zu rechnen, weshalb er in dieser Arbeit nicht weiter betrachtet wird. **Bemerkung** (Rekonstruktionskerne für die Sinustransformation)

Mit (2.18) und (5.24) lässt sich auch ein Konstruktionsprinzip für den Rekonstruktionskern Ψ_{γ}^{S} der Sinustransformation herleiten. Bezeichnet Ψ_{γ} wieder den Rekonstruktionskern für die Radontransformation, so folgt für $e_{\gamma} \in \mathcal{R}(S)$:

$$\begin{split} S\Psi^S_{\gamma} = e_{\gamma} & \iff \quad \frac{2k_{d-2}}{w_{d-1}}RK\Psi^S_{\gamma} = e_{\gamma} \\ & \iff \quad \Psi^S_{\gamma} = \frac{2k_{d-2}}{w_{d-1}}K^{-1}R^{-1}e_{\gamma} = \frac{2k_{d-2}}{w_{d-1}}K^{-1}\Psi_{\gamma} \,. \end{split}$$

Da für d = 3 die Kosinustransformation mit Hilfe der Approximativen Inversen numerisch invertiert werden kann, ergibt sich der Rekonstruktionskern bei geeignetem Mollifier als Lösung des inversen Problems:

$$K\Psi_{\gamma}^{S} = \pi\Psi_{\gamma}.$$

Ausblick: Eine alternative Methode den Kern für die Sinustransformation zu berechnen ist durch

$$S\Psi^S_{\gamma} = \pi \square_3 \left(R^{-1} \Psi_{\gamma} \right)$$

gegeben. Diese Gleichung ist insbesondere eine gute Ausgangslage für die analytische Berechnung eines konkreten rotationssymmetrischen Rekonstruktionskerns, da die sphärische Radontransformation in diesem Fall durch eine Abel'sche Integraltransformation beschrieben wird.

Kapitel 6 Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die hergeleiteten Verfahren anhand mehrerer Beispiele getestet. Zunächst illustrieren wir die Ergebnisse der Approximativen Inversen mit Hilfe von synthetischen Daten sowohl für die Radon- als auch für die Kosinustransformation. Für letztere werden die Ergebnisse zudem mit dem Verfahren von Kiderlen und Pfrang [8, 42] verglichen. Anschließend wird das in Kapitel 3 erläuterte Problem aus der Stereologie betrachtet. Sowohl die Approximative Inverse als auch das Verfahren von Kiderlen und Pfrang werden zur numerischen Inversion der Kosinustransformation verwendet, um ausgehend von einer geschätzten Schnittzahlrose die Dichte der Richtungsverteilung eines Prozesses zu rekonstruieren. Die Vor- und Nachteile beider Verfahren werden aufgezeigt, bevor schließlich 3D-Datensätze von realen Fasersystemen untersucht werden.

6.1 Inversion der Radontransformation

Zunächst wird das Verfahren zur Inversion der Radontransformation mit Hilfe synthetischer Daten getestet. Wir beginnen mit einer stetigen Testfunktion, bevor zwei unstetige Funktionen mit unserem Verfahren rekonstruiert werden.

Stetiges Phantom

Als erste Testfunktion verwenden wir

$$f(x, y, z) \coloneqq \cos(3\pi(z - y)) + \cos(3\pi x),$$

welche beispielsweise auch in [60, 94] betrachtet wird. In Abbildung 6.1 ist links das Phantom und rechts die an 900 Punkten numerisch berechnete Radontransformation zu



Abbildung 6.1: Funktion f und ihre Radontransformierte.

sehen. Sofern nicht anders angegeben, werden diese 900 Messwerte in Richtung des entsprechenden Extremalsystems als Daten für die Rekonstruktion genutzt. Es wird dabei dieselbe Farbskala für alle Rekonstruktionen (wie für die Funktion selbst) und in den Fehlerbildern zu unterschiedlichen Rekonstruktionskernen verwendet, um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten.

Zunächst rekonstruieren wir das Phantom ausgehend von exakten Werten der Radontransformation. Abbildung 6.2 veranschaulicht die Resultate für verschiedene Rekonstruktionskerne. Das Fehlerbild in der zweiten Zeile der Abbildung zeigt die Differenz zwischen den exakten Werten der Testfunktion und der jeweiligen Rekonstruktion.



Abbildung 6.2: Rekonstruktionen aus exakten Daten. (erste Zeile: Rekonstruktion, zweite Zeile: Fehlerbild)

Die mittels Gauß-Kern berechnete Rekonstruktion ist im Vergleich zu den anderen Rekonstruktionen sehr glatt. Wie im Fehlerbild zu erkennen ist, werden sowohl die hohen als auch die niedrigen Werte weggeglättet. Für den 1-Kern, also den Rekonstruktionskern der zum 1-Mollifier gehört, ist dieser Effekt im Fehlerbild noch deutlicher feststellbar, während der Fehler beim 3-Kern diese Fehlersystematik kaum aufweist.

In der folgenden Tabelle 6.1 sind die L^2 - und L^1 -Fehler sowohl für den Gauß- als auch für die ν -Mollifier mit $\nu = 1, 2, 3$ eingetragen. Hierbei wurde der angegebene Regularisierungsparameter γ mit Hilfe des L-Kriteriums bestimmt. In Klammern sind die optimalen Werte zu finden; als optimaler Regularisierungsparameter wurde für $k \in \mathbb{N}$ der Wert $\gamma_k = 0.05 k$ bestimmt, der den L^2 -Fehler zur Originalfunktion minimiert. Für diese Testfunktion zeigt sich, dass der 3-Kern zu den Ergebnissen mit den geringsten L^1 - und L^2 -Fehlern im Vergleich zur Originalfunktion f führt, falls exakte Daten zur Verfügung stehen. Der Parameter, der mittels L-Kriterium gewählt wird, liegt für alle Kerne nahe am optimalen Regularisierungsparameter, jedoch nie oberhalb.

		Gauß-Kern	1-Kern	2-Kern	3-Kern	
		900 Datenpunkte				
	γ	0.075(0.080)	0.145(0.145)	0.135(0.145)	0.150 (0.155)	
exakte Daten	L^2	$0.586\ (0.580)$	$0.703 \ (0.703)$	$0.575 \ (0.561)$	$0.517 \ (0.509)$	
	L^1	1.659(1.659)	2.017(2.017)	$1.637 \ (1.605)$	1.470(1.454)	
	γ	$0.075\ (0.080)$	0.145(0.145)	0.140(0.150)	0.150(0.160)	
5% Rauschen	L^2	$0.596\ (0.587)$	$0.707 \ (0.707)$	$0.575 \ (0.569)$	$0.531 \ (0.520)$	
	L^1	1.689(1.681)	2.030(2.030)	$1.644 \ (1.638)$	1.508(1.491)	
	γ	$0.075\ (0.080)$	0.145(0.145)	$0.135\ (0.150)$	0.150(0.160)	
10% Rauschen	L^2	$0.627 \ (0.613)$	0.724(0.724)	$0.621 \ (0.597)$	0.570(0.554)	
	L^1	1.769(1.752)	$2.075\ (2.075)$	$1.761 \ (1.706)$	1.608(1.577)	
			4900 Dat	enpunkte		
	γ	0.040(0.045)	0.085(0.090)	0.075 (0.095)	0.085 (0.090)	
exakte Daten	L^2	0.198(0.189)	0.346(0.333)	0.239(0.220)	0.176(0.173)	
	L^1	0.549(0.540)	$0.965\ (0.937)$	$0.668 \ (0.630)$	0.497 (0.490)	
	γ	$0.040 \ (0.045)$	$0.085\ (0.090)$	$0.075 \ (0.095)$	$0.085 \ (0.095)$	
5% Rauschen	L^2	0.233(0.214)	$0.355\ (0.340)$	0.269(0.235)	$0.215 \ (0.205)$	
	L^1	$0.653\ (0.610)$	$0.991\ (0.960)$	$0.756\ (0.671)$	$0.606\ (0.585)$	
	γ	$0.040\ (0.045)$	$0.085\ (0.090)$	$0.075 \ (0.095)$	$0.080 \ (0.105)$	
10%Rauschen	L^2	$0.328\ (0.292)$	$0.392\ (0.375)$	$0.354\ (0.291)$	0.350(0.278)	
	L^1	$0.928\ (0.830)$	$1.096\ (1.059)$	$1.002 \ (0.827)$	$0.995\ (0.792)$	
			10 000 Da	tenpunkte		
	γ	$0.030 \ (0.035)$	$0.070\ (0.080)$	$0.065 \ (0.070)$	$0.070 \ (0.075)$	
exakte Daten	L^2	$0.137\ (0.115)$	$0.294\ (0.247)$	0.162(0.143)	0.114(0.110)	
	L^1	$0.382\ (0.332)$	$0.821 \ (0.696)$	$0.450\ (0.404)$	$0.323\ (0.317)$	
	γ	$0.030\ (0.035)$	$0.060\ (0.080)$	$0.065\ (0.070)$	$0.065\ (0.080)$	
5% Rauschen	L^2	$0.192\ (0.156)$	$0.340\ (0.252)$	$0.194\ (0.172)$	$0.184\ (0.151)$	
	L^1	$0.541 \ (0.442)$	$0.942 \ (0.710)$	$0.544 \ (0.484)$	$0.518\ (0.428)$	
	γ	$0.030\ (0.040)$	$0.060\ (0.080)$	$0.065\ (0.085)$	$0.070\ (0.090)$	
10% Rauschen	L^2	$0.306\ (0.227)$	$0.383\ (0.280)$	$0.275 \ (0.222)$	$0.264 \ (0.217)$	
	L^1	$0.865\ (0.645)$	$1.073\ (0.788)$	$0.777 \ (0.634)$	$0.748\ (0.619)$	

Tabelle 6.1: L^1 - und L^2 -Fehler bei 900, 4900 und 10000 Datenpunkten, in Klammern jeweils die optimalen Werte.

Die Daten werden nun folgendermaßen gestört: Wir erzeugen ein rotationsinvariantes Gaußsches Zufallsfeld X mit stetiger Kovarianz-Funktion und $Cov(X(t_1), X(t_2)) = 0$ für alle t_1, t_2 mit $d_{\text{geo}}(t_1, t_2) > r$, wobei $d_{\text{geo}}(\xi, \omega) = \arccos(\langle \xi, \omega \rangle)$ den geodätischen Abstand auf der Einheitssphäre bezeichnet. Hierbei ist r so klein gewählt, dass die Werte des Feldes ausgewertet an zwei beliebigen Messpunkten unkorreliert sind. Für gewähltes relatives **Rauschlevel** ε sind die gestörten Daten $g^{\varepsilon}(\omega_i)$ in Richtung ω_i für $i = 1, \ldots, n$ gegeben durch

0.06

0.03 0

$$g^{\varepsilon}(\omega_i) \coloneqq g(\omega_i) + \varepsilon \underbrace{\frac{\|g\|_{L^2(\mathcal{S}^2)}}{\|\mathbf{X}\|_{L^2(\mathcal{S}^2)}}}_{\text{Störung der Daten}} \mathbf{X}_i,$$

wobei X_i , i = 1, ..., n die Realisierung des Zufallsfeldes in Richtung ω_i ist. Die obige L^2 -Norm ist zu verstehen als

$$||g||_{L^2(\mathcal{S}^2)} = \left(\sum_{i=1}^n w_i g(\omega_i)^2\right)^{1/2},$$

wobei w_i die Integrationsgewichte des entsprechenden Extremalsystems bezeichnet.



Abbildung 6.3: Rekonstruktionen aus gestörten Daten (Rauschlevel 10%)

Auch bei gestörten Daten werden durch die Anwendung der hergeleiteten Methode sehr gute Ergebnisse erzielt, was sich auf die regularisierende Wirkung des Verfahrens zurückführen lässt. Bei den Tests zeigt sich, dass für wachsende Rauschlevel der optimale Regularisierungsparameter nur wenig ansteigt; bei 10000 etwas stärker als bei 900 Datenpunkten (siehe Tabelle 6.1). Das L-Kriterium wählt in allen Fällen einen Parameter γ aus, der nahe am optimalen Wert liegt; bis auf zwei Ausnahmen ist der gewählte Wert von γ nicht mehr als 0.01 vom optimalen Wert entfernt. Jedoch ist der mittels L-Kriterium gewählte Wert, was das optische Empfinden betrifft, meist etwas zu klein gewählt, da ein

schwaches Rauschen in den Rekonstruktionen zu erkennen ist. Es bietet sich daher an, einen leicht höheren Wert zu nutzen, welcher in allen betrachteten Beispielen höchstens zu minimal schlechteren, manchmal sogar zu geringeren L^2 -Fehlern führt.

Unstetige Testfunktion

Um zu testen, ob die Approximative Inverse auch zur Rekonstruktion von unstetigen Funktionen geeignet ist, betrachten wir eine weitere Testfunktion.



Diese Funktion wird sowohl aus exakten als auch aus gestörten Daten rekonstruiert, die Ergebnisse sind in Abbildung 6.4 bzw. 6.5 illustriert.



Abbildung 6.4: Rekonstruktionen aus exakten Daten.

Bei exakten Daten enthalten 900 Messpunkte nicht genügend Informationen, um das Rechteck am Äquator als solches zu rekonstruieren (Abb. 6.4(a)). Werden jedoch mehr Messrichtungen verwendet, so ist dies (auch bei gestörten Daten) möglich (siehe Abb. 6.4(c) bzw. Abb. 6.5(c)). Auch für diese Testfunktion sind die Rekonstruktionen mittels Gauß-Rekonstruktionskern im Vergleich deutlich glatter, während der 1-Kern zu sehr unruhigen Rekonstruktionen führt. Außerdem ist bei der Rekonstruktion mittels Gauß-Kern (Abb. 6.4(a)) die Trennung des Rechtecks vom daneben liegenden (gelben) Kreis besser möglich als bei Verwendung des 1-Kerns. Wie in der folgenden Abbildung 6.5 zu sehen ist, liefert die Methode der Approximativen Inversen für diese Testfunktion auch bei gestörten Daten sehr gute Ergebnisse.



Abbildung 6.5: Rekonstruktionen aus gestörten Daten (Rauschlevel 10%).

In Tabelle 6.2 sind die L^2 - und L^1 -Fehler für exakte und gestörte Daten eingetragen. Der Gauß-Rekonstruktionskern und der 3-Kern liefern bei diesem Phantom fast gleichwertige Ergebnisse, wenn der Fehler zur Originalfunktion als Vergleichsmerkmal herangezogen wird. Ersterer erhält jedoch gleichzeitig die Charakteristika der Lösung besser, d. h. die Trennung der einzelnen Sprünge voneinander ist deutlicher zu erkennen, weshalb er in diesem Fall den ν -Kernen vorzuziehen ist. Das L-Kriterium ist auch bei dieser Testfunktion zur Wahl des Regularisierungsparameters gut geeignet.

		Gauß-Kern	1-Kern	2-Kern	3-Kern	
		900 Datenpunkte				
	γ	$0.085 \ (0.085)$	0.185(0.150)	0.165(0.165)	0.180(0.180)	
exakte Daten	L^2	$0.205\ (0.205)$	$0.261\ (0.243)$	0.208(0.208)	$0.201 \ (0.201)$	
	L^1	$0.500\ (0.500)$	$0.690\ (0.638)$	$0.509\ (0.509)$	$0.481\ (0.481)$	
	γ	$0.085\ (0.090)$	$0.185\ (0.150)$	0.165(0.170)	0.175(0.185)	
10% Rauschen	L^2	0.224(0.223)	0.267(0.256)	0.225(0.224)	0.222(0.219)	
	L^1	$0.574\ (0.570)$	$0.709\ (0.680)$	$0.573\ (0.567)$	$0.566\ (0.551)$	
		10000 Datenpunkte				
	γ	$0.035 \ (0.035)$	$0.075\ (0.080)$	$0.070 \ (0.070)$	$0.075\ (0.070)$	
exakte Daten	L^2	0.111(0.111)	$0.154\ (0.153)$	0.121(0.121)	0.113(0.112)	
	L^1	$0.177 \ (0.177)$	$0.353\ (0.336)$	$0.227 \ (0.227)$	$0.179\ (0.196)$	
	γ	$0.035\ (0.040)$	$0.075\ (0.095)$	$0.070 \ (0.085)$	$0.075\ (0.090)$	
10% Rauschen	L^2	$0.150\ (0.144)$	$0.167\ (0.163)$	$0.151\ (0.146)$	$0.149\ (0.143)$	
	L^1	$0.366\ (0.333)$	$0.408\ (0.360)$	$0.366\ (0.321)$	0.362(0.322)	

Tabelle 6.2: L^1 -	und L^2 -Fehler s	sowie Regulari	sierungsparameter	nach I	Kriterium.
in K	lammern jeweil	ls die optimale	n Werte.		

Direkte Rekonstruktion von Kanten

In diesem Abschnitt sollen die Kanten der Testfunktion direkt aus den Daten rekonstruiert werden. Die Idee besteht darin, zunächst mit Hilfe des Rekonstruktionskerns aus Satz 5.9 den Laplace-Beltrami Operator angewandt auf die Lösung zu berechnen. Danach werden im Ergebnis die Nulldurchgänge mit Hilfe einer *brute-force* Methode gesucht, um die Kantenbilder zu erzeugen. Hierbei wird der Regularisierungsparameter γ mit Hilfe des L-Kriteriums und der Kosinustransformation gewählt (siehe hierzu die Bemerkung aus Abschnitt 5.3). Wie zu erwarten, reichen 900 Messpunkte nicht aus, um die Kanten des Rechtecks korrekt zu rekonstruieren. Stehen jedoch 10000 Messpunkte zur Verfügung, so ist es sowohl bei exakten als auch gestörten Daten möglich, qualitativ gute Kantenbilder direkt aus den Daten zu berechnen (Abb. 6.6(e) bzw. 6.6(f)). Die resultierenden Kanten sind bei diesem Vorgehen nicht geschlossen, was bei Bedarf in einem Nachbearbeitungsschritt zu beheben ist.



Abbildung 6.6: Laplace-Beltrami Operator und (resultierende) Kantenbilder.

Rekonstruktion aus einer größeren Anzahl von Messdaten

Der numerische Aufwand bei der Verwendung des Verfahrens der Approximativen Inversen ist gering, da der Rekonstruktionskern unabhängig von den gemessenen Daten vorberechnet werden kann. Sind die benötigten Werte des Rekonstruktionskerns auf der Festplatte gespeichert, so kann die Berechnung für 900 Datenpunkte auf einem Standard-PC (CPU: Intel Core 2 Duo E8400, Arbeitsspeicher: 4 GB) innerhalb einer Sekunde für einen festen Wert des Regularisierungsparameters γ durchgeführt werden. Hierbei wird die Rekonstruktion auf einem Kugelkoordinatengitter mit 50×200 Punkten in der oberen

Halbsphäre berechnet. Ohne jegliche Vorberechnung des Kerns nimmt die Rekonstruktion circa 36 Sekunden bei Verwendung der analytischen Darstellung des Rekonstruktionskerns (Satz 5.4) in Anspruch. Wird das L-Kriteriums mit 50 Werten für γ verwendet und die Vorwärtsanwendung durch Interpolation mit Kugelflächenfunktionen (Satz 2.14) berechnet, benötigt das Verfahren auf dem Standard-PC ohne jegliche Vorberechnung eine Rechenzeit von ungefähr 74 Sekunden; mit Vorberechnung der Rekonstruktionskerne weniger als 20 Sekunden.

Auf einem High-Performance-Computer mit 12 Prozessorkernen (zwei Intel Xeon X5670) und 48 GB Arbeitsspeicher lässt sich die Zeit gar auf unter 6 Sekunden verkürzen.

Stehen 10000 Datenpunkte zur Verfügung, so beträgt die Rechenzeit unter Verwendung vorberechneter Kerne weniger als 3.5 Minuten. Der numerische Aufwand ist also gering und auch größere Datenmengen können ohne Probleme zur Rekonstruktion verwendet werden.

Wir betrachten ein weiteres Phantom (Abb. 6.7(a)), das aus viel feineren Details besteht, um zu zeigen, dass auch deutlich komplexere Funktionen mit Hilfe der Approximativen Inversen rekonstruiert werden können. Dieses Phantom weist insbesondere sehr unterschiedliche Sprunghöhen auf, was die Rekonstruktion zusätzlich erschwert.

In Abbildung 6.7 werden Rekonstruktionen aus exakten und gestörten Daten präsentiert. Im ersten Fall können alle Details der Lösung in der Rekonstruktion erhalten werden, auch die sehr kleinen Sprünge. Nur im blauen Streifen am Äquator ist ein leichtes Rauschen zu erkennen, welches jedoch bei der Wahl $\gamma = 0.04$ verschwindet. Auch im Fall gestörter Daten führt die Methode zu guten Ergebnissen, wobei der Datenfehler erwartungsgemäß als leichtes Rauschen in der Rekonstruktion zu sehen ist.



Abbildung 6.7: Rekonstruktionen mit Gauß-Rekonstruktionskern.

6.2 Inversion der Kosinustransformation

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des Verfahrens der Approximativen Inversen für die Kosinustransformation illustriert, beginnend mit synthetischen Daten. Wir nutzen dazu die unstetige Testfunktion aus dem vorangegangenen Abschnitt. Die Abbildung 6.8 zeigt die Funktion und deren Kosinustransformation, ausgewertet an 900 Punkten. Die Werte der Kosinustransformation variieren nur leicht, nämlich zwischen 0.7 und 0.85.



Abbildung 6.8: Phantom und Kosinustransformation.

Aufgrund der stärkeren Schlechtgestelltheit der Kosinustransformation im Vergleich zur sphärischen Radontransformation ist mit deutlich größeren Schwierigkeiten bei der Inversion aus gestörten Daten zu rechnen. Abbildung 6.9 zeigt Rekonstruktionen mit Hilfe des Gauß-Rekonstruktionskerns aus 900 (erste Zeile) und 10000 (zweite Zeile) Messpunkten, wobei in der ersten Zeile der Wertebereich der Farbskala etwas verkleinert ist, um die Resultate besser darstellen zu können. Es stehen sowohl exakte als auch gestörte Daten mit einen Rauschlevel von einem und zwei Prozent zur Verfügung.



Abbildung 6.9: Rekonstruktionen aus exakten und gestörten Daten. (erste Zeile: 900 Datenpunkte (geänderte Farbskala), zweite Zeile: 10000 Datenpunkte)

Stehen nur 900 Messpunkte zur Verfügung, so ist es sogar bei exakten Daten notwendig, sehr stark zu regularisieren (vgl. Tabelle 6.3). Dadurch werden die kleineren Details deutlich zu stark geglättet (Abb. 6.9(a)), was letztlich auch zu verhältnismäßig großen L^1 - und L^2 -Fehlern führt.

Während bei einem Rauschlevel von einem Prozent die Hauptcharakteristika der Lösung in der Rekonstruktion erhalten werden, ist dies bei einem Rauschlevel von zwei Prozent und nur 900 Datenpunkten nicht mehr möglich. Zwar haben auch bei 10 000 Messwerten die Störungen einen deutlichen Einfluss auf das Ergebnis, jedoch ist es in diesem Fall auch bei einem Rauschlevel von zwei Prozent noch möglich, die Hauptmerkmale der Funktion in der Rekonstruktion zu bewahren. Allerdings können weder die Form des Rechtecks noch die unterschiedlichen Sprunghöhen rekonstruiert werden, da diese Informationen durch die notwendige Regularisierung weggeglättet werden.

Bei gestörten Daten treten in den Rekonstruktionen auch Werte kleiner Null auf, siehe dazu Lemma 4.2 und die darauf folgende Bemerkung. Dies ist zumeist in den Regionen der Fall, in denen der wahre Wert gleich Null ist. Ist a-priori bekannt, dass die gesuchte Funktion nur nicht-negative Werte annimmt, so bietet es sich an, die negativen Werte der Rekonstruktion nachträglich auf $[0, \infty]$ zu projizieren. In diesem Abschnitt wird diese Information jedoch nicht verwendet.

	exakte Daten	Rauschlevel 1%	Rauschlevel 2%
		900 Datenpunkte	
γ	0.190(0.175)	0.190(0.180)	$0.220\ (0.205)$
L^2	$0.364\ (0.347)$	$0.378\ (0.375)$	$0.427 \ (0.424)$
L^1	$1.068\ (1.006)$	$1.086\ (1.063)$	1.254(1.229)
		10000 Datenpunkt	e
γ	$0.070 \ (0.070)$	0.150(0.130)	$0.180\ (0.150)$
L^2	$0.167\ (0.167)$	$0.308\ (0.300)$	$0.357\ (0.339)$
L^1	$0.341\ (0.341)$	$0.861 \ (0.826)$	$1.043\ (0.963)$

Tabelle 6.3: L^1 - und L^2 -Fehler sowie Regularisierungsparameter nach L-Kriterium, in Klammern jeweils die optimalen Werte.

Aus obiger Tabelle ist abzulesen, dass die Störung der Daten insbesondere bei 10000, aber auch bei 900 Datenpunkten, einen deutlichen Einfluss auf die Wahl des Regularisierungsparameters γ hat. Mit steigendem Rauschlevel wächst auch der Parameter, der mittels L-Kriterium bestimmt wird, ähnlich wie der optimale Wert an.

Die Rechenzeiten stimmen mit denen im Fall der Radontransformation nahezu überein, da im Algorithmus nur der Rekonstruktionskern ausgetauscht werden muss.

Wir vergleichen nun die entwickelte Methode mit dem Verfahren von Kiderlen und Pfrang [8, 42], im Folgenden kurz KP-Methode genannt. In dieser Arbeit wird nur der Fehlerquadrate-Ansatz betrachtet, der neben anderen Optimierungsansätzen in [42] vorgeschlagen wird, da dieser in den durchgeführten numerischen Tests die besten Ergebnisse lieferte. Zunächst wird die Idee dieser Methode kurz vorgestellt:

Ist die Kosinustransformation in n Messrichtungen ω_i , i = 1, ..., n, gegeben, so besteht die Idee des Verfahrens darin, den Urbildraum, in dem die Lösung gesucht wird, auf diskrete Maße einzuschränken. Der Träger der Rekonstruktion ist also auf eine endliche Menge $\{\eta_k | k = 1, ..., m(n)\} \subset S^2$ beschränkt. Durch diese Restriktion wird erreicht, dass das inverse Problem gut gestellt ist [8, 9], weshalb zur Berechnung der diskreten Lösung keine Regularisierung nötig ist. Die Elemente des Trägers werden ausgehend von den Messrichtungen konstruiert durch

$$\eta_k = \frac{\omega_i \times \omega_j}{\|\omega_i \times \omega_j\|}, \qquad \omega_i \neq \pm \omega_j, \tag{6.1}$$

wobei $\omega_i \times \omega_j$ das Kreuzprodukt der beiden Einheitsvektoren $\omega_i, \omega_j \in S^2$ bezeichnet. Da die verwendeten Extremalsysteme nicht punktsymmetrisch sind, enthält der Träger somit $m(n) = \frac{n(n-1)}{2}$ Einheitsvektoren. Die Gewichte α_k in Richtung η_k der gesuchten Verteilung ergeben sich als Lösung des folgenden quadratischen Minimierungsproblems:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^{m(n)}} \sum_{i=1}^{n} \left(g(\omega_i) - \sum_{k=1}^{m(n)} \alpha_k |\langle \omega_i, \eta_k \rangle| \right)^2$$
u.d.N.: $\alpha_k \ge 0, \quad \forall k = 1, \dots, m(n).$
(6.2)

Als diskrete Rekonstruktion erhält man schließlich

$$\mu(u) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m(n)} \alpha_k \left(\delta_{\eta_k}(u) + \delta_{-\eta_k}(u) \right) ,$$

wobei $\delta_{\eta}(\cdot)$ die Delta-Distribution in Richtung η bezeichnet.

In [42] ist gezeigt, dass die obige Konstruktion des Trägers gemäß (6.1) sicherstellt, dass der Wert des Minimums durch die Einschränkung des Urbildraums auf diskrete Maße mit diesem Träger nicht verschlechtert wird. Der Nachteil dieser Konstruktion ist jedoch, dass ein Optimierungsproblem mit der großen Anzahl von $\frac{n(n-1)}{2}$ Unbekannten numerisch gelöst werden muss. Diese wächst also quadratisch mit der Anzahl der Datenpunkte; für 900 Messrichtungen sind es 404550 Unbekannte.

Stehen nur wenige Datenpunkte $(n \leq 100)$ zur Verfügung, so ist das Verfahren von Kiderlen und Pfrang als Rekonstruktionsmethode gut geeignet. Allerdings enthalten diese wenigen Messpunkte auch nur sehr wenige Informationen über die gesuchte Verteilung bzw. Dichte. Bei einer größeren Anzahl von Messpunkten ist der Aufwand bei der Anwendung der KP-Methode deutlich höher als bei der Approximativen Inversen. Das Verfahren benötigt größere Hardwareressourcen und ist deutlich langsamer, zudem hängt die Rechenzeit der KP-Methode stark von den gegebenen Messdaten ab.

Die Implementierung der KP-Methode benötigt auf dem High-Performance-Computer zwischen 65 und 700 Sekunden (abhängig vom Datensatz) bei Verwendung von 900 Messpunkten, um die diskrete Lösung zu berechnen. Die Rechenzeit liegt in den meisten Fällen bei circa 600 Sekunden. Zum Vergleich, die Rechenzeit des Verfahrens der Approximativen Inversen mit Verwendung des L-Kriteriums beträgt weniger als 6 Sekunden für die Rekonstruktion der Dichte aus einem solchen Datensatz. Bei 10000 Richtungen kann die KP-Methode mit obiger optimaler Konstruktion des Träger aus den Messrichtungen nicht mehr in angemessener Zeit eingesetzt werden.

Die Einschränkung des Urbildraums verursacht weitere Probleme, so kann die mittels KP-Methode berechnete diskrete Lösung optisch nur schwer interpretiert werden. Abbildung 6.10 zeigt die Rekonstruktionen der betrachteten Testfunktion (Abb. 6.8), ausgehend von denselben exakten und gestörten Daten wie im Fall der Approximativen Inversen. Während bei exakten Daten das Ergebnis der KP-Methode als "diskrete Version" der Testfunktion identifiziert werden kann, ist dies bei gestörten Daten nicht mehr der Fall. Ein Wiedererkennen der wahren Funktion ist kaum mehr möglich.



Abbildung 6.10: Diskrete Rekonstruktionen mit KP-Methode.

Es ist also ein Nachbearbeitungsschritt notwendig, um die Resultate geeignet zu visualisieren. Dies kann beispielsweise durch eine Kernglättung erreicht werden. Ausgehend von α_k und η_k erhält man bei Verwendung der Gaußfunktion eine kontinuierliche Lösung in Richtung $\omega \in S^2$ durch

$$f_{KP}(\omega) = \frac{1}{c_{\sigma}} \sum_{k=1}^{m(n)} \alpha_k \exp\left(-\left(\frac{d_{\text{geo}}(\omega, \eta_k)}{\sigma}\right)^2\right)$$
(6.3)

mit $d_{\text{geo}}(\omega, \eta_k) = \arccos(\langle \omega, \eta_k \rangle)$ und der Normierungskonstante $c_{\sigma} = 4\pi\sigma D(\sigma^{-1})$. Alternativ können auch andere Kerne verwendet werden [97]. Die Ergebnisse unterscheiden sich in Tests nicht wesentlich. Die Wahl des Kerns scheint eher von theoretischem Interesse, wenn gewisse Glattheitsannahmen vorausgesetzt werden können.

Allerdings besteht die Aufgabe nun darin, den Parameter σ bei gegebenen Daten sinnvoll zu wählen, obwohl dieser den Rekonstruktionsprozess selbst nicht beeinflusst. Ist $\sigma = 0.1$ gewählt, so zeigt Abbildung 6.11(a) eine sehr gute Rekonstruktion aus exakten Daten, während bei verrauschten Daten sehr starke Artefakte in der Lösung zu sehen sind. Es treten schon bei einem Rauschlevel von einem Prozent Werte größer Eins auf, so dass die Farbskala deutlich überschritten wird und große L^1 - und L^2 -Fehler zur Originalfunktion festzustellen sind. Wird der Wert des Parameters auf $\sigma = 0.175$ gesetzt, so erhalten wir für diese Testfunktion ähnliche Ergebnisse wie bei der Verwendung der Approximativen Inversen (Abb. 6.9). Dies zeigt deutlich, dass die Wahl des Parameters σ im Nachbearbeitungsschritt, einen starken Einfluss auf das Aussehen und die Qualität der Rekonstruktion hat. Liegt keine Information über den Rauschlevel a-priori vor, so ist offen, wie dieser Wert zu wählen ist.



Abbildung 6.11: Geglättete Rekonstruktionen der KP-Methode. (erste Zeile: $\sigma = 0.1$, zweite Zeile: $\sigma = 0.175$ (geänderte Farbskala))

6.3 Schätzung der Richtungsverteilung eines stationären Prozesses

In diesem Abschnitt wird die Dichte der Richtungsverteilung eines stationären Zylinder-Prozesses ausgehend von der geschätzten Schnittzahlrose rekonstruiert. Zu diesem Zweck hat Herr M. Spiess [60, 89] (Institut für Stochastik, Universität Ulm) Zylinder-Prozesse mit unterschiedlichen Richtungsverteilungen und Intensitäten simuliert, wobei als Beobachtungsfenster die Einheitskugel verwendet wurde. Anschließend wurde, ausgehend von der Simulation, die Schnittzahlrose analytisch bestimmt, d. h. für jede Messrichtung $\omega \in S^2$ wurde der Prozess mit der Ebene ω^{\perp} geschnitten und anschließend die Anzahl der Schnitte berechnet. Diese Werte werden in diesem Abschnitt als Daten zur Rekonstruktion genutzt.

Es bezeichne I die Intensität und f die Dichte der Richtungsverteilung eines Faser- oder Zylinder-Prozesses. Dann gilt der Zusammenhang

$$I(Kf) = g$$
,

wobei g die Schnittzahlrose bezeichnet (siehe Kapitel 3). Es wird nun sowohl die Approximative Inverse als auch die KP-Methode verwendet, um dieses inverse Problem zu lösen, d. h. die Dichte der Richtungsverteilung zu rekonstruieren. Anschließend erfolgt ein Vergleich der Ergebnisse.

Beide Verfahren werden zunächst folgendermaßen auf diese Aufgabe angepasst:

• Im Fall der Approximativen Inversen werden zunächst die Werte der Rekonstruktion f_{γ} auf $[0, \infty)$ projiziert, d. h. man setzt $f_{\gamma}^+ \coloneqq \max\{f_{\gamma}, 0\}$. Anschließend wird das L-Kriterium mit $||f_{\gamma}^+||$ und $||Kf_{\gamma}^+ - g||$ verwendet, um den Regularisierungsparameter γ_L zu bestimmen. Die normierte Lösung ist gegeben durch

$$f_{AI} = \frac{f_{\gamma_L}^+}{\int\limits_{\mathcal{S}^2} f_{\gamma_L}^+(\omega) \,\mathrm{d}\omega} \,.$$

• Die KP-Methode stellt nach Konstruktion sicher, dass das Ergebnis nicht-negativ ist. Hier ist es nur nötig, die Summe der Gewichte α_k , k = 1, ..., m(n), auf Eins zu normieren, um eine Wahrscheinlichkeitsdichte zu erhalten. Nach Anwendung der Kernglättung ergibt sich die Lösung als

$$f_{KP} = \frac{1}{c_{\sigma} \sum_{i=1}^{m(n)} \alpha_i} \sum_{k=1}^{m(n)} \alpha_k \exp\left(-\frac{d_{\text{geo}}(\omega, \eta_k)^2}{\sigma^2}\right).$$
(6.4)

Wir wählen in diesem Kapitel $\sigma \approx 0.18$, da dieser Wert für alle später betrachteten Richtungsverteilungen brauchbare Ergebnisse liefert. Wie der Parameter datenabhängig (und ohne Kenntnis der Lösung) optimal gewählt werden kann, bleibt offen. Eine ungünstige Wahl des Parameters kann zu deutlich größeren Fehlern führen.

Bezeichnung Die Anzahl der Indizes k in Formel (6.4), für die α_k ungleich Null ist, wird im Folgenden mit \overline{K} bezeichnet.

Als erstes Testbeispiel wird eine gemischte Watson-Verteilung [16] betrachtet. Die Dichte dieser Verteilung wird als Summe mehrerer Dichten von einfachen Watson-Verteilungen erzeugt. Diese hängen jeweils von zwei Parametern $\mu \in S^2$ und $\kappa \in \mathbb{R}$ ab und sind für $\omega \in S^2$ gegeben durch

$$f_{\mu,\kappa}(\omega) \coloneqq \frac{1}{4\pi \int_0^1 \exp\left(-\kappa t^2\right) \, \mathrm{d}t} \, \exp\left(\kappa \, \langle \mu, \omega \rangle^2\right).$$

Wir betrachten nur den Fall $\kappa > 0$. In diesem Fall handelt es sich bei der einfachen Watson-Verteilung um eine bipolare Verteilung mit Hauptachse μ . Je größer der Wert κ gewählt ist, desto stärker ist die Verteilung um diese Hauptachse konzentriert, wie in Abbildung 6.12 illustriert ist.



Abbildung 6.12: Dichte der einfachen und gemischten Watson-Verteilung.



Die gemischte Watson-Verteilung (Abb. 6.12(c)), die in unseren Tests verwendet wird, ist gegeben durch

$$f^{w}(u) = \sum_{i=1}^{4} f_{\mu_{i},\kappa_{i}}(u)$$
(6.5)

 mit

$$\begin{split} \mu_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1, -1, 0 \end{bmatrix}^T, \quad \kappa_1 = 20, \\ \mu_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1, 1, -1 \end{bmatrix}^T, \quad \kappa_2 = 15, \\ \mu_3 &= \begin{bmatrix} 0, 1, 0 \end{bmatrix}^T, \quad \kappa_3 = 10, \\ \mu_4 &= \frac{1}{\sqrt{1.08}} \quad \begin{bmatrix} 0.2, -0.2, 1 \end{bmatrix}^T, \quad \kappa_4 = 7. \end{split}$$

Eine Realisierung eines Zylinder-Prozesses mit dieser Richtungsverteilung wird in obiger Abbildung gezeigt. Es handelt sich um einen Prozess mit vier Hauptrichtungen μ_1 bis μ_4 , was aus der Realisierung optisch jedoch schwer zu erkennen ist. Die Parameter κ_i legen dabei fest, wie stark die Streuung um die entsprechende Hauptrichtung ist. Die Rekonstruktionen der Approximativen Inversen und der KP-Methode, wobei für beide Rekonstruktionen dieselbe Schätzung der Schnittzahlrose als Daten genutzt wurde, illustriert Abbildung 6.13. Zur besseren Übersicht ist dort der Wertebereich der Farbskala auf Werte zwischen 0 und 0.5 beschränkt, während bei der theoretischen Dichte (Abb. 6.12(c)) der Wertebereich größer gewählt ist. Man kann in Abbildung 6.13(c) anhand der diskreten Lösung der KP-Methode zwar erahnen, wie die gesuchte Dichte aussieht, aber auch hier ist eine nachträgliche Glättung notwendig, um das Ergebnis optisch interpretieren zu können, siehe Abbildung 6.13(d).



Abbildung 6.13: Rekonstruktionen der Watson-Dichte aus der Schnittzahlrose (erste Zeile: Prozess mit Intensität 5000, zweite Zeile: Intensität 1000).

Beide Methoden sind fähig die vier Hauptrichtungen zu rekonstruieren, zudem bleibt das Verhältnis der unterschiedlichen Peakhöhen bei beiden Methoden erhalten. Wird der Regularisierungsparameter im Fall der Approximativen Inversen mit Hilfe des L-Kriteriums gewählt (Abb. 6.13(b) und 6.13(e)), so führt dies zu übermäßig stark geglätteten Rekonstruktionen. Statt der scharfen Peaks der theoretischen Dichte zeigt die Rekonstruktion sanftere Hügel. Wählt man den Regularisierungsparameter optimal, d. h. so, dass der L^2 -Fehler minimal wird, so stimmen die Rekonstruktionen beider Methoden fast überein (Abb. 6.13(f)). Dies liegt insbesondere auch daran, dass die Wahl von σ "zufällig" in der Nähe des optimalen Wertes liegt.

In Tabelle 6.4 sind die L^2 - und L^1 -Fehler der beiden Verfahren im Vergleich zur theoretischen Dichte aufgelistet. Es wurden dazu jeweils 100 Realisierungen verwendet, um die angegebenen Werte zu berechnen. Im Fall der Watson-Verteilung zeigt sich, dass das L-Kriterium nicht sonderlich gut funktioniert und der Regularisierungsparameter meist zu groß gewählt wird, was zu höheren L^2 - und L^1 -Fehlern beim Verfahren der Approximativen Inversen im Vergleich zur KP-Methode führt. Wählt man jedoch den Regularisierungsparameter optimal (dieser Wert liegt insbesondere sehr nahe an der Wahl von σ), so sind die Fehler der beiden Methoden vergleichbar, wobei die KP-Methode bei dieser Richtungsverteilung und Wahl des Parameters σ in den betrachteten Fällen etwas bessere Ergebnisse liefert.

Als zweites Beispiel einer Richtungsverteilung betrachten wir die **Beta-Verteilung** [81], die unter anderem zur Modellierung von gepressten Materialien verwendet wird. Ihre Dichte, welche unabhängig vom Azimutwinkel φ ist, ist in Kugelkoordinaten gegeben durch

$$p_{\beta}(\theta,\varphi) = \frac{\beta}{4\pi \left[1 + (\beta^2 - 1)\left(\cos\theta\right)^2\right]^{3/2}}.$$
(6.6)

Der Parameter β wird Anisotropie-Parameter genannt. Im Fall $\beta = 1$ handelt es sich um die Gleichverteilung auf der Sphäre S^2 . Je größer β gewählt ist, desto mehr tendieren die Zylinder dazu, parallel zur xy-Ebene zu liegen, welche daher auch Materialebene genannt wird. Wir nutzten für unsere Experimente die Werte $\beta = 2$, $\beta = 3$ und $\beta = 4$.



Abbildung 6.14: Dichte der Beta-Verteilung für verschiedene Parameter.

Für $\beta = 4$ ist eine Realisierung eines Zylinder-Prozesses in Abbildung 6.15(a) gezeigt. Die zugehörige Schätzung der Schnittzahlrose ausgewertet an 900 Punkten nimmt für Richtungen nahe am Äquator Werte bis 9700 an, während für Richtungen in Nähe der Pole nur ungefähr 3000 Schnitte gezählt werden.



Abbildung 6.15: Realisierung und Schnittzahlrose der Beta-Verteilung mit $\beta = 4$.

Die Abbildung 6.16 zeigt einige Rekonstruktionen für verschiedene Werte von β , wobei zur Bestimmung der Schnittzahlrose ein Zylinder-Prozess mit Intensität 5000 benutzt wurde. Das Verfahren der Approximativen Inverse liefert in allen drei Fällen gute Ergebnisse und der Einfluss der verschiedenen Werte von β auf die Dichte ist in den Rekonstruktionen deutlich zu erkennen.



Abbildung 6.16: Rekonstruktionen der Dichte der Beta-Verteilung mittels AI.

In Tabelle 6.4 sind die Fehler der beiden Methoden zur theoretischen Dichte für die verschiedenen Richtungsverteilungen zusammengefasst. Zusätzlich wird noch der Fall der Gleichverteilung als Richtungsverteilung (Isotropie) betrachtet. Die Approximative Inverse ist in diesem Falle der KP-Methode deutlich überlegen, da die Gleichverteilung nicht gut durch diskrete Verteilungen approximiert werden kann. Auch im Fall der Beta-Verteilung ist das Verfahren der Approximativen Inversen für die verschiedenen Parameter β meist besser als die KP-Methode, insbesondere bei den Intensitäten 500 oder 1000. Bei Intensität 5000 sind die Ergebnisse vergleichbar, falls das L-Kriterium zur Parameterwahl genutzt wird. Auffällig bei der KP-Methode ist, dass die Anzahl der Gewichte \overline{K} , die in der berechneten diskreten Verteilung ungleich Null sind, mit wachsender Intensität für alle betrachteten Richtungsverteilungen ansteigt. Da die Werte von \overline{K} für alle Verteilungen jedoch sehr ähnlich sind, scheint sich hieraus kein Rückschluss auf die optimale Wahl von σ ziehen zu lassen. Zudem zeigt sich dieses Verhalten bei geschätzter Schnittzahlrosen ausgehend von einem 3D-Bild des Prozesses nicht mehr, wie sich im nächsten Abschnitt herausstellen wird.

		Approximative Inverse			KP-M	KP-Methode($\sigma = 0.18$)		
Dichte	Intensität	γ	L^2 -Fehler	L^1 -F.	\overline{K}	L^2 -F.	L^1 -F.	
	500	0.23(>0.35)	0.119(<0.05)	0.341	156	0.154	0.444	
Gleichv.	1000	0.21(>0.35)	0.108(<0.04)	0.306	203	0.121	0.347	
	5000	0.21(>0.35)	0.048 (< 0.02)	0.137	372	0.062	0.177	
	500	0.30(0.22)	0.244(0.212)	0.517	121	0.182	0.397	
Watson	1000	0.27(0.20)	0.221(0.186)	0.460	159	0.158	0.337	
	5000	0.23(0.18)	0.178(0.148)	0.356	274	0.134	0.265	
β = 2	500	0.25(0.35)	0.102(0.067)	0.289	146	0.151	0.418	
	1000	0.23(0.33)	0.093(0.058)	0.264	192	0.118	0.326	
	5000	0.19(0.27)	0.063(0.041)	0.177	350	0.062	0.173	
β = 3	500	0.27(0.30)	0.112(0.108)	0.304	134	0.151	0.387	
	1000	0.24(0.27)	0.099(0.095)	0.271	176	0.118	0.309	
	5000	0.20(0.22)	0.072(0.070)	0.198	319	0.070	0.186	
β = 4	500	0.28(0.26)	0.154(0.151)	0.383	125	0.159	0.376	
	1000	0.25(0.23)	0.135(0.133)	0.337	163	0.129	0.311	
	5000	0.21(0.19)	0.103(0.100)	0.254	289	0.092	0.223	

Tabelle 6.4: Resultate bei analytischer Zählung der Schnittpunkte, in Klammern die optimalen Werte.

Rekonstruktion aus vervoxelten Daten

Um der Situation mikroskopisch aufgenommener 3D-Bilder nahe zu kommen, wird in diesem Abschnitt die Richtungsverteilung eines Zylinder-Prozesses ausgehend von einem Voxel-Bild geschätzt. Dazu simulierte Herr M. Spiess (Universität Ulm) Zylinder-Prozesse mit Radius 0.005 und den im letzten Abschnitt betrachteten Richtungsverteilungen und Intensitäten. Als Beobachtungsfenster wurde dabei der Einheitswürfel verwendet. Die Realisierungen dieser Zylinder-Prozesse wurden anschließend mit einer Auflösung von 500 pro Einheitsrichtung vervoxelt. Ausgangspunkt zur Schätzung der Schnittzahlrose ist somit ein 3D-Bild mit insgesamt 500³ Einträgen. Diese Auflösung wurde anwendungsorientiert gewählt. So liegen bei realen Datensätzen, welche zum Beispiel mittels Computertomographie gewonnen werden, häufig Bilder mit Auflösungen von dieser Größenordnung vor.

Die Schätzung der Schnittzahlrose aus diesen 3D-Bildern ist allerdings ein schwieriges und fehleranfälliges Unterfangen. So werden beispielsweise Zylinder, die fast parallel zur Schnittebene liegen, manchmal fälschlicherweise mehrfach als Schnitte gezählt. Ist die Richtungsverteilung des Prozesses beispielsweise eine Beta-Verteilung mit großem Parameter β , so liegen die meisten Zylinder fast parallel zur xy-Ebene. Daher ist eine sehr geringe Anzahl Schnitte des Prozesses mit der Ebene e_3^{\perp} im Vergleich zu Schnitten mit Ebenen, deren Normalenvektoren in der xy-Ebene liegen, zu erwarten. Durch den oben genannten Fehler wird die Schnittzahlrose in Richtung e_3 aber deutlich zu hoch ge-

schätzt. Dieser Effekt führt zu deutlich sichtbaren Artefakten in den Rekonstruktionen, welche zudem von der zugrunde liegenden Richtungsverteilung abhängen.

Bisher wurde der folgende Ausweg genutzt, um dieses Problem möglichst gut zu umgehen. Herr M. Spiess skelettiert die Daten mit Hilfe der Software Avizo und schätzt daraus anschließend die Schnittzahlrose. Dies ist bisher die beste uns bekannte Möglichkeit, die Schnittzahlrose aus 3D-Bildern zu schätzen. Jedoch führt auch diese zu erkennbaren Fehlern bei der Schätzung der Schnittzahlrose.

Offensichtlich ist es bei diesem Vorgehen auch möglich, aus der berechneten Skelettierung selbst, die Richtungsverteilung zu schätzen. An dieser Stelle gehen wir auf diese Möglichkeit allerdings nicht ein, da die Schnittzahlrose auch auf andere Weise geschätzt werden könnte. In [60] wurde zudem gezeigt, dass die Schätzung der Richtungsverteilung aus der Skelettierung mit Hilfe eines Kernschätzers dieselben Artefakte aufzeigt, wie die Rekonstruktion aus der auf diese Weise gewonnenen Schätzung der Schnittzahlrose.

Abbildung 6.17 zeigt Rekonstruktionen der Dichte einer Beta-Verteilung ($\beta = 3$). Bei beiden Methoden ist der Wert der Dichte in Richtung der Winkelhalbierenden sichtbar zu hoch. Diese Artefakte sind in der fehlerhaften Schätzung der Schnittzahlrose begründet. Für beide Methoden ist es daher sinnvoll, entweder von anderen Daten z. B. Schnittbildern des Materials auszugehen oder die Schätzung der Schnittzahlrose aus 3D-Bildern zu verbessern.



Abbildung 6.17: Rekonstruktion der Dichte der Beta-Verteilung aus vervoxelten Daten.

In Tabelle 6.5 sind die L^1 - sowie L^2 -Fehler bei dieser Datenlage zu finden. Die Ergebnisse beider Methoden sind vergleichbar, der Fehler unterscheidet sich lediglich in der dritten Nachkommastelle. Allerdings benötigt die KP-Methode bei diesen Datensätze jeweils über 600 Sekunden und somit hundertmal länger als die Methode der Approximativen Inverse. Bei Intensität 5000 ist die Anzahl an Fasern im Beobachtungsfenster sehr hoch, so dass es nicht mehr möglich ist, die Fasern voneinander zu unterscheiden. Dies führt zu sehr schlechten Skelettierungsergebnissen und daraus resultierenden stark verfälschten Schnittzahlrosen. Daher sind die Fehler zur theoretischen Dichte in diesem Fall auch deutlich größer als bei Intensität 1000. Bei den Intensitäten 500 und 1000 führt der vorgestellte Ansatz zu guten Ergebnissen, abgesehen von den eben genannten Artefakten. Bei der KP-Methode fällt im Vergleich zum vorherigen Abschnitt auf, dass der Wert von \overline{K} bei allen Richtungsverteilungen und Intensitäten ungefähr 880 beträgt, sich also nicht mehr mit unterschiedlicher Intensität verändert.

		Approximative Inverse			KP-Me	KP-Methode ($\sigma = 0.18$)		
Dichte	Intensität	γ	L^2 -Fehler	L^1 -F.	\overline{K}	L^2 -F.	L^1 -F.	
Watson	500	0.19(0.18)	0.187(0.183)	0.414	880	0.179	0.398	
	1000	0.19(0.18)	0.201(0.197)	0.454	881	0.194	0.441	
	5000	0.19(0.18)	0.296(0.294)	0.707	884	0.292	0.700	
	500	0.18(0.25)	0.074(0.061)	0.209	876	0.068	0.186	
β = 2	1000	0.18(0.23)	0.073(0.064)	0.211	878	0.066	0.187	
	5000	0.19(0.22)	0.110(0.109)	0.344	884	0.109	0.342	
β = 3	500	0.18(0.19)	0.097(0.094)	0.258	878	0.093	0.239	
	1000	0.18(0.19)	0.105(0.102)	0.287	881	0.099	0.266	
	5000	0.19(0.19)	0.173(0.173)	0.508	885	0.171	0.505	
$\beta = 4$	500	0.19(0.19)	0.132(0.131)	0.321	881	0.127	0.306	
	1000	0.19(0.18)	0.142(0.142)	0.357	883	0.138	0.342	
	5000	0.18(0.19)	0.228(0.228)	0.623	885	0.226	0.619	

Tabelle 6.5: L^1 - und L^2 -Fehler bei geschätzter Schnittzahlrose aus vervoxelten Daten, in Klammern die optimalen Werte.

6.4 Anwendung auf reale Datensätze

Wir wenden das hergeleitete Verfahren nun auf reale CT-Daten von zwei verschiedenen Materialien an. Die verwendeten Datensätze wurden freundlicherweise vom Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) in Kaiserslautern zur Verfügung gestellt. In einem gemeinsamen Preprint [4] werden neben simulierten, dieselben Datensätze dazu verwendet, um verschiedene Verfahren zur Schätzung der Richtungsverteilung ausgehend von 3D-Bildern zu vergleichen.

Als erstes Beispiel untersuchen wir einen Faserfilz aus dicken Fasern, der von der Firma Heimbach hergestellt wurde. Dieses Material findet Verwendung in der Papierentwässerung. Die Auflösung des für die Untersuchung zur Verfügung stehenden Bildes beträgt 500^3 Voxel. Der zweite Datensatz, der ebenfalls diese Auflösung aufweist, zeigt einen faserverstärkter Beton, der an der TU Kaiserslautern hergestellt wurde. Beide 3D-Bilder wurden zunächst von Herrn O. Wirjadi [98, 99] (ITWM Kaiserslautern) binarisiert. Anschließend wurde die Schnittzahlrose von Herrn M. Spiess (Universität Ulm) mittels der Software Avizo aus diesen Daten geschätzt. In Abbildung 6.18 sind in der ersten Zeile die Rekonstruktionen mit Hilfe der Approximativen Inversen, und in der zweiten Zeile die entsprechenden Ergebnisse der KP-Methode mit anschließender Glättung dargestellt.



Abbildung 6.18: Rekonstruktionen aus realen Daten.

Beide Verfahren führen zu ähnlichen Ergebnissen, wobei die Rekonstruktion mit Hilfe der Approximativen Inverse leichte Schwingungen aufweist, während das Ergebnis der KP-Methode sehr glatt ist. Für den Faserfilz zeigen beide Methoden, dass alle Fasern in Richtung der *y*-Achse angeordnet sind und nur wenig von dieser Hauptrichtung abweichen. Die Anzahl der diskreten Richtungen mit positivem Gewicht beträgt $\overline{K} = 861$ bei der KP-Methode. Im Falle des verstärkten Betons erkennt man ebenfalls eine Hauptrichtung, ungefähr in Richtung $\frac{1}{\sqrt{2}}[0, -1, 1]$. Daneben existieren zwei weitere Nebenrichtungen, eine von der Hauptrichtung in Richtung der *y*-Achse und eine etwas entferntere in der Nähe des Nordpols. Dies sind vermutlich die Verstärkungen im Beton. Bei der KP-Methode werden in diesem Fall $\overline{K} = 876$ diskrete Richtungen mit positivem Gewicht rekonstruiert.

Die Resultate der KP-Methode und der Approximativen Inversen weisen für diese Datensätze eine große Ähnlichkeit auf und enthalten dieselben Informationen. Während die Approximative Inverse im Rekonstruktionsschritt jedoch nicht einmal 6 Sekunden inklusive der automatischen Wahl des Regularisierungsparameters pro Datensatz benötigt, liegt die Rechenzeit der KP-Methode bei rund 600 Sekunden. Das Verfahren von Kiderlen und Pfrang ist in diesen Tests somit hundertmal langsamer, was insbesondere bei der Untersuchung einer großen Anzahl von Datensätzen ein entscheidender Nachteil ist. Zudem könnte die datenunabhängige Festlegung des Parameters σ das Ergebnis der KP-Methode verfälschen, zum Beispiel wenn die Fasern isotrop im Material angeordnet sind.

Anhang A

Anhang A.1 Numerischer Test zur Abel'schen Integralgleichung

In diesem Abschnitt wird die Inversionsformel (5.7) aus Abschnitt 5.1

$$f_{\gamma}(x) = \int_{0}^{1} g(t)\tilde{\psi}_{\gamma}(x,t) dt + \begin{cases} g(0) \frac{(x-\gamma)^{2}}{\gamma^{2}}, & x < \gamma \\ \tilde{f}(1) \frac{(1-x-\gamma)^{2}}{\gamma^{2}}, & x + \gamma > 1 \end{cases}$$

numerisch getestet, wobei die Trapezregel als Quadraturmethode verwendet wird. Wir gehen für unseren numerischen Test davon aus, dass der exakte Wert f(1) a-priori bekannt ist (siehe hierzu die Bemerkung im Abschnitt 5.2). Um das hergeleitete Verfahren zu testen, berechnen wir die Abeltransformation von

$$f(x) = \cos(15x) + 1$$

numerisch und rekonstruieren anschließend sowohl aus exakten als auch aus gestörten Daten. Abbildung A.1 zeigt die Ergebnisse, wobei nur 100 Datenpunkte für die Rekonstruktion verwendet wurden. Sowohl für exakte als auch für gestörte Daten liefert das Verfahren gute Ergebnisse. Auch an den Rändern des Intervalls [0,1] stimmen die Rekonstruktionen wie gewünscht mit der Originalfunktion fast überein, statt dort "wegzuknicken".



Abbildung A.1: Lösung der Abel'schen Integralgleichung (5.1) mittels AI ($\gamma = 0.05$).

Anhang A.2 Beweise zum Abschnitt 4.4

Nun werden die ausgelagerten Beweise des Abschnitts 4.4 nachgeholt. Zur besseren Übersicht werden die entsprechenden Lemmata erneut aufgeführt.

Lemma 4.8 (Datenfehlerabschätzung)

Seien $e_{\gamma} \in C_e^{2l}[-1,1], \gamma > 0, l \in \mathbb{N}$ mit $2\pi ||e_{\gamma}||_{L^1[-1,1]} = 1$ und $f \in L^2(\mathcal{S}^2)$. Dann existient eine Konstante $\tilde{c} = \tilde{c}(e_{\gamma})$ mit

$$||e_{\gamma} * f||_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \leq \tilde{c} ||f||_{H^{-2l}(\mathcal{S}^{2})}.$$

Beweis. Für eine Funktion $f \in L^2[-1,1]$ gilt nach Lemma 1.16

$$\lim_{N \to \infty} \left\| f - \sum_{n=0}^{N} \frac{2n+1}{4\pi} (L_n f) P_n \right\|_{L^2([-1,1])} = 0$$

mit den Legendre-Koeffizienten

$$L_n f = 2\pi \langle f, P_n \rangle_{L^2[-1,1]}, \qquad n \in \mathbb{N}.$$
(A.1)

Diese Identität ist äquivalent zur Parseval'schen Gleichung (Lemma 1.12)

$$\|f\|_{L^{2}[-1,1]}^{2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \left(L_{n}f\right)^{2}.$$

Nutzt man Polarkoordinaten (1.4), so wird der Anteil des Laplace-Beltrami Operators, der unabhängig vom Azimutwinkel ist, beschrieben durch

$$D_t = \frac{\partial}{\partial t} \left(1 - t^2 \right) \frac{\partial}{\partial t} = -2t \frac{\partial}{\partial t} + \left(1 - t^2 \right) \frac{\partial^2}{\partial t^2},$$

wie man aus (1.9) ablesen kann. Für diesen Operator erfüllen die Legendre-Polynome nach (1.12) für alle $t \in [-1, 1]$ die Eigenschaft

$$D_t P_n(t) = -n(n+1)P_n(t).$$

Wegen

$$\int_{-1}^{1} D_{t}f(t) g(t) dt = -2 \int_{-1}^{1} t f'(t) g(t) dt + \int_{-1}^{1} (1 - t^{2}) f''(t) g(t) dt$$

$$= -2 \int_{-1}^{1} t f'(t) g(t) dt + \left[(1 - t^{2}) g(t) f'(t) \right]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} f'(t) ((1 - t^{2}) g'(t) - 2t g(t)) dt$$

$$= -\int_{-1}^{1} f'(t) (1 - t^{2}) g'(t) dt$$

$$= \int_{-1}^{1} f(t) D_{t}g(t) dt$$

ist der Operator D_t selbstadjungiert bezüglich des L^2 -Skalarproduktes über [-1,1]. Daher gilt für eine Funktion $f \in C^{2l}[-1,1]$

$$L_n(D_t^l f) = 2\pi \int_{-1}^1 D_t^l f(t) P_n(t) dt$$

= $2\pi \int_{-1}^1 f(t) D_t^l P_n(t) dt$
= $2\pi (-1)^l n^l (n+1)^l \int_{-1}^1 f(t) P_n(t) dt$
= $n^l (-1)^l (n+1)^l (L_n f)$.

Hieraus folgt für festes $l \in \mathbb{N}$

$$\infty > 2^{2l-1} \|D_t^l f\|_{L^2[-1,1]}^2$$

$$= 2^{2l-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \left(L_n D_t^l g \right)^2$$

$$= (4\pi)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} 2^{2l-1} (2n+1)n^{2l} (n+1)^{2l} (L_n f)^2$$

$$\ge (4\pi)^{-1} \max_{n\ge 0} \left\{ \left(2n^2 \right)^{2l} (L_n f)^2 \right\}$$

$$\ge (4\pi)^{-1} \max_{n\ge 1} \left\{ \left(n^2 + 1 \right)^{2l} (L_n f)^2 \right\},$$
(A.2)

da alle auftretenden Summanden positiv sind. Mit dem Funk-Hecke-Theorem (Satz 1.7) gilt für die Kugelflächenfunktion Y_{nk} :

$$\langle e_{\gamma} * f, Y_{nk} \rangle_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} = \int_{\mathcal{S}^{2}} \int_{\mathcal{S}^{2}} e_{\gamma}(\langle x, y \rangle) f(y) \, \mathrm{d}y \, Y_{nk}(x) \, \mathrm{d}x$$
$$= \int_{\mathcal{S}^{2}} \int_{\mathcal{S}^{2}} e_{\gamma}(\langle x, y \rangle) Y_{nk}(x) \, \mathrm{d}x f(y) \, \mathrm{d}y$$
$$= \int_{\mathcal{S}^{2}} 2\pi \, (L_{n}e_{\gamma}) Y_{nk}(y) f(y) \, \mathrm{d}y$$
$$= 2\pi \, (L_{n}e_{\gamma}) \, \langle f, Y_{nk} \rangle_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} \, .$$

Mit der Hölder-Ungleichung erhalten wir hieraus schließlich

$$\begin{aligned} \|e_{\gamma} * f\|_{L^{2}(S^{2})}^{2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=-n}^{n} \langle e_{\gamma} * f, Y_{nk} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2} \\ &= 4\pi^{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left((L_{n}e_{\gamma})^{2} \left(n^{2}+1\right)^{2l} \left(n^{2}+1\right)^{-2l} \sum_{k=-n}^{n} \langle f, Y_{nk} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2} \right) \\ &\leq \tilde{c}(e_{\gamma}) \sum_{n=0}^{\infty} \left(n^{2}+1\right)^{-2l} \sum_{k=-n}^{n} \langle f, Y_{nk} \rangle_{L^{2}(S^{2})}^{2} \\ &\leq \tilde{c}(e_{\gamma}) \|f\|_{H^{-2l}(S^{2})} \end{aligned}$$

mit $\tilde{c}(e_{\gamma}) = 4\pi^2 \max_{n \ge 0} \left\{ \left(n^2 + 1 \right)^{2l} \left(L_n e_{\gamma} \right)^2 \right\}$. Da für alle $\gamma > 0$ $e_{\gamma} \in C_{\mathrm{e}}^{2l}$ gilt, folgt aus (A.2):

 $\tilde{c}(e_{\gamma}) \leq \max\left\{2^{2l+3}\pi^{3} \|D_{t}^{l}e_{\gamma}\|_{L^{2}[-1,1]}^{2}, 4\pi^{2}\right\} < \infty,$

wobei für n = 0 die Ungleichung $L_0 e_{\gamma} \leq 2\pi \|e_{\gamma}\|_{L^1[-1,1]} = 1$ verwendet wurde. Somit ist die Aussage von Lemma 4.8 gezeigt.

Lemma 4.9 (Approximationsfehler)

Sei e_{γ} eine gerade, stetige, nicht-negative Funktion mit $2\pi ||e_{\gamma}||_{L^{1}[-1,1]} = 1$. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

a) $\lim_{\gamma \to 0} \|e_{\gamma} * f - f\|_{L^{2}(\mathcal{S}^{2})} = 0, \qquad \forall f \in L^{2}_{e}(\mathcal{S}^{2}).$ b) $\lim_{\gamma \to 0} (L_{2n}e_{\gamma}) = 1, \qquad \forall n \in \mathbb{N}.$

c)
$$\lim_{\gamma \to 0} \int_{0}^{\rho} e_{\gamma}(t) dt = 0, \qquad \forall \rho \in [0, 1).$$

Beweis. Die Äquivalenz der beiden Aussagen a) und b) kann analog zum Beweis von Theorem 3.2 in [64] gezeigt werden. Der Rest des Beweises folgt Ideen aus [19].

b)
$$\Rightarrow$$
 c):

Da der Mollifier e_{γ} eine gerade und nicht-negative Funktion ist, gilt unter Beachtung von $P_2(t) = \frac{1}{2} (3t^2 - 1)$ die folgende Ungleichung:

$$\begin{split} 0 &\leq \int_{0}^{\rho} e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t = \frac{1}{2} \int_{-\rho}^{\rho} e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t \\ &\leq \frac{1}{3(1-\rho^{2})} \int_{-\rho}^{\rho} \frac{3}{2} \left(1-t^{2}\right) e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t \\ &\leq \frac{1}{3(1-\rho^{2})} \int_{-1}^{1} \left[1-\frac{1}{2} \left(3t^{2}-1\right)\right] e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t \\ &\leq \frac{L_{0}e_{\gamma}-L_{2}e_{\gamma}}{6\pi \left(1-\rho^{2}\right)} \, . \end{split}$$

Die rechte Seite konvergiert wegen b) gegen 0, was die Aussage c) impliziert.

c) \Rightarrow b):

Wir zeigen, dass für alle $\varepsilon > 0$ und $n \in \mathbb{N}$ die folgende Abschätzung gilt:

$$1 - \varepsilon \le \lim_{\gamma \to 0} L_{2n} e_{\gamma} \le 1 \,.$$

Die obere Schranke $L_{2n}e_{\gamma} \leq 1$ ist aufgrund der Abschätzung $|P_n(t)| \leq 1$ für alle $t \in [-1, 1]$ offensichtlich. Andererseits existiert wegen $P_{2n}(1) = 1$ ein $\delta \in (0, 1)$ mit

$$P_{2n}(t) \ge \sqrt{1 - \frac{\varepsilon}{2}} \quad \text{für} \quad t \in (\delta, 1].$$
(A.3)
Mit ρ = δ impliziert Bedingung c) die Ungleichung

$$\left|4\pi \int_{0}^{\delta} e_{\gamma}(t) dt\right| \leq \frac{\varepsilon}{2}, \qquad \text{für alle } \gamma \leq \gamma_{1}.$$

Daraus erhalten wir, da $|P_{2n}(t)| \leq 1$ für alle $t < \delta < 1$ gilt, die Abschätzung:

$$4\pi \int_{0}^{\delta} e_{\gamma}(t) P_{2n}(t) dt \ge -4\pi \int_{0}^{\delta} e_{\gamma}(t) dt \ge -\frac{\varepsilon}{2} \qquad \text{für alle } \gamma \le \gamma_{1} \,. \tag{A.4}$$

Aus Bedingung c) folgt andererseits

$$1 = 2\pi \lim_{\gamma \to 0} \int_{-1}^{1} e_{\gamma}(t) dt = 4\pi \lim_{\gamma \to 0} \int_{\delta}^{1} e_{\gamma}(t) dt$$

und für alle $\gamma \leq \gamma_2$ gilt daher

$$4\pi \int_{\delta}^{1} e_{\gamma}(t) \, \mathrm{d}t \ge \sqrt{1 - \frac{\varepsilon}{2}} \,. \tag{A.5}$$

Insgesamt folgt für $\gamma \leq \min\{\gamma_1, \gamma_2\}$:

$$L_{2n}e_{\gamma} = 4\pi \left(\int_{0}^{\delta} e_{\gamma}(t)P_{2n}(t) dt + \int_{\delta}^{1} e_{\gamma}(t)P_{2n}(t) dt \right)$$
(Definition)

$$\geq 4\pi \left(\int_{0}^{\delta} e_{\gamma}(t)P_{2n}(t) dt + \sqrt{1 - \frac{\varepsilon}{2}} \int_{\delta}^{1} e_{\gamma}(t) dt \right)$$
(Ungleichung (A.3))

$$\geq -\frac{\varepsilon}{2} + 1 - \frac{\varepsilon}{2}$$
(Abschätzungen (A.4) und (A.5))

$$\geq 1 - \varepsilon.$$

Literaturverzeichnis

- M. ABRAMOWITZ AND I. A. STEGUN, eds., Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, Dover Publications Inc., New York, 1992.
- [2] R. A. ADAMS, Sobolev spaces, Academic Press, New York, 1975.
- [3] H. ALTENDORF AND D. JEULIN, 3D directional mathematical morphology for analysis of fiber orientations, Image Analysis & Stereology, 28 (2009), pp. 143–153.
- [4] H. ALTENDORF, C. REDENBACH, M. RIPLINGER, K. SANDAU, M. SPIESS, AND O. WIRJADI, *Directional analysis of fiber systems using 3d image data*, Preprint, (2011).
- [5] Y. E. ANIKONOV, Multidimensional inverse and ill-posed problems for differential equations, Inverse and Ill-posed Problems Series, VSP, Utrecht, 1995.
- [6] N. ARONSZAJN, *Theory of reproducing kernels*, Transactions of the American Mathematical Society, 68 (1950), pp. 337–404.
- [7] A. BADDELEY AND E. B. V. JENSEN, Stereology for statisticians, vol. 103 of Monographs on Statistics and Applied Probability, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2005.
- [8] V. BENEŠ AND J. RATAJ, Stochastic geometry: selected topics, Kluwer Academic Publishers, Boston, 2004.
- [9] V. BENEŠ AND I. SAX, Stereological estimation of the rose of directions from the rose of intersections, in Recent advances in applied probability, Springer, New York, 2005, pp. 65–96.
- [10] W. BLASCHKE, Kreis und Kugel, Walter de Gruyter & Co., Berlin, 1956.
- [11] S. CAMPI, On the reconstruction of a function on a sphere by its integrals over great circles, Bollettino Unione Matematica Italiana C(5), 18 (1981), pp. 195–215.
- [12] H. S. M. COXETER, *Regular polytopes*, The Macmillan Co., New York, second ed., 1963.
- [13] G. DAHLQUIST AND Å. BJÖRCK, Numerical methods in scientific computing. Vol. I, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, 2008.
- [14] N. FERNANDEZ, Polynomial bases on the sphere, in Advanced problems in constructive approximation, vol. 142, Birkhäuser Verlag, 2003, pp. 39–52.

- [15] —, Localized polynomial bases on the sphere, Electronic Transactions on Numerical Analysis, 19 (2005), pp. 84–93.
- [16] N. I. FISHER, T. LEWIS, AND B. J. J. EMBLETON, Statistical analysis of spherical data, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [17] J. FLIEGE AND U. MAIER, The distribution of points on the sphere and corresponding cubature formulae, IMA Journal of Numerical Analysis, 19 (1999), pp. 317– 334.
- [18] W. FREEDEN, Multiscale modelling of spaceborne geodata, European Consortium for Mathematics in Industry, B. G. Teubner, Stuttgart, 1999.
- [19] W. FREEDEN AND M. SCHREINER, Spherical Functions of Mathematical Geosciences: A Scalar, Vectorial, and Tensorial Setup, Springer Verlag, Berlin, 2008.
- [20] P. FUNK, Über Flächen mit lauter geschlossenen geodätischen Linien, Mathematische Annalen, 74 (1913), pp. 278–300.
- [21] R. J. GARDNER, *Geometric tomography*, vol. 58 of Encyclopedia of Mathematics and its Applications, Cambridge University Press, Cambridge, second ed., 2006.
- [22] R. J. GARDNER, M. KIDERLEN, AND P. MILANFAR, Convergence of algorithms for reconstructing convex bodies and directional measures, The Annals of Statistics, 34 (2006), pp. 1331–1374.
- [23] P. GOODEY AND W. WEIL, Centrally symmetric convex bodies and the spherical Radon transform, Journal of Differential Geometry, 35 (1992), pp. 675–688.
- [24] R. GORENFLO AND S. VESSELLA, Abel integral equations, vol. 1461 of Lecture Notes in Mathematics, Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [25] I. S. GRADSHTEYN AND I. M. RYZHIK, Table of integrals, series, and products, Elsevier/Academic Press, Amsterdam, seventh ed., 2007.
- [26] H. GROEMER, Geometric applications of Fourier series and spherical harmonics, vol. 61 of Encyclopedia of Mathematics and its Applications, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [27] A. GROH, J. KREBS, AND M. WAGNER, Efficient solution of an inverse problem in cell population dynamics, Inverse Problems, 27 065009 (2011).
- [28] B. HAHN AND A. K. LOUIS, Reconstruction in the three-dimensional parallel scanning geometry with application in synchrotron-based x-ray tomography, preprint, (2011).
- [29] M. HANKE, Limitations of the L-curve method in ill-posed problems, BIT Numerical Mathematics, 36 (1996), pp. 287–301.
- [30] P. C. HANSEN, Regularization tools: a Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems, Numerical Algorithms, 6 (1994), pp. 1–35.
- [31] —, The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems, in Computational Inverse Problems in Electrocardiology, vol. 5, WIT Press, Southampton, 2001, pp. 119–142.

- [32] P. C. HANSEN AND D. P. O'LEARY, The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems, SIAM Journal on Scientific Computing, 14 (1993), pp. 1487–1503.
- [33] R. H. HARDIN AND N. J. A. SLOANE, McLaren's improved snub cube and other new spherical designs in three dimensions, Discrete & Computational Geometry, 15 (1996), pp. 429–441.
- [34] S. HELGASON, The Radon transform, vol. 5 of Progress in Mathematics, Birkhäuser, Boston, second ed., 1999.
- [35] —, *Geometric analysis on symmetric spaces*, vol. 39 of Mathematical Surveys and Monographs, American Mathematical Society, Providence, second ed., 2008.
- [36] K. HESSE, A lower bound for the worst-case cubature error on spheres of arbitrary dimension, Numerische Mathematik, 103 (2006), pp. 413–433.
- [37] K. HESSE AND I. H. SLOAN, Optimal lower bounds for cubature error on the sphere S², Journal of Complexity, 21 (2005), pp. 790–803.
- [38] —, Optimal order integration on the sphere, in Frontiers and prospects of contemporary applied mathematics, vol. 6, Higher Ed. Press, Beijing, 2005, pp. 59–70.
- [39] L. M. HOFFMANN, Estimating an even spherical measure from its sine transform, Applications of Mathematics, 54 (2009), pp. 67–78.
- [40] P. JONAS AND A. K. LOUIS, A Sobolev space analysis of linear regularization methods for ill-posed problems, Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 9 (2001), pp. 59–74.
- [41] M. KIDERLEN, Non-parametric estimation of the directional distribution of stationary line and fibre processes, Advances in Applied Probability, 33 (2001), pp. 6–24.
- [42] M. KIDERLEN AND A. PFRANG, Algorithms to estimate the rose of directions of a spatial fibre system, Journal of Microscopy, 219 (2005), pp. 50–60.
- [43] H. KOHR AND A. K. LOUIS, Fast and high-quality reconstruction in electron tomography based on an enhanced linear forward model, Inverse Problems, 27 045008 (2011).
- [44] M. KRAUSE, J. HAUSHERR, B. BURGETH, C. HERRMANN, AND W. KRENKEL, Determination of the fibre orientation in composites using the structure tensor and local x-ray transform, Journal of Materials Science, 45 (2010), pp. 888–896.
- [45] M. KRAUSE, J. HAUSHERR, AND W. KRENKEL, Computing the fibre orientation from radon data using local radon transform, Inverse Problems and Imaging, 5 (2011), pp. 879–891.
- [46] J. KREBS, Lösungsmethoden und Fehlerabschätzungen für semi-diskrete inverse Probleme, PhD thesis, Universität des Saarlandes, 2010.
- [47] A. LAKHAL AND A. K. LOUIS, Locating radiating sources for Maxwell's equations using the approximate inverse, Inverse Problems, 24 045020 (2008).

- [48] Q. LE GIA, Multivariate approximation on spheres, a reproducing kernel approach, Bachelor thesis, (1998).
- [49] M. LIKHT, Calculation of functionals on the solutions of linear equations of the first kind, USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 7(3) (1967), pp. 271–278.
- [50] A. K. LOUIS, Ghosts in tomography: the null space of the Radon transform, Mathematical Methods in the Applied Sciences, 3 (1981), pp. 1–10.
- [51] —, Nonuniqueness in inverse Radon problems: the frequency distribution of the ghosts, Mathematische Zeitschrift, 185 (1984), pp. 429–440.
- [52] —, Inverse und schlecht gestellte Probleme, Teubner Studienbücher Mathematik,
 B. G. Teubner, Stuttgart, 1989.
- [53] —, Approximate inverse for linear and some nonlinear problems, Inverse Problems, 11 (1996), pp. 1211–1223.
- [54] —, Constructing an approximate inverse for linear and some nonlinear problems in engeneering, in Inverse problems in engineering- Theory and Practice, 1998.
- [55] —, A unified approach to regularization methods for linear ill-posed problems, Inverse Problems, 15 (1999), pp. 489–498.
- [56] —, Development of algorithms in computerized tomography, in The Radon transform, inverse problems, and tomography, vol. 63 of Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, American Mathematical Society, Providence, 2006, pp. 25– 42.
- [57] —, Combining image reconstruction and image analysis with an application to two-dimensional tomography, SIAM Journal on Imaging Sciences, 1 (2008), pp. 188–208.
- [58] —, Feature reconstruction in inverse problems, Inverse Problems, 27 065010 (2011).
- [59] A. K. LOUIS AND P. MAASS, A mollifier method for linear operator equations of the first kind, Inverse Problems, 6 (1990), pp. 427–440.
- [60] A. K. LOUIS, M. RIPLINGER, M. SPIESS, AND E. SPODAREV, Inversion algorithms for the spherical radon and cosine transform, Inverse Problems, 27 035015 (2011).
- [61] G. MATHERON, Random sets and integral geometry, John Wiley & Sons, New York, 1975.
- [62] J. MECKE, Formulas for stationary planar fibre processes III. Intersections with fibre systems, Statistics: A Journal of Theoretical and Applied Statistics, 12 (1981), pp. 201–210.
- [63] J. MECKE AND W. NAGEL, Stationäre räumliche Faserprozesse und ihre Schnittzahlrosen, Elektronische Informationsverarbeitung und Kybernetik, 16 (1980), pp. 475–483.

- [64] V. A. MENEGATTO, Approximation by spherical convolution, Numerical Functional Analysis and Optimization, 18 (1997), pp. 995–1012.
- [65] M. MORIMOTO, Analytic functionals on the sphere, vol. 178 of Translations of Mathematical Monographs, American Mathematical Society, Providence, 1998.
- [66] C. MÜLLER, Spherical harmonics, vol. 17 of Lecture Notes in Mathematics, Springer Verlag, Berlin, 1966.
- [67] F. NARCOWICH AND J. WARD, Scattered data interpolation on spheres: error estimates and locally supported basis functions, SIAM journal on mathematical analysis, 33 (2002), pp. 1393–1410.
- [68] F. NATTERER, The mathematics of computerized tomography, vol. 32 of Classics in Applied Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2001.
- [69] J. OHSER AND K. SCHLADITZ, 3D Images of Materials Structures: Processing and Analysis., Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [70] J. PRESTIN AND D. ROSCA, On some cubature formulas on the sphere, Journal of Approximation Theory, 142 (2006), pp. 1–19.
- [71] E. T. QUINTO, A. RIEDER, AND T. SCHUSTER, Local inversion of the sonar transform regularized by the approximate inverse, Inverse Problems, 27 035006 (2011).
- [72] M. REIMER, Spherical polynomial approximations: a survey, in Advances in multivariate approximation, vol. 107 of Math. Res., Wiley-VCH, Berlin, 1999, pp. 231– 252.
- [73] —, Multivariate polynomial approximation, vol. 144 of International Series of Numerical Mathematics, Birkhäuser Verlag, Basel, 2003.
- [74] A. RIEDER, Keine Probleme mit inversen Problemen, Vieweg+Teubner Verlag, Braunschweig, 2003.
- [75] M. RIPLINGER AND M. SPIESS, Asymptotic properties of the approximate inverse estimator for directional distributions, preprint, (2011).
- [76] K. ROBB, O. WIRJADI, AND K. SCHLADITZ, Fiber orientation estimation from 3d image data: Practical algorithms, visualization, and interpretation, Hybrid Intelligent Systems, 7th Conference on, (2007), pp. 320–325.
- [77] B. RUBIN, Inversion formulas for the spherical Radon transform and the generalized cosine transform, Advances in Applied Mathematics, 29 (2002), pp. 471–497.
- [78] —, Notes on Radon transforms in integral geometry, Fractional Calculus & Applied Analysis. An International Journal for Theory and Applications, 6 (2003), pp. 25–72.
- [79] K. SANDAU AND J. OHSER, Chord length transform and segmentation of crossing fibers, Journal of Microscopy, 226 (2007), pp. 43–53.

- [80] K. SCHLADITZ, Estimation of the intensity of stationary flat processes, Advances in Applied Probability, 32 (2000), pp. 114–139.
- [81] K. SCHLADITZ, S. PETERS, D. REINEL-BITZER, A. WIEGMANN, AND J. OHSER, Design of acoustic trim based on geometric modeling and flow simulation for nonwoven, Computational Materials Science, 38 (2006), pp. 56–66.
- [82] R. SCHNEIDER, Geometric inequalities for Poisson processes of convex bodies and cylinders, Results in Mathematics, 11 (1987), pp. 165–185.
- [83] R. SCHNEIDER AND W. WEIL, *Stochastic and integral geometry*, Probability and its Applications, Springer Verlag, Berlin, 2008.
- [84] T. SCHUSTER, The method of approximate inverse: theory and applications, vol. 1906 of Lecture Notes in Mathematics, Springer Verlag, Berlin, 2007.
- [85] T. SCHUSTER AND E. T. QUINTO, On a regularization scheme for linear operators in distribution spaces with an application to the spherical Radon transform, SIAM Journal on Applied Mathematics, 65 (2005), pp. 1369–1387.
- [86] R. T. SEELEY, Spherical harmonics, The American Mathematical Monthly, 73 (1966), pp. 115–121.
- [87] I. H. SLOAN AND R. S. WOMERSLEY, Constructive polynomial approximation on the sphere, Journal of Approximation Theory, 103 (2000), pp. 91–118.
- [88] —, Extremal systems of points and numerical integration on the sphere, Advances in Computational Mathematics, 21 (2004), pp. 107–125.
- [89] M. SPIESS AND E. SPODAREV, Anisotropic Poisson processes of cylinders, Methodology and Computing in Applied Probability, 13 (2010), pp. 1–19.
- [90] E. SPODAREV, On the rose of intersections of stationary flat processes, Advances in Applied Probability, 33 (2001), pp. 584–599.
- [91] D. STOYAN, W. S. KENDALL, AND J. MECKE, Stochastic Geometry and its Applications, 2nd Edition, John Wiley & Sons, New York, second ed., 2008.
- [92] R. S. STRICHARTZ, L^p estimates for Radon transforms in Euclidean and non-Euclidean spaces, Duke Mathematical Journal, 48 (1981), pp. 699–727.
- [93] A. H. STROUD AND D. SECREST, Gaussian quadrature formulas, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1966.
- [94] N. THORSTENSEN AND O. SCHERZER, Convergence of variational regularization methods for imaging on riemannian manifolds, preprint, (2011).
- [95] C. R. VOGEL, Non-convergence of the L-curve regularization parameter selection method, Inverse Problems, 12 (1996), pp. 535–547.
- [96] W. WEIL, Point processes of cylinders, particles and flats, Acta Applicandae Mathematicae, 9 (1987), pp. 103–136.
- [97] H. WENDLAND, Scattered data approximation, vol. 17 of Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.

- [98] O. WIRJADI, Models and Algorithms for Image-Based Analysis of Microstructures, PhD thesis, Technische Universität Kaiserslautern, 2009.
- [99] O. WIRJADI, K. SCHLADITZ, A. RACK, AND T. BREUEL, Applications of anisotropic image filters for computing 2d and 3d-fiber orientations, in European Congress of Stereology and Image Analysis, North America, 2008.
- [100] R. S. WOMERSLEY AND I. H. SLOAN, How good can polynomial interpolation on the sphere be?, Advances in Computational Mathematics, 14 (2001), pp. 195–226.
- [101] C. E. YARMAN AND B. YAZICI, Inversion of the circular averages transform using the Funk transform, Inverse Problems, 27 065001 (2011).