
**Eine modifizierte algebraische Rekonstruktionstechnik
zur Bestimmung des komplexen Brechungsindex in der
THz-Tomographie**

Dissertation

zur Erlangung des Grades des
Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Informatik
der Universität des Saarlandes

vorgelegt von

Jens Tepe

Saarbrücken

November 2016

Tag des Kolloquiums: 24.02.2017
Dekan: Univ.-Prof. Dr. Frank-Olaf Schreyer
Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Christian Bender
Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. Thomas Schuster
Univ.-Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Alfred K. Louis
Akademischer Mitarbeiter: Dr. Steffen Weißer

Zusammenfassung

Die Terahertz-(THz)-Tomographie ist ein relativ neues Verfahren für die zerstörungsfreie Prüfung. Sie ist besonders geeignet für die Überprüfung von Kunststoffen und Keramiken, da THz-Strahlung diese Materialien einfach durchdringen kann. Bisherige Veröffentlichungen zeigen oft eine direkte oder leicht angepasste Anwendung von Verfahren aus der Computer- oder Ultraschall-Tomographie auf THz-Messdaten. Dabei vernachlässigen diese Algorithmen wichtige Eigenschaften der THz-Strahlung, wie die Brechung an Grenzflächen, Reflexionsverluste und das Gaußsche Strahlprofil, wodurch Rekonstruktionsfehler entstehen. Ein wichtiger Materialparameter ist der komplexe Brechungsindex, aus dem Eigenschaften wie der Füllstoff- und Feuchtegehalt und Inhomogenitäten, wie Brüche und Lufteinschlüsse, abgeleitet werden können.

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines effizienten Algorithmus für die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex aus Transmissionsgrad- und Laufzeitmessungen. Dazu wird ein hybrider Algorithmus, basierend auf der algebraischen Rekonstruktionstechnik (ART), entwickelt, welcher diese um die Brechung (Snelliussches Gesetz) und Reflexionsverluste (Fresnelsche Formeln) erweitert und a priori Informationen über die Grenzflächen des Objektes verwendet. Die abschließenden Ergebnisse mit synthetischen als auch experimentellen Messdaten zeigen, dass die Verwendung der „modifizierten ART“ zu einer deutlichen Verbesserung der Rekonstruktionen im Vergleich zu den klassischen Verfahren führt.

Abstract

Terahertz (THz) tomography is a rather novel technique for nondestructive testing that is particularly suited for the testing of plastics and ceramics because THz radiation can easily penetrate these materials. Previous publications showed a large variety of conventional algorithms adapted from computed tomography or ultrasound tomography which were directly applied to THz tomography. Conventional algorithms neglect the specific nature of THz radiation, i. e. refraction at interfaces, reflection losses and the beam profile (Gaussian beam), which results in poor reconstructions. An important material parameter is the complex refractive index since it indicates different material characteristics such as filler content, moisture and inhomogeneities like cracks and air cavities.

The aim of this thesis is the development of an efficient reconstruction algorithm to compute the complex refractive index from transmission coefficient and travel time measurements. A hybrid algorithm has been developed based on the algebraic reconstruction technique (ART). ART is adapted by including refraction (Snell's law) and reflection losses (Fresnel equations) and we include a priori information about the interface and layer geometry of the sample. The concluding results were obtained both with synthetic data as well as real measurements and demonstrate that the "Modified ART for THz tomography" significantly improves the quality of the reconstructed images compared to conventional techniques.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	XV
1. Grundlagen der THz-Tomographie	1
1.1. THz-Frequenzbereich	1
1.2. THz-Tomographie	4
1.3. Aufgabenstellung und Zielsetzung	6
2. THz-Tomographie als inverses Problem	9
2.1. Physikalische Grundlagen	9
2.1.1. Modellierung von THz-Strahlung	9
2.1.2. THz-Tomographie-System	13
2.1.3. Simulationen mit der Helmholtz-Gleichung	14
2.1.4. Snelliussches Brechungsgesetz und Fresnelsche Reflexionsverluste	17
2.2. Mathematische Grundlagen	19
2.2.1. Inverse Probleme	20
2.2.2. Mathematisches Modell für die 2D-THz-Tomographie	34
2.2.3. Algebraische Rekonstruktionstechnik	36
2.2.4. Konvergenzraten für Kaczmarz-artige Regularisierungsmethoden	41
2.2.5. Störungstheorie für die verallgemeinerte Inverse	47
3. Modifizierte ART	55
3.1. Darstellung von Grenzflächen	55
3.2. Strahlverlauf unter Berücksichtigung der Brechung	57
3.3. Algorithmenentwicklung	61
3.3.1. Berücksichtigung der Fresnelschen Formeln	62
3.3.2. Berücksichtigung des gebrochenen Strahlverlaufs	63
3.3.3. Ablaufplan	65
3.4. Konvergenzbetrachtungen	68
4. Numerische Evaluation	73
4.1. Rekonstruktion mit synthetischen Daten	74
4.1.1. Kreisscheibe mit eingelassenem Rechteck	74
4.1.2. THz-Schriftzug	79

4.2.	Rekonstruktion mit experimentellen Daten	81
4.2.1.	Blöcke aus Polyethylen und Polyamid	81
4.2.2.	Geklebter Block mit verschiedenen Brechungsindizes	88
4.2.3.	PE-Zylinder: Rekonstruktion mit unbekanntem Grenzflächen im Inneren	92
4.3.	Grenzen des Verfahrens	96
5.	Fazit und Ausblick	99
A.	Berechnung der Schnittpunkte und Normalen mit verschiedenen Grenzflächen	105
A.1.	Gerade	105
A.2.	Ellipse	106

Abbildungsverzeichnis

0.1. Messdaten der THz-Tomographie	XVI
0.2. Tomographische Messung	XVII
1.1. THz-Strahlung im elektromagnetischen Spektrum	2
2.1. Gauß-Strahl	13
2.2. Aufbau zur Durchführung tomographischer Messungen	14
2.3. Simulation der THz-Strahlung mit der Helmholtz-Gleichung	16
2.4. Vergleich simulierter und gemessener Transmissionsgrad	17
2.5. Skizze Snelliussches Brechungsgesetz und Fresnelsche Formeln	18
2.6. Parametrisierung von L	34
2.7. ART: Diskretisierung und Kaczmarz-Methode	39
3.1. Darstellung der Grenzflächen	57
3.2. Parametrisierung des THz-Strahls	59
3.3. Skizze zur Berechnung der Matrix A bei der modifizierten ART	64
3.4. Ablaufplan der modifizierten ART	67
4.1. Kreisscheibe mit Rechteck: Brechungsindex mit mod. ART	75
4.2. Kreisscheibe mit Rechteck: Absorptionskoeffizient mit mod. ART	75
4.3. Kreisscheibe mit Rechteck: relativer Fehler und Parameterstrategie	76
4.4. Kreisscheibe mit Rechteck: Rekonstruktion der Strahlwege	77
4.5. Kreisscheibe mit Rechteck: Sinogramm Wegunterschied	78
4.6. Kreisscheibe mit Rechteck: Sinogramm Transmissionsgrad	78
4.7. THz-Schriftzug	79
4.8. THz-Schriftzug: Brechungsindex mit modifizierter ART	80
4.9. THz-Schriftzug: Absorptionskoeffizient mit modifizierter ART	80
4.10. PE-Block: komplexer Brechungsindex mit FBP	82
4.11. PE-Block: komplexer Brechungsindex mit ART	82
4.12. PE-Block: Brechungsindex mit modifizierter ART	83
4.13. PE-Block: Absorptionskoeffizient mit modifizierter ART	84
4.14. PE-Block: Querschnitt der Rekonstruktionen	84
4.15. PA-Block: Brechungsindex mit modifizierter ART	85
4.16. PA-Block: Absorptionskoeffizient mit modifizierter ART	86

4.17. Einfluss des Korrekturterms auf die Rekonstruktionen	87
4.18. Geklebter Block	88
4.19. Geklebter Block: Brechungsindex mit FBP	89
4.20. Geklebter Block: Brechungsindex mit ART	89
4.21. Geklebter Block: Brechungsindex mit modifizierter ART	90
4.22. Geklebter Block: Querschnitt der Rekonstruktionen	91
4.23. Maße des PE-Zylinders	92
4.24. PE-Zylinder: Rekonstruktion des Brechungsindexes	93
4.25. PE-Zylinder: Simulation des Messvorgangs	93
4.26. PE-Zylinder: Sinogramme	94
4.27. PE-Zylinder: Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten	95

Symbolverzeichnis

Bezeichnungen

α	Absorptionskoeffizient
a	Absorptionsverluste
A	Matrix für die algebraische Rekonstruktionstechnik
\mathfrak{A}	Strahlwegabbildung
χ	charakteristische Funktion
c_0	Lichtgeschwindigkeit
c_M	Ausbreitungsgeschwindigkeit im Medium
C_{abs}	Korrekturfaktor für Intensitätsmessdaten
d	Wegunterschied
δ	Rauschpegel
ε_i	Beschränkung zw. iterierten Messdaten und korrigierten Daten
\mathbf{e}_i	Gesamtdatenfehler
$\varepsilon_{\text{miss}}$	Grenze aussortierter Messdaten
E_0, E_r	elekt. Feldstärken des einfallenden bzw. reflektierten Strahls
φ	Winkel im Intervall $[0, 2\pi)$
f	Frequenz
f	Gesuchte Größe bei $Af = g$
$f^r, F^r, \hat{f}^k, \hat{F}^k$	Gesuchte Größen bei den Iterationsverfahren (Details s. u.)
γ_1, γ_2	Winkel zum Snelliusschen Brechungsgesetz
Γ	Parametrisierung eines (Teil-)Strahls
g_{abs}	Messdaten Transmissionsgrad
\tilde{g}_{abs}	korrigierte Messdaten Transmissionsgrad
g_{ref}	Messdaten Wegunterschied
\mathbf{g}	Messwertkorrektur
η_i	Beschränkung des Modellfehlers
I_0, I	Anfangsintensität und Intensität am Detektor
ω	Normalenvektor zu der Geraden $L(\varphi, s)$
k_i^*	Abbruchindex des i -ten ART-Verfahrens
κ	Imaginärteil des komplexen Brechungsindex
K	Gesamtanzahl Grenzflächen

\hat{K}	Anzahl der getroffenen Grenzflächen
\tilde{K}	Anzahl der Grenzflächen mit gemeinsamen Schnittpunkt
$\lambda_{\text{abs}}, \lambda_{\text{ref}}$	Relaxationsparameter
L	gebrochener Strahlweg
L_l	l -ter Teilstrahl
M	Anzahl Pixel
\mathbf{n}	Normalenvektor einer Grenzfläche
n	Realteil des komplexen Brechungsindex
n_1, n_2	Brechungsindizes vor und nach einer Grenzfläche
N	Anzahl Strahlen
\tilde{n}	komplexer Brechungsindex
Ω	Kreisscheibe mit Radius \mathfrak{R}
ψ	Vektor der Anzahl der Iterationen der Kaczmarz-Verfahren
Ψ	Anzahl Anwendungen des Kaczmarz-Verfahrens
p	Anzahl Winkel
q	Anzahl der Abstände vom Ursprung
ρ	Reflexionsgrad
r_i^*	Abbruchindex des i -ten ART-Verfahrens (für Sweep-Iterierte)
$R(\tilde{z})$	Krümmungsradius an der Stelle \tilde{z}
\mathfrak{R}	Radius von Ω
\mathcal{R}	Radon-Transformation
σ	Parameter einer Grenzfläche
s	Abstand vom Ursprung
τ	Transmissionsgrad
$t_l^{\Gamma_l}$	Strahlparameter zum Schnittpunkt der nächsten Grenzfläche
T_0, T	Laufzeit ohne/mit Objekt
Θ	Divergenz des Gauß-Strahls
ΔT	Laufzeitverzögerung
u	Verkleinerungsfaktor der Toleranzgrenze
v	Verkleinerungsfaktor der Relaxationsparameter
w_0	Strahltaille des Gauß-Strahls
$w(\tilde{z})$	Strahlradius an der Stelle \tilde{z} des Gauß-Strahls
$\Xi(\sigma) = (\xi_1, \xi_2)^T$	Grenzfläche
\tilde{z}_0	Rayleigh-Länge des Gauß-Strahls
$\zeta(\tilde{z})$	Gouy-Phase an der Stelle \tilde{z} des Gauß-Strahls
ζ_i	Toleranzgrenze der Parameterwahlstrategie
ζ_{target}	Zielresiduum der Parameterwahlstrategie

Gesuchte Größen

	„Sweep“-Iterierte r	„Modulo“-Iterierte k
kontinuierlich	f^r	\hat{f}^k
diskret	F^r	\hat{F}^k
beim i -ten Kaczmarz-Verfahren	$\tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}, \tilde{F}_{\text{abs}}^{r,i}$	$\hat{F}_{\text{ref}}^{k,i}, \hat{F}_{\text{abs}}^{k,i}$
Konvergenzbetrachtungen mit gestörten Daten	$\tilde{F}_i^{\delta,r}$	$\hat{F}_i^{\delta,k}$

Indizes

ι	Subindex Grenzflächen
i	Index der Winkel
i	Iterationsindex der modifizierten ART
j	Index der Abstände vom Ursprung
k	Index für Grenzflächen
k	Iterationsindex ART
l	Index eines Teilstrahls
ν	Strahlindex
μ	Pixelindex
r	Iterationsindex ART (Sweep)

Einleitung

Die THz-Tomographie gehört zu den bildgebenden Verfahren und wird unter anderem bei der zerstörungsfreien Prüfung (ZfP) von Werkstücken, insbesondere aus Kunststoff oder Keramik, eingesetzt. Verfahren der zerstörungsfreien Prüfung werden für die Detektion verborgener Fehler, zur Qualitätskontrolle und Produktüberwachung verwendet. Hierbei bedeutet zerstörungsfrei, dass diese Verfahren verschiedene Eigenschaften des Inneren eines Objektes bestimmen, ohne das Objekt dabei zu zerstören. So ist eine 100%ige Kontrolle der herzustellenden Erzeugnisse möglich, was vor allem bei sicherheitsrelevanten Produkten wichtig ist (vgl. [12, S. 363 ff.]). Hierfür werden seit geraumer Zeit Verfahren basierend auf der Ultraschalltechnik oder der Röntgenstrahlung, wie die Computertomographie (CT), verwendet. Die ZfP mit THz-Strahlung ist dagegen ein recht neues Forschungsgebiet und insbesondere die THz-Tomographie wurde bislang nicht ausführlich untersucht (vgl. [40, 115]). Dies liegt daran, dass der THz-Frequenzbereich zwischen Mikrowellen- und Infrarotstrahlung liegt und damit im Grenzbereich zwischen mit elektronischen bzw. optischen Systemen erreichbaren Frequenzen. Die Erzeugung von THz-Strahlung war somit sehr aufwendig und geeignete THz-Quellen und Empfänger sind erst seit Ende der achtziger Jahre verfügbar (vgl. [37]). So konnte der THz-Frequenzbereich lange Zeit nur eingeschränkt genutzt werden. Mittlerweile ist die Entwicklung von THz-Systemen soweit fortgeschritten, dass günstigere und zuverlässige THz-Systeme angeboten werden können (vgl. [49, 51, 52]).

Auch in der Kunststoffindustrie sind ZfP-Verfahren von großem Interesse, um den Ausschuss bei der Produktion von z. B. Rohren, Schläuchen oder Fensterprofilen zu vermindern und die Qualität der produzierten Ware ohne Zerstörung überprüfen zu können. Hierbei sind Verfahren basierend auf THz-Strahlung besonders geeignet, da viele Kunststoffe im THz-Bereich nahezu transparent sind (vgl. [59, 92]). Dagegen können Wasser, Metalle und leitfähige Materialien kaum von THz-Wellen durchdrungen werden. Für die Qualitätskontrolle können verschiedene Materialeigenschaften als Qualitätskenndaten dienen. Einer der gesuchten Materialparameter in der THz-Tomographie ist der ortsabhängige komplexe Brechungsindex. Dessen Realteil (der sog. Brechungsindex) gibt an, um welchen Faktor die Phasengeschwindigkeit einer elektromagnetischen Welle kleiner als im Vakuum ist und bestimmt z. B. die Brechung einer Welle beim Übergang zwischen zwei unterschiedlichen Medien. Der Imaginärteil

ist dagegen ein Maß für die Verringerung der Intensität elektromagnetischer Strahlung und damit direkt mit dem Absorptionskoeffizienten verbunden. Mithilfe des komplexen Brechungsindex können für die Kunststoffindustrie wichtige Materialeigenschaften wie Dichteunterschiede, Füllstoff- und Feuchtegehalt, Faserausrichtung oder Defekte wie Lufteinschlüsse detektiert werden (siehe z. B. [49, 118]).

Um Materialeigenschaften bestimmen zu können, treten ZfP-Verfahren mit dem Material des Objektes in eine physikalische Wechselwirkung, deren Auswirkungen gemessen werden. Im Falle der THz-Tomographie wird der zu untersuchende Probekörper mit THz-Strahlung, d. h. mit einer elektromagnetischen Strahlung mit einer Frequenz zwischen 0.1 THz und 10 THz, bzw. einer Wellenlänge zwischen 3 mm und 30 μm , beleuchtet. Die von einer THz-Quelle (Sender) entsandte Strahlung durchdringt das zu untersuchende Objekt. Dabei wird je ein Teil der Strahlung an den Grenzflächen des Objektes reflektiert bzw. innerhalb des Objektes absorbiert, was in einer Reduktion der Intensität des transmittierten Strahls resultiert (vgl. [27, S. 219 ff.]). Des Weiteren trifft die Strahlung am Empfänger mit einer Verzögerung ein, da sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der elektromagnetischen Welle im Objekt im Vergleich zu Luft verringert. Mit einem geeigneten Empfänger kann nun sowohl die Abschwächung der Intensität, als auch die Laufzeitverzögerung der ausgesendeten Strahlung gemessen werden (siehe Abbildung 0.1).

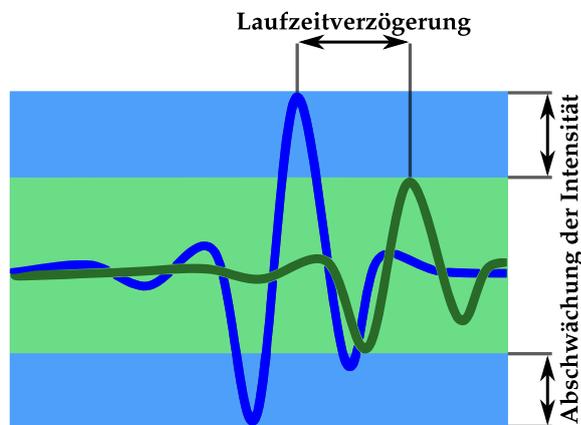


Abbildung 0.1.: Skizze der zur Verfügung stehenden Messdaten: beide Wellen wurden von derselben Quelle erzeugt; die blaue Welle propagiert durch Luft, die grüne Welle durchläuft zusätzlich einen Probekörper

Die vorliegende Arbeit behandelt das inverse Problem der THz-Tomographie, d. h. die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex aus diesen Messdaten. Hierzu muss ein physikalischer Zusammenhang zwischen den Messdaten und der zu rekonstruierenden Größe bestehen: Je größer der Brechungsindex (Realteil) eines Objektes ist, desto langsamer ist die Phasengeschwindigkeit im Objekt und die Welle erreicht

später den Empfänger. Dadurch ergibt sich ein Zusammenhang zu der gemessenen Laufzeitverzögerung. Ein großer Absorptionskoeffizient führt dazu, dass das Objekt die Strahlung stärker abschwächt. Ein Objekt mit kleinem Absorptionskoeffizient ist dagegen durchlässiger für die Strahlung. Der Zusammenhang zum Imaginärteil ist also die gemessene Abschwächung der Intensität. Ein direktes Problem bestimmt aus einer bekannten Ursache die gesuchte Wirkung. Inverse Probleme behandeln dagegen den indirekten Schluss von einer beobachteten Wirkung (Messdaten) auf deren Ursache. Die beobachteten Wirkungen sind hier die Abschwächung und Laufzeitverzögerung der THz-Strahlung, die durch den komplexen Brechungsindex des Objektes verursacht werden. Stehen die Messdaten für viele verschiedene Richtungen und Drehungen zur Verfügung (siehe Abbildung 0.2), sodass das Objekt überall gleichmäßig beleuchtet wurde, können wir versuchen den komplexen Brechungsindex zu rekonstruieren.

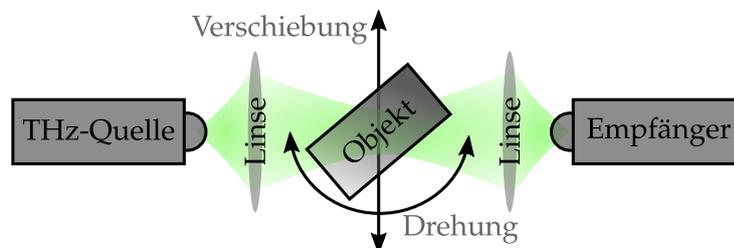


Abbildung 0.2.: Skizze einer Messung eines rechteckigen Probekörpers

Zur Erzeugung von THz-Strahlung kann man sich von niedrigeren Frequenzen aus der Elektronik oder von höheren Frequenzen aus der Optik nähern. In einem ähnlichen Grenzbereich befindet sich die mathematische Modellierung von THz-Strahlung. Auf der einen Seite zeigt THz-Strahlung typische Eigenschaften von Strahlen, deren geradlinige Ausbreitung z. B. in der Röntgen-Computertomographie ausgenutzt wird. Auf der anderen Seite besitzen THz-Strahlen auch einen nicht zu vernachlässigenden Wellencharakter. Die Art der Ausbreitung von Schallwellen macht sich die Ultraschall-Tomographie zunutze. In der bisher zur THz-Tomographie erschienenen Literatur werden daher oft Rekonstruktionsverfahren aus der Computertomographie oder der Ultraschall-Tomographie direkt oder leicht adaptiert übernommen und auf THz-Messdaten angewendet (siehe z. B. [40, 115]). Durch die fehlende Berücksichtigung der Eigenschaften von THz-Strahlung zeigen die Rekonstruktionen teilweise starke Artefakte, sodass weiterhin ein Bedarf an Rekonstruktionsalgorithmen besteht, welche speziell für die THz-Tomographie entwickelt werden. Des Weiteren werden bisherige Algorithmen entweder die Abschwächung der Intensität oder die Laufzeitverzögerung aus, wodurch nur die Rekonstruktion eines der gesuchten Materialparameter möglich ist (Brechungsindex oder Absorptionskoeffizient).

Wir wollen in der vorliegenden Arbeit der Aufgabe nachgehen, einen neuartigen und effizienten Algorithmus, die „modifizierte algebraische Rekonstruktionstechnik“, zur Lösung des inversen Problems der THz-Tomographie zu entwickeln. Dabei werden wir die physikalischen Eigenschaften von THz-Strahlung berücksichtigen, womit deutlich bessere Rekonstruktionen als mit herkömmlichen Algorithmen aus der Computertomographie möglich sind. Außerdem werden wir sowohl die Abschwächung der Intensität, als auch die Laufzeitverzögerung auswerten, um die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex innerhalb eines einzigen Algorithmus zu ermöglichen. Eine effiziente Lösung des Problems erreichen wir, indem wir nur die dominanten physikalischen Effekte berücksichtigen.

Um dieses Ziel zu erreichen, wenden wir uns in Kapitel 1 zunächst der Tomographie mit THz-Strahlung im Allgemeinen zu. Wir betrachten die Besonderheiten der THz-Strahlung und die sich daraus ergebenden Konsequenzen für bildgebende Verfahren. Dabei gehen wir auch auf die Vor- und Nachteile im Vergleich zu der Verwendung von Röntgenstrahlen und Ultraschall ein. Nach einer Betrachtung der bisherigen Arbeiten zum Thema THz-Tomographie schließen wir mit der Formulierung der Aufgabenstellung und der Zielsetzung.

In Kapitel 2 beschäftigen wir uns mit den physikalischen und mathematischen Grundlagen, die wir zur Entwicklung des neuen Rekonstruktionsalgorithmus benötigen. Zunächst betrachten wir die Modellierung von THz-Strahlung, welche durch einen Gauß-Strahl approximiert werden kann. Anschließend gehen wir auf die Eigenschaften eines THz-Tomographie-Systems ein, mit dem uns das Süddeutsche Kunststoff-Zentrum (SKZ) in Würzburg reale Messdaten zur Verfügung gestellt hat. Ausgehend von der Modellierung der THz-Strahlung wenden wir uns dann der Simulationen des Messvorgangs mit der Helmholtz-Gleichung zu. Zur späteren Realisierung der gebrochenen Strahlwege und der Berücksichtigung von Reflexionsverlusten benötigen wir die zugehörigen physikalischen Gesetze, das Snelliussche Brechungsgesetz und die Fresnelschen Formeln. Im zweiten Abschnitt führen wir zunächst grundlegende Begriffe und Ergebnisse aus der Theorie der inversen Probleme ein. Anschließend stellen wir ein vereinfachtes Modell für die 2D-THz-Tomographie vor, welches auf Integralgleichungen basiert und formulieren das hier betrachtete inverse Problem. Zur Lösung des inversen Problems werden wir die algebraische Rekonstruktionstechnik (ART), ein Verfahren zur Bildrekonstruktion in der Computertomographie, anpassen und um unsere Modellierung erweitern. Daher gehen wir zunächst auf das ART-Verfahren ein und geben zugehörige Konvergenzraten an. Wir beschließen das Kapitel mit einigen Ergebnissen aus der Störungstheorie der verallgemeinerten Inverse, die wir später neben der Konvergenzrate von ART für die Konvergenzbetrachtungen zu der modifizierten ART benötigen.

Wir werden in Kapitel 3 schließlich die modifizierte ART für die THz-Tomographie

entwickeln. Das neue Verfahren benötigt als zusätzliche Information die Positionen und die Normalen der Grenzflächen des Objektes, um an diesen die Strahlen gemäß dem Snelliusschen Brechungsgesetz zu brechen und die Reflexionsverluste zu berechnen. Wir definieren daher, was wir unter einer Grenzfläche verstehen und betrachten den Sonderfall von sich überschneidenden Grenzflächen. Anschließend können wir den Strahlverlauf unter Berücksichtigung der Brechung beschreiben. In der folgenden Algorithmenentwicklung geben wir an, wie die Fresnelschen Reflexionsverluste berücksichtigt werden können und welchen Einfluss und Änderungen die gebrochenen Strahlverläufe auf die algebraische Rekonstruktionstechnik zur Folge haben. Das Kapitel schließt mit Betrachtungen zur Konvergenz der modifizierten ART.

In Kapitel 4 wird die modifizierte ART anhand von synthetischen, als auch realen Messdaten validiert und mit der gefilterten Rückprojektion und der konventionellen ART verglichen. Hierbei können wir eine deutliche Verbesserung der Rekonstruktionsergebnisse feststellen. Des Weiteren gehen wir auf die Grenzen des Verfahrens ein.

Im letzten Kapitel fassen wir die wichtigsten Ergebnisse zusammen und geben einen Ausblick auf mögliche weitere Arbeiten und Verbesserungen.

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei all denen, die mich bei der Durchführung dieser Arbeit tatkräftig unterstützt haben, herzlich bedanken:

Ganz besonders möchte ich mich bei Prof. Dr. Thomas Schuster für die Betreuung und vielseitige Unterstützung bei der Bearbeitung dieses außerordentlich interessanten Forschungsthemas bedanken. Hierzu gehört auch, dass er mir die Gelegenheit gegeben hat mit ins Saarland zu kommen. Ich danke ihm zudem für die Möglichkeit zur Teilnahme und Präsentation unserer Forschungsergebnisse bei zahlreichen Konferenzen, wie z. B. in Mailand, Berlin, Bristol und, als besonders beeindruckenden Abschluss, in Fethiye.

Bei Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Alfred K. Louis möchte ich mich für die Erstellung des Zweitgutachtens bedanken.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinem guten Freund und ehemaligen Büronachbar Dr. Udo Schröder. Seine vielen nützlichen Ideen und kritischen Kommentare haben sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Noch wichtiger waren und sind die privaten Unternehmungen und Gespräche, welche mir viel bedeuten.

Nicht zuletzt möchte ich der gesamten Arbeitsgruppe und den ehemaligen Mitgliedern für die angenehme Arbeitsatmosphäre und schöne Zeit danken. Dazu gehören neben den fachlichen Diskussionen natürlich auch die Gespräche fern ab der Numerik. Besonders erwähnt seien Dr. Frederik Heber, bei dem ich mich für das Korrekturlesen und für die hilfreichen Anmerkungen bedanken möchte und M.Sc. Julia Seydel für die tatkräftige Unterstützung bei der Betreuung der Lehre in meinem letzten Semester.

Schließlich möchte ich meinen Eltern für ihren Rückhalt und ihre Unterstützung sowohl während des Studiums, als auch während der Promotion, danken. Meinen Bruder und meinen Freunden danke ich für ihre allzeit offenen Ohren und vor allem auch für die musikalische Zerstreuung. Meiner geliebten Sophie möchte ich für ihr großes Verständnis und ihre beständige Unterstützung danken und dafür, dass sie immer für mich da ist.

Jens Tepe

Saarbrücken, November 2016

Kapitel 1

Grundlagen der THz-Tomographie

Terahertz-Strahlen werden in den letzten Jahren immer öfter in der zerstörungsfreien Prüfung eingesetzt. Die Verwendung in tomographischen Verfahren nimmt ebenfalls stetig zu, gleichwohl ist die THz-Tomographie noch eine recht junge Disziplin. Zu Beginn wollen wir zunächst den THz-Frequenzbereich vorstellen und darauf eingehen, wofür THz-Strahlen verwendet werden können. Des Weiteren gehen wir auf die Vor- und Nachteile der Verwendung von THz-Strahlen gegenüber bildgebenden Verfahren mit Röntgenstrahlen oder Ultraschall ein. Anschließend beschäftigen wir uns mit der in der THz-Tomographie gesuchten Größe, dem komplexen Brechungsindex, und geben eine Übersicht über bisherige Veröffentlichungen zur THz-Tomographie an. Wir schließen das Kapitel mit der Aufgabenstellung und Zielsetzung dieser Arbeit. Dieses Kapitel basiert teilweise auf TEPE UND SCHUSTER [108] und LITTAU, TEPE ET AL. [77]. Alle weiteren Quellen sind wie gewohnt angegeben.

1.1. THz-Frequenzbereich

Als Terahertz-(THz)-Strahlung wird elektromagnetische Strahlung bezeichnet, welche im elektromagnetischen Spektrum zwischen Mikrowellen und Infrarotstrahlung liegt. In der Literatur existieren unterschiedliche Definitionen des THz-Frequenzbereiches, von denen sich bislang keine durchgesetzt hat. Wir verwenden die weit verbreitete Definition, die den THz-Frequenzbereich für elektromagnetische Strahlung mit einer Frequenz zwischen 100 GHz (10^{11} Hz) und 10 THz (10^{13} Hz) bzw. einer Wellenlänge zwischen 3 mm und 30 μm festlegt (vgl. [73, S. 2-3]). Somit schließt sich mit niedrigeren Frequenzen unterhalb von 100 GHz der Mikrowellenbereich an, der technisch durch die Hochfrequenzelektronik gut erschlossen ist. Oberhalb befindet sich der Infrarotbereich, der durch typische Anwendungen optischer Technologien, wie der Lasertechnik, abgedeckt ist [52]. Abbildung 1.1 veranschaulicht die Lage des THz-Frequenzbereiches im elektromagnetischen Spektrum.

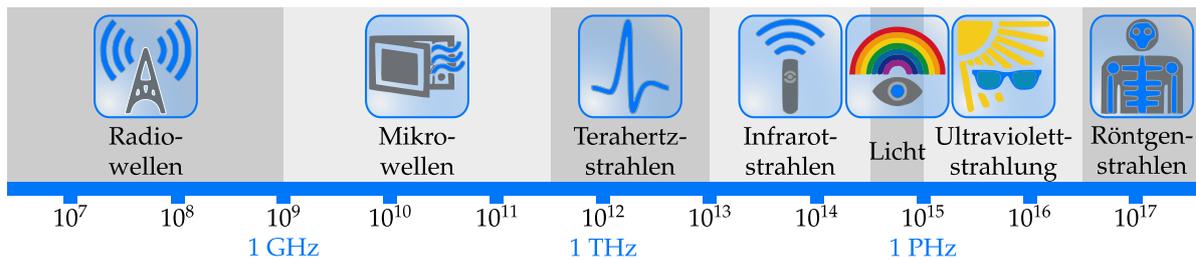


Abbildung 1.1.: THz-Strahlung im elektromagnetischen Spektrum (nach [82])

Während alle anderen Bereiche des elektromagnetischen Spektrums technisch genutzt werden können, war dies für den THz-Bereich eine lange Zeit nur sehr eingeschränkt möglich. Dies liegt daran, dass weder geeignete Sender für die Generierung von kontrollierbaren THz-Signalen, noch effiziente Empfänger für die Erfassung der Signale zur Verfügung standen (vgl. [67, 120]). Daher wurde auch von einer „THz-Lücke“ im elektromagnetischen Spektrum gesprochen. Diese Lücke konnte in den letzten zwei Jahrzehnten immer weiter geschlossen werden, sodass mittlerweile eine gezielte Erzeugung von THz-Strahlung aus Richtung der Hochfrequenz- als auch der Mikrowellentechnik möglich ist (vgl. [73, S. 1]). THz-Strahlung kann sowohl optisch als auch elektronisch generiert werden und sich in Materialien ausbreiten, die undurchlässig für andere Teile des elektromagnetischen Spektrums sind. So sind u. a. viele Kunststoffe, Keramiken, Gläser, Papiere, Hölzer und Kleidung bis zu einem gewissen Grad transparent für THz-Strahlung. Dagegen wird THz-Strahlung von Wasser stark absorbiert und von leitfähigen Materialien, wie z. B. Metalle, reflektiert, sodass THz-Wellen diese Materialien kaum oder nicht durchdringen können. Resultierend aus der fortschreitenden Forschung an der THz-Strahlung ergeben sich mittlerweile verschiedene Anwendungsbereiche, von denen wir einige nennen wollen (vgl. [97, S. v-vii][52]):

- THz-Spektroskopie (zur Materialcharakterisierung: Biomoleküle, Proteine, Drogen, Sprengstoffe oder Pharmazeutika, zeigen spektrale Signaturen im THz-Bereich, siehe [65, 109] oder zur Texterkennung von einem geschlossenen Buch, siehe [95]),
- Medizinische Bildgebung (Krebsfrüherkennung auf der Hautoberfläche oder mit Sonden bei Darm- oder Gebärmutterhalskrebs, Unterscheidung zwischen Krebszellen und gesundem Gewebe anhand des Wassergehalts, siehe [91, 102, 114, 119]),
- Kommunikationstechnik (zukünftige Kommunikation per WLAN oder Mobilfunk könnte THz-Strahlung verwenden, welche höhere Übertragungsraten verspricht und für den steigenden Bedarf noch ungenutzte Bandbreite bietet, siehe [93]),

- Sicherheitstechnik (Personenkontrolle mit Körperscanner auf Flughäfen: THz-Strahlung durchdringt Kleidung und viele Verpackungsmaterialien; Sicherheitskontrolle von Postsendungen, Pakete und Gepäck: Sprengstoffe oder Pharmazeutika haben charakteristische Spektren im THz-Bereich, siehe [38, 110]),
- Nahfeldüberwachung (in der Automobilindustrie für die PreCrash-Sensorik und den Fußgängerschutz, siehe [52]),
- Zerstörungsfreie Werkstoffprüfung.

Wir gehen im Folgenden nur auf die zerstörungsfreie Prüfung detaillierter ein. Der Einsatz von THz-Strahlung steht dabei in Konkurrenz zu ZfP-Verfahren, welche auf Röntgenstrahlen oder Ultraschall basieren. Gerade für die Untersuchung von Kunststoffen bieten THz-Strahlen allerdings einige Vorteile. Viele Kunststoffe wie z. B. Polyethylen (PE) oder Polypropylen (PP) sind im unteren THz-Bereich transparent (siehe [59, 92, 117]), sodass sich THz-Wellen für die Qualitätskontrolle von Kunststoffprodukten besonders eignen. Mit THz-Messungen können verschiedene Materialeigenschaften von Kunststoffen wie Dichteunterschiede, Füllstoff- und Feuchtegehalt, Partikelgrößenverteilung und Faserausrichtung bestimmt werden (vgl. [49, 54]).

Folgende Vor- und Nachteile besitzt THz-Strahlung gegenüber ZfP-Verfahren mit Ultraschalltechnik und Röntgenstrahlen: Ultraschallwellen werden an geschäumten Bauteilen und bei Lufteinschlüssen stark gedämpft, sodass sie für die zerstörungsfreie Prüfung in diesem Bereich nicht in Frage kommen. Des Weiteren wird oft ein Koppelmedium, wie z. B. ein Wasserbad, benötigt (vgl. [68]), da Ultraschall eine mechanische Schwingung ist und ein Ausbreitungsmedium benötigt. Dagegen sind mit THz-Strahlen berührungslose Messungen ohne Koppelmedium von geschäumten oder luftgefüllten Proben möglich (siehe [49]). Röntgenverfahren arbeiten ebenfalls berührungslos, benötigen aber aufgrund ihrer ionisierenden Strahlung erhöhte Sicherheitsvorkehrungen. Dafür bietet die Computertomographie, dank der kleinen Wellenlänge der Röntgenstrahlen, eine sehr hohe räumliche Auflösung und damit im Vergleich zu Ultraschall und THz-Strahlung die größte Detailgenauigkeit. Zudem können die Rekonstruktionsverfahren sehr schnell durchgeführt werden. Allerdings ist die Unterscheidung zwischen Kunststoffen ähnlicher Dichte wie beispielsweise Polyethylen und Polypropylen nahezu nicht möglich und die Anschaffungs- und Betriebskosten sind sehr hoch.

Mit der THz-Tomographie können einige der Nachteile der Ultraschall- und Röntgenverfahren ausgeglichen werden. So kann THz-Strahlung im Bereich der Messtechnik als nicht gesundheitsgefährdend eingestuft werden (vgl. [50]). THz-Strahlung wird ähnlich wie Ultraschall- oder Lichtwellen an Grenzflächen reflektiert und bietet somit bei zeitaufgelösten Messungen zusätzliche Tiefeninformationen. Im THz-Frequenzbereich weisen Füllstoffe, Additive und Lufteinschlüsse in Kunststoffen

deutliche Unterschiede in ihren dielektrischen Eigenschaften auf und können daher gut detektiert werden. Somit besteht mit THz-Strahlen die Möglichkeit zur gesundheitlich unbedenklichen, zerstörungsfreien und berührungslosen Materialprüfung.

1.2. THz-Tomographie

THz-Strahlen besitzen aufgrund ihrer im Vergleich zu Röntgenstrahlen langen Wellenlänge nur ein sehr eingeschränktes laterales Auflösungsvermögen. Jedoch können im Gegensatz zu den klassischen tomographischen Techniken durch den Einsatz modulierter THz-Strahlung sowohl Phasen- als auch Amplitudeninformationen gewonnen werden (vgl. [69]). Damit kann neben der Abschwächung des Signals (Amplitudeninformation), auch die Laufzeit des Signals (Phaseninformation), analog zur Ultraschalltechnik, gemessen werden. Die Laufzeit ist die Zeit, welche die THz-Strahlung vom Sender bis zum Empfänger benötigt.

Das inverse Problem der THz-Tomographie besteht nun darin, aus diesen Messdaten ein Objekt, welches durch den komplexen Brechungsindex

$$\tilde{n} = n + i\kappa, \quad \tilde{n} \in \mathbb{C}$$

beschrieben wird, zu rekonstruieren. Der komplexe Brechungsindex \tilde{n} setzt sich aus einem Realteil n , welcher die optische Weglänge im Material beschreibt, und einem Imaginärteil κ , welcher die materialabhängige Absorption modelliert, zusammen. Dabei ist \tilde{n} in der zerstörungsfreien Prüfung in der Kunststoffindustrie eine wichtige Größe, da diverse Materialeigenschaften von ihm abgeleitet werden können. Wir nennen einige Beispiele:

Um die mechanischen Eigenschaften eines Kunststoffes zu verbessern, werden oft Füllstoffe wie Glasfasern, Kreide oder Holzpartikel (z. B. bei den Holz-Kunststoff-Verbundwerkstoffen) hinzugefügt. Diese beeinflussen den Realteil n des komplexen Brechungsindex und somit lässt seine Rekonstruktion einen Schluss auf den Füllstoffgehalt des untersuchten Objektes zu. Da THz-Strahlung von Wasser stark absorbiert wird, eignet sie sich für eine präzise Detektion des Wassergehalts in Kunststoffen. Der Feuchtegehalt eines Probekörpers kann aus dem Imaginärteil κ abgeleitet werden. Brüche und Lufteinschlüsse können durch starke Abweichungen in \tilde{n} festgestellt werden. Ausführlichere Untersuchungen zum Füllstoff- und Feuchtegehalt sind bei LITTAU, TEPE ET AL. [77, Kapitel 3.6] oder in HAUCK ET AL. [49] zu finden.

Recht weit verbreitet ist die zweidimensional bildgebende Technik mit THz-Strahlen (siehe z. B. [2, 24, 32, 54, 55, 64, 101, 111]). Hierbei werden allerdings keine tomographische Schnittbilder im eigentlichen Sinne gezeigt, sondern die Messdaten bildlich

dargestellt. Dagegen sind Tomographieverfahren mit THz-Strahlung bislang nicht ausführlich untersucht worden. Eine Übersicht über das noch relativ junge Gebiet der THz-Tomographie liefern WANG ET AL. [115], GUILLET ET AL. [45] und FERGUSON ET AL. [40, 39]. Bei AMENABAR ET AL. [4] ist zudem eine Übersicht über THz-Bildgebung und Tomographie in der zerstörungsfreien Prüfung von Verbundwerkstoffen zu finden.

Bislang veröffentlichte Ergebnisse lassen sich, je nach verwendeten Messdaten, in Transmissions- oder Reflexionstomographieverfahren einteilen. Weit verbreitet ist die Adaption von Verfahren aus der Computertomographie [62, 85] in den THz-Bereich, siehe z. B. [1, 16, 35, 40, 56, 86, 115, 112]. Hierbei wird vereinfachend von einer Ausbreitung entlang von Strahlen ausgegangen und die Radon-Transformation als Modell zugrunde gelegt. Allerdings haben Effekte wie Brechung, Beugung, Gaußsches Strahlprofil und Kanteneffekte sehr wohl einen Einfluss auf THz-Messungen, siehe BRAHM ET AL. [17]. Diese Effekte werden in einigen Veröffentlichungen durch Anpassungen berücksichtigt. RECUR ET AL. [94] stellen eine gefilterte Rückprojektion und angepasste iterative Verfahren (SART, OSEM) für die 3D-THz-CT vor, welche die Intensitätsverteilung der THz-Strahlen (Gauß-Strahl) berücksichtigen. MUKHERJEE ET AL. [83] beschränken sich auf zylindrische Objekte, berücksichtigen dafür Fresnel-Reflexionsverluste und die Ablenkung des Strahls. Des Weiteren wird von FERGUSON ET AL. [40] und WANG ET AL. [115] die Rekonstruktion des (reellen) Brechungsindex anhand des gemessenen, gestreuten elektrischen Feldes ausgehend von der Helmholtz-Gleichung (sog. THz-Diffraktionstomographie (THz-DT), analog zur Ultraschall-Tomographie, vgl. [22, 23]) vorgestellt. Die Analogiebetrachtung zur Ultraschall-Tomographie ist in Teilen durchaus möglich, da die Ultraschallwellenlänge in Kunststoffen ähnlich der THz-Wellenlänge ist, obwohl völlig verschiedene physikalische Ausbreitungsprinzipien (akustisch und elektromagnetisch) vorliegen (vgl. [3, 70]). Das nichtlineare inverse Streuproblem wird in [40, 115] mit der Born- und der Rytov-Approximation linearisiert (siehe auch [23, 63]).

Insgesamt hat sich bislang noch keine der obigen Vorgehensweisen für die THz-Tomographie als Standardverfahren etablieren können. Die Modellierung der THz-Strahlung wird bei den Rekonstruktionsverfahren unterschiedlich stark und detailliert berücksichtigt oder ist gar speziell auf die verwendeten Probekörper, wie bei MUKHERJEE ET AL. [83], angepasst. Daher werden wir in Kapitel 2.1.1 genauer auf die Modellierung von THz-Strahlung eingehen. Des Weiteren wird je nach verfügbaren Messdaten entweder der reelle Brechungsindex oder der Absorptionskoeffizient rekonstruiert, aber nicht beide simultan. So besteht weiterhin ein Bedarf an neuen Rekonstruktionsverfahren für den komplexen Brechungsindex, welche die Besonderheiten von THz-Strahlung berücksichtigen.

1.3. Aufgabenstellung und Zielsetzung

Die Aufgabe der vorliegenden Arbeit besteht in der Entwicklung und Validierung eines neuen Rekonstruktionsalgorithmus für die THz-Tomographie, welcher zum einen die physikalischen Eigenschaften von THz-Strahlung hinreichend berücksichtigt und zum anderen sowohl die gemessene Abschwächung der Intensität als auch die Laufzeitverzögerung auswertet, um den komplexen Brechungsindex zu rekonstruieren.

Während bei der Computertomographie mit Röntgenstrahlen die Wellenlänge verschwindend klein ist, sodass der Wellencharakter vollständig vernachlässigt und die Ausbreitung der Strahlung entlang von Geraden betrachtet werden kann, ist dies bei THz-Strahlung nicht mehr möglich. Im Vergleich zu Röntgenstrahlen besitzen THz-Strahlen eine vergleichsweise lange Wellenlänge, sodass typische Welleneffekte beobachtet werden können. Diese müssen bei der Modellierung des Messvorgangs berücksichtigt werden. Je genauer die Modellierung ist, desto aufwendiger und rechenintensiver sind die mathematischen Modelle zu lösen. Hierbei ist zu beachten, dass jedes physikalische Modell eine Vereinfachung der Realität ist, weshalb sich automatisch Modellierungsfehler einstellen. Ein sehr vereinfachendes Modell führt zu einem größeren Fehler, welcher anschließend nicht mehr herausgerechnet werden kann. In dieser Arbeit soll daher auch ein Kompromiss zwischen exakter Modellierung und Aufwand gefunden werden.

Die Strahlung einer THz-Quelle verhält sich im Idealfall wie ein Gauß-Strahl und kann mit der Wellengleichung, oder, falls nur die Intensität von Interesse ist, mit der Helmholtz-Gleichung modelliert werden. Wir behandeln die Modellierung von THz-Strahlung ausführlicher in Kapitel 2.1.1. Die Lösung der Helmholtz-Gleichung ist im THz-Bereich, aufgrund der kurzen Wellenlänge und der daraus resultierenden feinen Diskretisierung des betrachteten Gebietes, sehr aufwendig. Dies verhindert eine effiziente Lösung mit Algorithmen basierend auf der Helmholtz- oder Wellengleichung. Deswegen soll der neue Algorithmus nicht auf der Lösung der Wellen- oder Helmholtz-Gleichung basieren, aber trotzdem die dominierenden physikalischen Effekte berücksichtigen. Hierbei handelt es sich in erster Linie um die Transmission, die Brechung an Grenzflächen und die dabei entstehenden Reflexionsverluste. Ein weiterer wichtiger Faktor ist das gaußsche Strahlprofil, welches hier einfachheitshalber vernachlässigt werden soll.

Das verwendete THz-Tomographie-System stellt zum einen Intensitätsmessdaten, analog zur konventionellen Röntgentomographie, als auch verzögerte Laufzeiten bzw. Wegunterschiede, analog zur Ultraschalltechnik zur Verfügung. Wir wollen im Folgenden sowohl Laufzeit-, als auch Intensitätsmessdaten simultan auswerten, um den komplexen Brechungsindex zu rekonstruieren. Hierfür wird die algebraische Rekon-

struktionsstechnik (siehe [43]) derart angepasst, dass die Brechung an den Grenzflächen des Objektes nach dem Snelliusschen Gesetz und Reflexionsverluste nach den Fresnel'schen Formeln berücksichtigt werden. Dafür werden die Grenzflächen des Objektes als a priori Information für den Algorithmus benötigt. Wir nutzen und kombinieren zwei verschiedene tomographische Prinzipien (Transmissions- und Laufzeittomographie), womit die resultierende „modifizierte ART für die THz-Tomographie“ ein hybrider Algorithmus ist.

Die Berücksichtigung von gebrochenen Strahlwegen ähnelt den Ansätzen aus der Ultraschall-CT und der Ultraschall-Vektorfeldtomographie, bei denen Rekonstruktionen aus Laufzeitmessungen durch die Betrachtung von gebeugten Strahlwegen verbessert werden. In der Ultraschall-CT erfolgt die Berechnung der Strahlwege nach einem Ray-Tracing Ansatz durch die Lösung der Eikonalgleichung, siehe z. B. [8, 98, 103]. Dieses Verfahren benötigt allerdings einen stetig differenzierbaren Brechungsindex und daher eine Glättung etwaiger Sprünge im Brechungsindex an Grenzflächen. Ferner ist die Lösung einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung erster Ordnung notwendig. Ray-Tracing Algorithmen wurden erfolgreich mit algebraischen Rekonstruktionstechniken (ART, SART) kombiniert und ausführlich untersucht (vgl. [5, 7, 28]). Die Verfahren funktionieren gut für Inhomogenitäten im Brechungsindex, die kleiner als 10-20% sind (vgl. [6, 28]). Die betrachteten Abweichungen des Brechungsindex an Grenzflächen sind in der THz-Tomographie deutlich höher (>50%). So geben PIÉSIEWICZ ET AL. [92] die Brechungsindizes im THz-Bereich von HD-Polyethylen (HD steht für high-density) mit 1.53, von Polykarbonat mit 1.66 und von Polyamid mit 1.74 an. Die Brechung an Grenzflächen kann demnach als wesentlicher physikalischer Effekt angenommen werden. In der Ultraschall-Vektorfeldtomographie bewegen sich die Signale entlang von geodätischen Kurven einer Riemannschen Metrik, welche über das Fermatsche Prinzip mit dem Brechungsindex verbunden sind (siehe z. B. [90, 100]). Das inverse Problem besteht darin, den Brechungsindex aus Integralen entlang geodätischer Kurven aus Ultraschall-Laufzeitmessungen zu bestimmen. Sowohl in der THz-Tomographie, als auch in der Ultraschall-Vektorfeldtomographie, hängen die Strahlwege bzw. geodätischen Kurven vom unbekanntem und zu rekonstruierenden Brechungsindex ab. Um trotzdem den Einfluss des Brechungsindex auf die Strahlwege zu berücksichtigen, werden wir die Strahlwege iterativ anhand der jeweils aktuellen Approximationen an den Brechungsindex neu berechnen.

Zu denen in Kapitel 1.2 erwähnten und bislang in der Literatur vorgestellten Verfahren für die THz-Tomographie, unterscheidet sich der hier entwickelte Algorithmus um die kombinatorische Auswertung von Laufzeit- und Intensitätsdaten. So gibt es derzeit kein uns bekanntes Verfahren, das eine simultane Rekonstruktion des Brechungsindex und des Absorptionskoeffizienten ermöglicht. Durch die Berücksichtigung nur der wichtigsten physikalischen Gegebenheiten bleibt der hybride Algorithmus zudem

effizient und ermöglicht eine schnelle Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex.

Zusammenfassend besteht unser Ziel in der Entwicklung eines Algorithmus zur Lösung des inversen Problems der THz-Tomographie:

Problem. Das inverse Problem der THz-Tomographie behandelt den indirekten Schluss von der beobachteten Abminderung und Laufzeitverzögerung von THz-Strahlen beim Durchgang durch ein Objekt auf den komplexen Brechungsindex des Objektes.

Die modifizierte ART soll dazu mathematisch beschrieben und implementiert werden. Dabei gehen wir folgenden Fragen nach:

- Wie kann THz-Strahlung modelliert und der Messvorgang simuliert werden?
- Welche physikalischen Effekte dominieren bei der Interaktion der THz-Strahlung mit Objekten aus Kunststoff?
- Wie kann ein Kompromiss zwischen detaillierter Modellierung und Effizienz ausschauen?
- Welche Aussagen können zur Konvergenz des neuen Verfahrens getroffen werden?
- Kann der Algorithmus anhand von synthetischen und realen Messdaten validiert werden?
- Welche Verbesserungen bringt die modifizierte ART im Vergleich zu herkömmlichen Verfahren der Computertomographie (gefilterte Rückprojektion und ART) bei der Rekonstruktion aus THz-Daten?

Kapitel 2

THz-Tomographie als inverses Problem

In diesem Kapitel gehen wir auf die Grundlagen ein, welche für die modifizierte ART benötigt werden. Im ersten Abschnitt beginnen wir mit der Modellierung von THz-Strahlung und betrachten die Simulation des Messvorgangs. Da zwischen detaillierter Modellierung und effizienter Lösung ein Kompromiss gefunden werden soll, schließt das Kapitel mit der Vorstellung der dominanten physikalischen Effekte und der im Rekonstruktionsalgorithmus benötigten Gesetze, dem Snelliusschen Brechungsgesetz und den Fresnelschen Formeln. Der zweite Abschnitt liefert die mathematischen Grundlagen, die für die Lösung des inversen Problems der THz-Tomographie und die Entwicklung des Rekonstruktionsalgorithmus notwendig sind.

2.1. Physikalische Grundlagen

Als erstes befassen wir uns mit der Modellierung von THz-Strahlung und stellen die nötigen physikalischen Grundlagen für das bei der Rekonstruktion verwendete Modell für die THz-Tomographie bereit. Das Kapitel orientiert sich inhaltlich an LITTAU, TEPE ET AL. [77], behandelt dabei aber hier relevante Grundlagen ausführlicher. Die nachfolgend betrachteten Modelle und Simulationen mit partiellen Differentialgleichungen dienen in erster Linie der Motivation des letztendlich verwendeten Modells, weshalb wir auf eine tiefer gehende Behandlung der Theorie und Numerik partieller Differentialgleichungen verzichten und dafür z. B. auf BRAESS [15] oder GROSSMANN [44] verweisen.

2.1.1. Modellierung von THz-Strahlung

Wir wenden uns der Modellierung von THz-Strahlung mit Hinblick auf den hier verwendeten Messvorgang zu. Zunächst möchten wir unsere Messdaten mit der gesuchten Größe in der THz-Tomographie in Verbindung bringen. Dazu betrachten

wir in diesem Kapitel den allgemeinen dreidimensionalen Fall, während wir die späteren Simulationen und Rekonstruktionen im Zweidimensionalen durchführen.

Ziel der THz-Tomographie ist die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex $\tilde{n} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$\tilde{n}(x) = n(x) + i\kappa(x), \quad x \in \Omega$$

auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Des Weiteren sei \tilde{n} auf Ω beschränkt und verschwinde außerhalb von Ω in dem Sinne, dass $n(x) - 1 = 0$ und $\kappa(x) = 0$ für $x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega$. Als Messdaten stehen, basierend auf der Phasen- und der Amplitudeninformation des Signals, der Transmissionsgrad

$$\tau = \frac{I}{I_0} = \frac{|E|^2}{|E_0|^2}$$

und die Laufzeitverzögerung $\Delta T = T - T_0$ bzw. der im weiteren Verlauf verwendete Wegunterschied

$$d = c_0(T - T_0) = c_0\Delta T$$

zur Verfügung, siehe dazu auch die Abbildung 0.1 aus der Einleitung. Hierbei ist I_0 die Anfangsintensität, I die Intensität am Detektor, T_0 die Laufzeit ohne und T die Laufzeit mit Objekt im Strahlengang und $c_0 = 299792458$ m/s die Lichtgeschwindigkeit. E und E_0 geben die Amplitude des elektrischen Feldes mit bzw. ohne Probekörper im Strahlengang an.

Die Wechselwirkung zwischen THz-Strahlung und Materie lässt sich, wie bei anderen elektromagnetischen Wellen, allgemein mit den Maxwell-Gleichungen beschreiben. Eine ausführliche Behandlung der Maxwell-Gleichungen ist z. B. in [14, S. 1 ff.] und [81, S. 40 ff.] zu finden. Aus den Maxwell-Gleichungen kann zunächst die Wellengleichung und aus dieser die Helmholtz-Gleichung abgeleitet werden, welche wir hier als Modell für THz-Strahlung verwenden werden. Für die Beschreibung der Ausbreitung von Wellen benutzen wir die skalare Wellengleichung

$$\Delta E(x, t) - \frac{1}{c_M^2(x)} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(x, t) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R} \quad (2.1)$$

mit dem zeit- und ortsabhängigen elektrischen Feld $E \in C^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R})$ und der Geschwindigkeit im Medium $c_M(x) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^+$. Mit der Wellengleichung lassen sich die Abschwächung und die Verzögerung des eingestrahnten Signals durch den Probekörper beschreiben.

Wir geben zunächst den Zusammenhang zwischen den Messdaten und der gesuchten Größe \tilde{n} an. Der Realteil von \tilde{n} ist als das Verhältnis von c_0 zur Ausbreitungsgeschwin-

digkeit im Medium c_M festgelegt:

$$n(x) = \frac{c_0}{c_M(x)}, \quad x \in \Omega, \quad c_M > 0.$$

Damit ist der physikalische Zusammenhang zu den Messdaten für den Realteil von \tilde{n} die (verzögerte) Laufzeit bzw. der Wegunterschied. Der Imaginärteil, der sog. Extinktionskoeffizient,

$$\kappa(x) = \alpha(x) \frac{c_0}{4\pi f}, \quad x \in \Omega, \quad f > 0$$

beschreibt die Abschwächung der Amplitude des elektrischen Feldes mit dem Absorptionskoeffizienten α in cm^{-1} und der Frequenz f in Hz.

Der gemessene Transmissionsgrad τ gibt den Anteil der vom Probekörper durchgelassenen Strahlung an und ist somit mit dem Absorptionskoeffizienten verbunden. So kann die Abschwächung von I_0 beim Durchqueren eines Objektes entlang einer Geraden L mit dem Absorptionskoeffizienten durch das Lambert-Beersche Gesetz

$$I(x) = I_0 e^{-\int_L \alpha(x) dx}$$

beschrieben werden (vgl. [27, S. 223]). Das Lambert-Beersche Gesetz wird auch in der Computertomographie verwendet und stellt dort den Zusammenhang zwischen abgeschwächter Intensität und Objektdichte her (siehe Kapitel 2.2.2).

Wir können die Wellengleichung vereinfachen, indem wir eine harmonische Zeitabhängigkeit voraussetzen, d. h. das elektrische Feld lässt sich durch

$$E(x, t) = E(x) e^{i\omega t}, \quad x \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R} \quad (2.2)$$

mit der Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$ darstellen. Setzen wir den Ansatz (2.2) in die Wellengleichung (2.1) ein, erhalten wir mit $c_M(x) = c_0/n(x)$ und der Kreiswellenzahl $k = \omega/c_0$ die Helmholtz-Gleichung

$$\Delta E(x) + n^2(x) k^2 E(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (2.3)$$

Wir verwenden das Modell (2.3), um in Kapitel 2.1.3 die physikalischen Effekte zu betrachten, die beim Auftreffen von THz-Strahlung auf ein Testobjekt auftreten können (bis auf die Laufzeitverzögerung des Signals).

Die Strahlung aus der THz-Quelle wird über Linsen auf das Objekt fokussiert. Der dabei entstehende Strahl verhält sich ähnlich wie ein Laserstrahl und weist daher sowohl Strahl- als auch Wellencharakter auf. Daher kann die Strahlung einer THz-Quelle im Vakuum, d. h. ohne Probekörper im Strahlweg und $\tilde{n}(x) = 1, x \in \mathbb{R}^3$, im Idealfall mit einem Gauß-Strahl modelliert werden (siehe z. B. [77, 94]). Namensgebend

ist, dass das transversale Amplitudenprofil senkrecht zur Ausbreitungsrichtung durch Gauß-Kurven approximiert werden kann (siehe Abbildung 2.1a). Der Gauß-Strahl ist eine spezielle Lösung der paraxialen Helmholtz-Gleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} - 2i k \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \right) E(x) = 0$$

mit $x = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$, bei der wir annehmen, dass die Veränderung von E in der \tilde{z} -Richtung vernachlässigbar ist, also $\frac{\partial^2 E}{\partial \tilde{z}^2} \approx 0$ gilt. In Zylinderkoordinaten mit $\tilde{r}^2 = \tilde{x}^2 + \tilde{y}^2$ lässt sich der Gauß-Strahl analytisch wie folgt angeben:

$$E(\tilde{r}, \tilde{z}) = E_0 \frac{w_0}{w(\tilde{z})} e^{-\left(\frac{\tilde{r}}{w(\tilde{z})}\right)^2} e^{-k \frac{\tilde{r}^2}{2R(\tilde{z})} i} e^{(-k\tilde{z} + \zeta(\tilde{z}))i} \quad (2.4)$$

mit der Amplitude des elektrischen Feldes $E_0 = E(0, 0)$ im Ursprung, dem Strahlradius $w(\tilde{z})$, der Strahltaile $w_0 = w(0)$, dem Krümmungsradius $R(\tilde{z})$ und der sog. Gouy-Phase $\zeta(\tilde{z})$. Für die Herleitung des Gauß-Strahls verweisen wir auf z. B. DAVIS [25].

Die Ausbreitungsrichtung verläuft hierbei entlang der \tilde{z} -Achse und der Gauß-Strahl ist an der Strahltaile mit der Breite $2w_0$ bei $\tilde{z} = 0$ fokussiert. Der Bereich $-\tilde{z}_0 \leq \tilde{z} \leq \tilde{z}_0$ um die Strahltaile heißt „Rayleighzone“ mit der Rayleigh-Länge $\tilde{z}_0 = \pi w_0^2 / \lambda$. In diesem Bereich erfährt der Gauß-Strahl seine größte Änderung und verdoppelt im Vergleich zur Strahltaile seine Querschnittsfläche. Für $\tilde{z} \ll \tilde{z}_0$ ändert sich die Wellenfront dagegen nur geringfügig und es werden nahezu ebene Wellenfronten erreicht. Je stärker der Gauß-Strahl fokussiert wird, desto kürzer ist die Rayleighzone und damit der Bereich der nahezu ebenen Wellenfronten. Der Gauß-Strahl wird durch die Rayleigh-Länge \tilde{z}_0 und dem minimalen Strahlradius w_0 vollständig charakterisiert. Alternativ kann auch die Wellenlänge λ vorgegeben werden und es reicht die Angabe eines weiteren Parameters. Der Strahlradius $w(\tilde{z})$ gibt den Abstand zur \tilde{z} -Achse an bei dem die Amplitude auf $1/e$ gefallen ist. Dabei nimmt der Strahlradius

$$w(\tilde{z}) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\tilde{z}}{\tilde{z}_0}\right)^2}$$

mit zunehmenden Abstand von der Taile zu. Der Krümmungsradius der Wellenfronten wird durch $R(\tilde{z}) = \tilde{z}(1 + (\tilde{z}_0/\tilde{z})^2)$ angegeben. Somit geht der Krümmungsradius an der Strahltaile für $\tilde{z} = 0$ gegen unendlich und ebene Wellenfronten werden erreicht. Der Verlauf des Strahlradius nähert sich für $\tilde{z} \gg \tilde{z}_0$ einer Geraden. Wie stark sich der Gauß-Strahl transversal ausdehnt lässt sich mit der Divergenz $\Theta = \arctan(w(\tilde{z})/\tilde{z})$ beschreiben. Die Divergenz des Strahls ist umso größer, desto schmaler die Strahltaile gewählt wird. Die Gouy-Phase $\zeta(\tilde{z}) = \arctan(\tilde{z}/\tilde{z}_0)$ lässt im Bereich der Strahltaile den

Abstand zwischen den Wellenfronten anwachsen. Dadurch eilt der Gauß-Strahl nach dem Durchlaufen seiner Taille einer ebenen Welle um eine halbe Wellenlänge voraus (vgl. [72]). Die verschiedenen Parameter sind auch der Abbildung 2.1b zu entnehmen.

Zusammenfassend entspricht der erste Faktor in Gleichung (2.4) der transversalen Amplitudenverteilung, während der zweite Faktor die kugelförmige Krümmung der Wellenfronten und der letzte die Phasenentwicklung entlang der \tilde{z} -Achse beschreibt (vgl. [81, S. 48 ff.]).

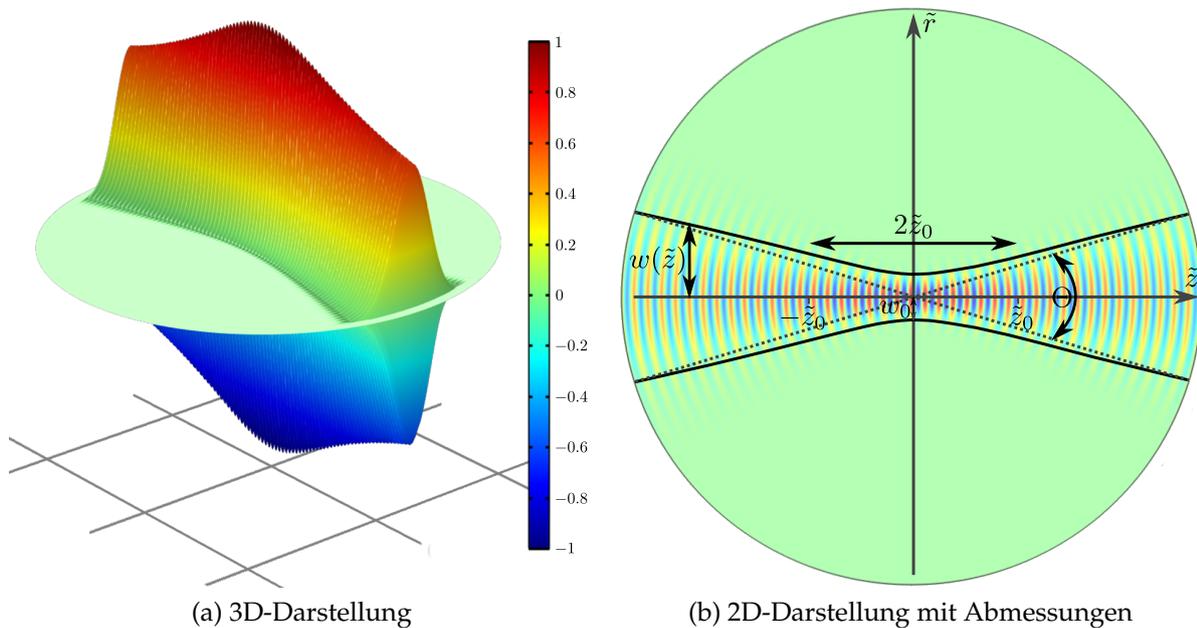


Abbildung 2.1.: Gauß-Strahl

2.1.2. THz-Tomographie-System

Wir beschreiben nun kurz den verwendeten THz-Tomographen. Für eine ausführlichere Beschreibung des Tomographen verweisen wir auf LITTAU ET AL. [75, 76] und LITTAU, TEPE ET AL. [77].

Die Messungen wurden am Süddeutschen Kunststoff-Zentrum (SKZ, Würzburg) aufgenommen. Dazu wurde ein THz-System entwickelt, welches nach dem FMCW-Prinzip arbeitet (engl. „frequency modulated continuous wave“, d. h. die Arbeitsweise entspricht der eines frequenzmodulierten Dauerstrich-Radars). Die Frequenz des THz-Signals bewegt sich entlang einer Sägezahnschwingung zwischen 0.07 und 0.11 THz und ermöglicht somit Messungen der Amplitude und der Phase aus der sich Transmissionsgrad und Laufzeitverzögerung bzw. Wegunterschied ergeben. Die

Dispersion kann im betrachteten Frequenzband vernachlässigt und der komplexe Brechungsindex als konstant angenommen werden (vgl. [71, 92]). Daher werden der Transmissionsgrad und die Laufzeit über den Frequenzbereich gemittelt. Das optische System besteht aus zwei Linsen und ähnelt der Architektur eines Kepler-Teleskops. Der Vorteil von diesem Aufbau gegenüber der Verwendung nur einer Linse ist, dass Größe und Position der Strahltaile des Gauß-Strahls voneinander entkoppelt sind, was die Justage der Optik vereinfacht.

Ein Probekörper kann über eine Translationsschiene, auf der eine Rotationseinheit montiert ist, verschoben und gedreht werden (siehe Abbildung 2.2). Sender und Empfänger sind auf einem Rahmen montiert, welcher in der Höhe verstellbar ist. Die maximale Ausdehnung eines Probekörpers ist kreisförmig und auf 140 mm begrenzt. Der Gauß-Strahl wird mit einer Strahltaile von ca. $w_0 = 4$ mm, also einem Strahldurchmesser von 8 mm, auf das Objekt fokussiert. Damit ergibt sich eine Rayleigh-Länge von ca. 15 mm bei 0.09 THz. Probekörper, die einen Durchmesser von $2z_0 = 30$ mm nicht überschreiten, werden von dem Teil des Gauß-Strahls bestrahlt, der näherungsweise einer ebenen Welle entspricht. Die Strahltaile begrenzt darüber hinaus die mögliche laterale Auflösung bei Verwendung von THz-Wellen, welche deutlich geringer ausfällt als bei Röntgenstrahlen.

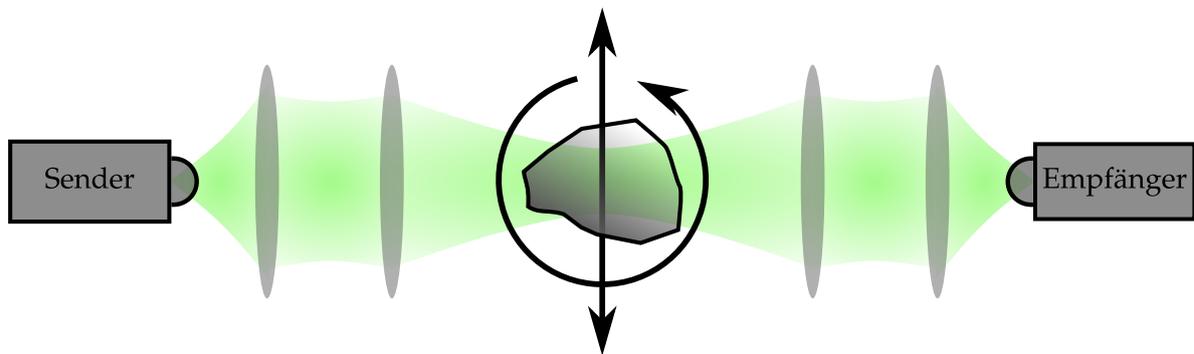


Abbildung 2.2.: Aufbau zur Durchführung tomographischer Messungen

2.1.3. Simulationen mit der Helmholtz-Gleichung

Um eine effiziente Rekonstruktion zu ermöglichen, verzichten wir beim in Kapitel 3 vorgestellten Algorithmus auf eine Modellierung basierend auf partiellen Differentialgleichungen. Stattdessen möchten wir nur die dominanten physikalischen Effekte berücksichtigen. Um die Auswahl der berücksichtigten physikalischen Effekte zu motivieren, werden wir den Messvorgang bei der THz-Tomographie mithilfe der Helmholtz-Gleichung für den zweidimensionalen Fall simulieren.

Für die Simulation der Wechselwirkung zwischen THz-Strahlung und einem Probekörper, betrachten wir die skalare Helmholtz-Gleichung

$$\Delta E(x) + \tilde{n}(x)^2 k^2 E(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^2.$$

Das elektrische Feld $E : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ lässt sich nach dem Huygensschen Prinzip (Superposition, siehe z. B. [14]) in die einfallende Welle E_0 und die gestreute Welle E_s aufteilen

$$E = E_0 + E_s.$$

Das eingestrahelte Feld E_0 ist uns bekannt. Hierbei handelt es sich um das elektrische Feld ohne Probekörper im Strahlengang, welches wir analytisch durch den Gauß-Strahl (2.4) vorgeben können. Die Helmholtz-Gleichung wird dann mit geeigneten Randbedingungen nur nach dem gestreuten Feld E_s gelöst. Um eine eindeutige Lösung der Helmholtz-Gleichung zu erhalten, wird die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung im Unendlichen definiert. Die Lösung $E(x)$ der Helmholtz-Gleichung heißt abstrahlende Lösung, wenn sie die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2} \left(\frac{\partial}{\partial r} + i\tilde{n}k \right) E(x) = 0, \quad r = |x|, \quad x \in \mathbb{R}^2$$

gleichmäßig in alle Richtungen $x/|x|$ erfüllt. Die Bedingung besagt, dass sich die betrachteten Wellen im Unendlichen wie auslaufende Kugelwellen verhalten (vgl. [99]).

Wir lösen die Helmholtz-Gleichung mithilfe der Finite-Elemente-Methode (FEM) mit der Software Comsol Multiphysics. Für weitere Details zur FEM verweisen wir auf z. B. BRAESS [15]. Die FEM benötigt für die Diskretisierung ein endliches Gebiet Ω , welches von der Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung aber nicht vorgesehen ist. Wir schränken daher das Gebiet künstlich auf eine Kreisscheibe

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x\| < \mathfrak{R}\}$$

mit dem Radius $\mathfrak{R} > 0$ ein. Diese künstliche Begrenzung muss derart modelliert werden, dass beliebige Wellen das betrachtete Gebiet ohne Rückreflexionen verlassen können. Dies geschieht hier durch die Verwendung der sog. „Perfectly matched layers“ (PML). PML sind künstliche, absorbierende Schichten für Wellengleichungen und entsprechen einer numerischen Version der Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung. Sie verhindern Rückreflexionen vom äußeren Rand des betrachteten Gebietes. In JIN [58, S. 375 ff.] und BERENGER [11] wird näher auf die numerische Umsetzung von PML eingegangen. In Comsol Multiphysics sind PML bereits implementiert und werden somit auch für die folgenden Simulationen verwendet.

Die Intensität und damit der Transmissionsgrad $\tau = I/I_0 = |E|^2/|E_0|^2$ können durch

die Auswertung des elektrischen Feldes, d. h. der Lösung E der Helmholtz-Gleichung, bestimmt werden. Hierzu wird an der Empfängerposition auf einer Wellenlänge der maximale Wert von $|E|^2$ und $|E_0|^2$ bestimmt. Die Abbildung 2.3a zeigt die Lösung E bei der Bestrahlung eines rechteckigen Probekörpers aus Polyethylen (PE).

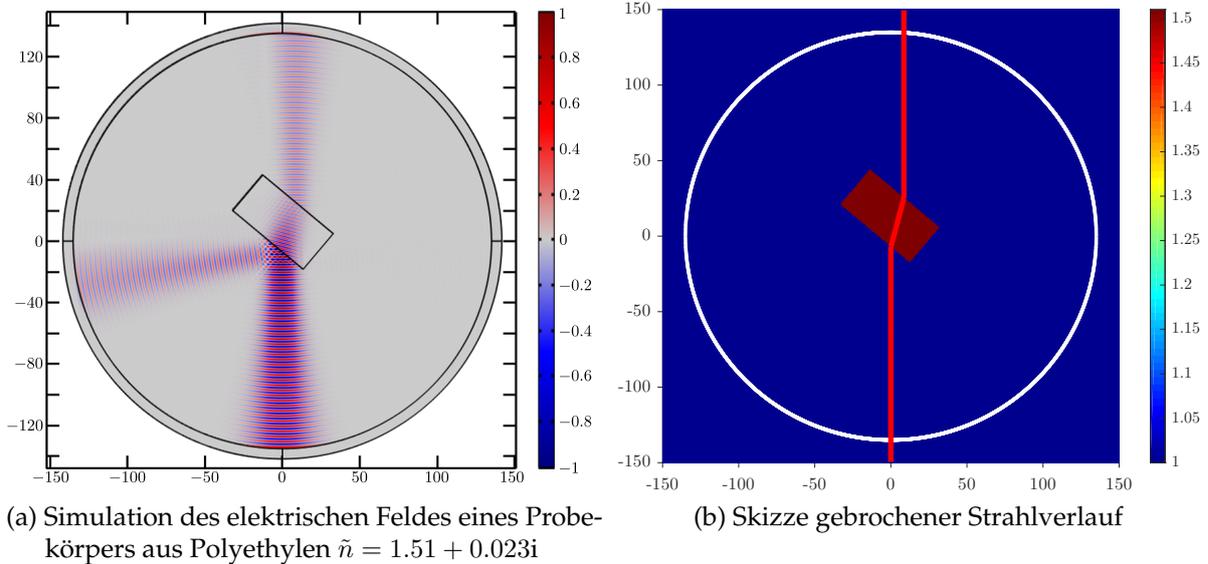


Abbildung 2.3.: THz-Strahlung, die bei $f = 0.09$ THz von unten nach oben propagiert, als Simulation mit der Helmholtz-Gleichung (links) und entlang gebrochener Strahlen (rechts)

In Abbildung 2.4 vergleichen wir den simulierten und den gemessenen Transmissionsgrad eines Probekörpers bestehend aus einem PE-Block. Der Messvorgang für den Transmissionsgrad kann gut durch Simulationen mit der Helmholtz-Gleichung beschrieben werden.

Aus Abbildung 2.3a gehen die wesentlichen physikalischen Effekte hervor:

- Dämpfung der Strahlung, Absorptionsverluste (siehe Kapitel 2.2.2),
- Brechung an den Grenzflächen (siehe Kapitel 2.1.4),
- Reflexionsverluste (siehe Kapitel 2.1.4),
- Gaußsches Strahlprofil.

Eine geringere Rolle spielen Streuung und Beugung, welche hier der Vollständigkeit halber erwähnt werden sollen. Aufgrund der Annahme der harmonischen Zeitabhängigkeit kann ein Rekonstruktionsalgorithmus basierend auf der Helmholtz-Gleichung die gemessenen Laufzeiten bzw. Wegunterschiede nicht auswerten. Für die Verwendung von Transmissionsgrad und Wegunterschied müsste also die Wellengleichung

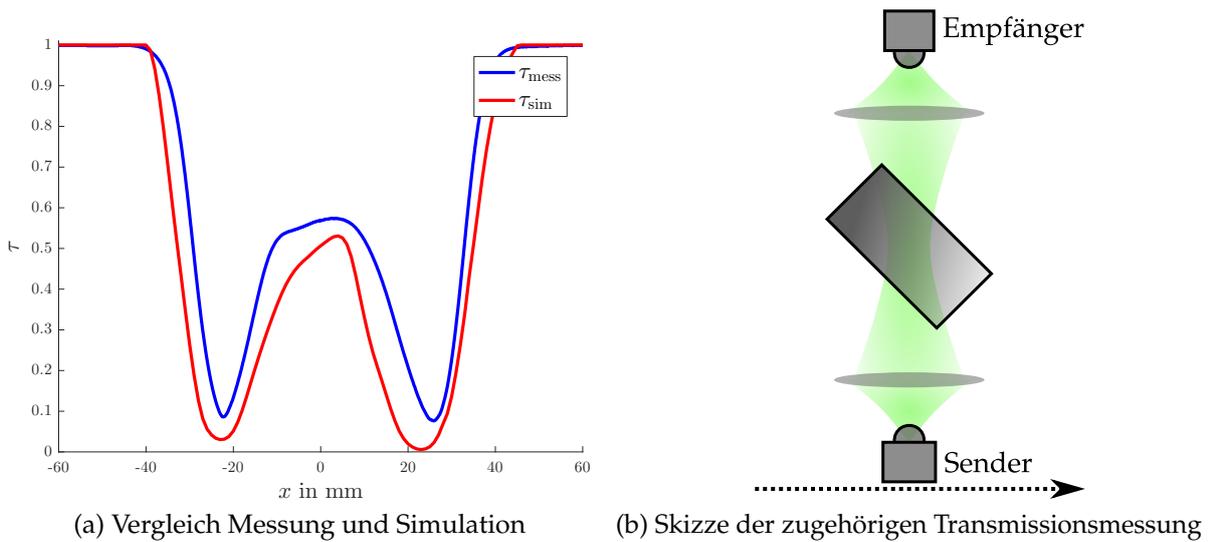


Abbildung 2.4.: Vergleich simulierter und gemessener Transmissionsgrad (vgl. LITTAU, TEPE ET AL. [77])

verwendet werden, was zu einem rechenintensiven Rekonstruktionsalgorithmus führen würde.

Wir stellen in Kapitel 3 dagegen einen Rekonstruktionsalgorithmus für die THz-Tomographie vor, welcher stattdessen auf Integralgleichungen basiert (siehe Kapitel 2.2.2) und dabei Absorptionsverluste, Brechung an den Grenzflächen und Reflexionsverluste berücksichtigen wird. Das Gaußsche Strahlprofil werden wir vernachlässigen und nehmen somit aus Effizienzgründen einen Modellierungsfehler in Kauf. Für die spätere Rekonstruktion betrachten wir gebrochene Strahlwege, wie sie in Abbildung 2.3b skizziert sind. Ein Vergleich mit Abbildung 2.3a zeigt, dass beide Modelle entlang sehr ähnlicher Strahlwege propagieren und sich der Modellierungsfehler damit hauptsächlich auf das vereinfachte Strahlprofil beschränkt.

2.1.4. Snelliussches Brechungsgesetz und Fresnelsche Reflexionsverluste

Wir gehen auf zwei physikalische Gesetze ein, welche das Verhalten von ebenen Wellen an ebenen Grenzflächen zwischen zwei (homogenen) Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes n_1 und n_2 beschreiben. Der Annahme von ebenen Wellen genügen wir insofern, dass die Gauß-Strahlen im fokussierten Bereich, mit dem das Objekt beleuchtet wird, nahezu eben sind. Die betrachteten Grenzflächen des Probekörpers werden als nicht zu zerklüftet angenommen. Wir halten uns an den Ausführungen von BORN UND WOLF in [14, S. 36 ff.].

Die Ausbreitungsrichtung einer ebenen Welle sei durch den Richtungsvektor ω^\perp festgelegt, der senkrecht auf der Wellenfront der ebenen Welle steht. Die Richtungsänderung der Ausbreitungsrichtung des transmittierten Anteils der THz-Strahlung lässt sich mit dem Snelliusschen Brechungsgesetz

$$n_1 \sin \gamma_1 = n_2 \sin \gamma_2 \quad (2.5)$$

bestimmen. Der Einfallswinkel γ_1 und der Brechungswinkel γ_2 werden zu der Oberflächennormalen n der Grenzfläche hin gemessen (siehe Abbildung 2.5). Die Ebene, welche durch den Richtungsvektor und der Normalen aufgespannt wird, heißt Einfallsebene. Beim Übergang von einem optisch dichteren zu einem dünneren Medium kommt es, für hinreichend große γ_1 , zur Totalreflexion. In diesem Fall gilt

$$\frac{n_1}{n_2} \sin \gamma_1 > 1, \text{ falls } n_1 > n_2.$$

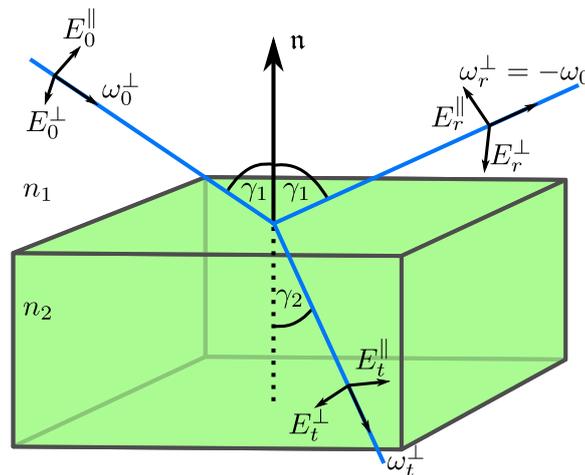


Abbildung 2.5.: Skizze Snelliussches Brechungsgesetz und Fresnelsche Formeln mit der Normalen n auf der Grenzfläche, den Amplitudenvektoren E^\parallel parallel bzw. E^\perp senkrecht zur Einfallsebene und den Ausbreitungsrichtungen ω^\perp mit den Indizes $0, r, t$ für den einfallenden, reflektierten und transmittierten Strahl und $n_1 < n_2$

Der reflektierte Anteil der Strahlung kann durch die Fresnelschen Formeln mithilfe des Reflexionsgrades beschrieben werden. Die Reflexionsverluste hängen von der Polarisation der einfallenden Welle und $\gamma_1, \gamma_2, \tilde{n}_1$ und \tilde{n}_2 ab. Wir betrachten hier den Fall für nicht magnetische Materialien. Bei paralleler Polarisation schwingt die

elektrische Komponente in der Einfallsebene. In diesem Fall gilt für den Reflexionsgrad

$$\rho = \frac{|E_r^{\parallel}|^2}{|E_0^{\parallel}|^2} = \left| \frac{\tilde{n}_2 \cos \gamma_1 - \tilde{n}_1 \cos \gamma_2}{\tilde{n}_2 \cos \gamma_1 + \tilde{n}_1 \cos \gamma_2} \right|^2$$

mit den elektrischen Feldstärken E_0^{\parallel} und E_r^{\parallel} des einfallenden bzw. reflektierten Teilstrahls. Der Reflexionsgrad gibt das Verhältnis zwischen reflektierter und einfallender Intensität an. Wird der THz-Strahl linear senkrecht zur Einfallsebene polarisiert, die elektrische Feldstärke schwingt also senkrecht zur Einfallsebene, so gilt

$$\rho = \frac{|E_r^{\perp}|^2}{|E_0^{\perp}|^2} = \left| \frac{\tilde{n}_1 \cos \gamma_1 - \tilde{n}_2 \cos \gamma_2}{\tilde{n}_1 \cos \gamma_1 + \tilde{n}_2 \cos \gamma_2} \right|^2. \quad (2.6)$$

Alle weiteren Polarisierungen können durch die Superposition von linear senkrecht und linear parallel polarisierten Wellen dargestellt werden.

Bemerkung 2.1. Das Snelliussche Brechungsgesetz lässt sich nur für schwach absorbierende Medien anwenden, d. h. für $\kappa \ll n$ (vgl. [41, S. 342]). Andernfalls muss der Absorptionskoeffizient berücksichtigt werden. Die betrachteten Kunststoffe sind allerdings alle im Bereich um 0.1 THz schwach absorbierend (siehe z. B. [59, 92]), sodass wir das Brechungsgesetz in obiger Form verwenden können. Auch bei der Berechnung des Reflexionsgrades treten lediglich vernachlässigbare Fehler auf, wenn wir den Imaginärteil nicht berücksichtigen, weshalb wir zukünftig ρ anhand von $\text{Re}(\tilde{n})$ berechnen. Eine Ausnahme bildet Wasser: CHRZANOWSKI ET AL. [21] konnten im Bereich um 0.1 THz einen Brechungsindex von ca. $n = 2.5$ und einen Absorptionskoeffizienten von $\alpha = 100 \text{ cm}^{-1}$ bestimmen.

2.2. Mathematische Grundlagen

Als nächstes beschreiben wir die innerhalb dieser Arbeit notwendigen mathematischen Grundlagen. Hierbei gehen wir zunächst auf die Theorie inverser Probleme in Hinblick auf iterative Verfahren ein. Anschließend behandeln wir die zweidimensionale Radon-Transformation und geben darauf aufbauend das mathematische Modell und das inverse Problem der 2D-THz-Tomographie an. Der Rekonstruktionsalgorithmus für die THz-Tomographie basiert auf der algebraischen Rekonstruktionstechnik, welche danach ausführlich vorgestellt wird. Für die Konvergenzbetrachtungen zu der modifizierten ART benötigen wir Konvergenzraten von der klassischen ART und einige Abschätzungen aus der Störungstheorie zu der Methode der kleinsten Quadrate, mit denen wir dieses Kapitel abschließen werden.

2.2.1. Inverse Probleme

Hier befassen wir uns mit einigen nützlichen Grundlagen aus der Theorie inverser Probleme. Dazu gehören neben der Regularisierung mit iterativen Verfahren und Konvergenzraten unter Zuhilfenahme von Quellbedingungen, auch die Auswirkungen der Schlechtgestellttheit auf die Lösung linearer Gleichungssysteme. Dieser Abschnitt basiert hauptsächlich auf den Monographien von LOUIS [78] und RIEDER [96]. Weitere Quellen neben diesen werden wie gewohnt aufgeführt.

In unserem Fall besteht das inverse Problem in dem Schluss von Transmissionsgrad und Wegunterschied auf den komplexen Brechungsindex. Der Zusammenhang zwischen Ursache und Wirkung lässt sich durch die Gleichung

$$Af = g \tag{2.7}$$

beschreiben, in der eine Abbildung $A : X \rightarrow Y$, das mathematische Modell, von der Menge der Ursachen X in die Menge der Wirkungen Y abbildet. Das direkte Problem besteht nun in der Bestimmung der Wirkung aus der Ursache, also der Berechnung von Af für $f \in X$. Hierfür benötigen wir eine möglichst genaue Beschreibung des Modells A . Die Simulationen des Messvorgangs mit THz-Strahlen in Kapitel 2.1.3 sind typische direkte Probleme. Dagegen suchen wir bei einem inversen Problem zu einer Wirkung $g \in Y$ die Ursache $f \in X$, sodass Gleichung (2.7) erfüllt ist.

Inverse Probleme von praktischer Relevanz sind i. d. R. schlecht gestellt, das bedeutet, dass mindestens eine der folgenden, von HADAMARD [47] eingeführten, Bedingungen verletzt wird.

Definition 2.2. Sei $A : X \rightarrow Y$ mit topologischen Räumen X und Y . Das Problem (A, X, Y) heißt *gut gestellt*, wenn

- (a) $Af = g$ für jedes $g \in Y$ eine Lösung hat,
- (b) diese Lösung eindeutig ist,
- (c) die inverse Abbildung $A^{-1} : Y \rightarrow X$ stetig ist, die Lösung f also stetig von den Daten g abhängt.

Ist eine der Bedingungen nicht erfüllt, so heißt das Problem *schlecht gestellt*.

Die Verletzung der Punkte (a) und (b) kann durch eine Verallgemeinerung des Lösungsbegriffs umgangen werden. Ist A aufgrund der Schlechtgestellttheit nicht invertierbar, kann hierzu die *verallgemeinerte Inverse* A^\dagger eingeführt werden. Teil (c) bleibt aber weiterhin kritisch und erfordert eine Regularisierung von A^\dagger .

Wir führen zunächst einige Bezeichnungen und Notationen ein. Im Folgenden beschränken wir uns auf stetig lineare Abbildungen zwischen Hilberträumen X und Y ,

d. h. $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ mit

$$\mathcal{L}(X, Y) := \{A : X \rightarrow Y : A \text{ linear und stetig, d. h. } \|A\| := \sup_{\|f\|_X=1} \|Af\|_Y < \infty\}$$

und bezeichnen die zugehörigen Skalarprodukte mit $\langle \cdot, \cdot \rangle_X, \langle \cdot, \cdot \rangle_Y$ und die Normen mit $\|\cdot\|_X, \|\cdot\|_Y$. Des Weiteren bezeichne

$$\mathcal{N}(A) = \{f \in X : Af = 0\} \quad \text{und} \quad \mathcal{R}(A) = \{g = Af : f \in X\}$$

den Nullraum bzw. den Bildraum von A . Der zu $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ eindeutig bestimmte Operator $A^* \in \mathcal{L}(Y, X)$ mit

$$\langle A^*g, f \rangle_X = \langle g, Af \rangle_Y, \quad \text{für alle } f \in X \text{ und alle } g \in Y$$

heißt der zu A adjungierte Operator.

Satz 2.3. *Seien X und Y Hilberträume und $A \in \mathcal{L}(X, Y)$. Dann gelten folgende Identitäten:*

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

Beweis. Siehe z. B. [23]. □

Für einen abgeschlossenen Teilraum $U \subset X$ eines Hilbertraums X sei $\mathcal{P}_U : X \rightarrow X$ die Orthogonalprojektion von X auf U . Orthogonalprojektionen haben die Eigenschaften

$$\mathcal{P}_U = \mathcal{P}_U^2 = \mathcal{P}_U^*, \quad \mathcal{P}_{U^\perp} = I - \mathcal{P}_U, \quad \text{und} \quad \|\mathcal{P}_U\| = 1,$$

wobei I die identische Abbildung bezeichne. Eine Lösung von (2.7) existiert nur für $g \in \mathcal{R}(A)$. Wir werden nun den Lösungsbegriff für weitere $g \in Y$ erweitern, um damit den Punkten (a) und (b) von Definition 2.2 zu genügen. Daher betrachten wir Elemente $f \in X$, welche das Residuum minimieren und wie folgt charakterisiert sind:

Satz 2.4. *Seien $g \in Y$ und $A \in \mathcal{L}(X, Y)$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent.*

- (a) $f \in X$ erfüllt $Af = \mathcal{P}_{\overline{\mathcal{R}(A)}}g$.
- (b) $f \in X$ minimiert das Residuum $\|Af - g\|_Y \leq \|A\varphi - g\|_Y$ für alle $\varphi \in X$.
- (c) $f \in X$ löst die Normalgleichung

$$A^*Af = A^*g. \tag{2.8}$$

Beweis. Siehe [53]. □

Lemma 2.5. Sei $g \in Y$. Dann gelten:

- (a) Die Menge der Lösungen der Normalgleichung $\mathbb{L}(g) = \{\varphi \in X : A^*A\varphi = A^*g\}$ ist genau dann nicht leer, wenn $g \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$.
- (b) Für $g \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$ enthält $\mathbb{L}(g)$ ein eindeutig bestimmtes Element f^\dagger mit minimaler Norm,

$$\|f^\dagger\|_X < \|\varphi\|_X \text{ für alle } \varphi \in \mathbb{L}(g) \setminus \{f^\dagger\}$$

Beweis. Siehe z. B. RIEDER [96]. □

Definition 2.6. Die Abbildung $A^\dagger : \mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp \subset Y \rightarrow X$, die jedem $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ das eindeutig bestimmte Element f^\dagger minimaler Norm aus $\mathbb{L}(g)$ zuordnet, heißt *verallgemeinerte Inverse* von $A \in \mathcal{L}(X, Y)$. Das Element $f^\dagger = A^\dagger g$ heißt *Minimum-Norm-Lösung* von $Af = g$.

Die Lösung f^\dagger der Normalgleichung besitzt keinen Anteil im Nullraum von A .

Satz 2.7. Sei $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$, dann ist $f^\dagger = A^\dagger g$ die eindeutige Lösung der Normalgleichung $A^*Af = A^*g$ in $\mathcal{N}(A)^\perp$.

Beweis. Siehe LOUIS [78]. □

Aus der Menge $\mathbb{L}(g)$ haben wir willkürlich das Element mit der kleinsten Norm ausgewählt. Genauso denkbar wäre den Abstand zu einem bestimmten Element $f_0 \in X$ zu minimieren. Die zugehörige Lösung ist ebenfalls eindeutig bestimmt. Wir nennen sie f_0 -Minimum-Norm-Lösung und bezeichnen sie ebenfalls mit f^\dagger . Für die f_0 -Minimum-Norm-Lösung gilt

$$f^\dagger = A^\dagger g + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)} f_0. \quad (2.9)$$

Bei der Lösung inverser Probleme mit iterativen Verfahren hängt der Grenzwert der Iteration von der Wahl des Anfangswertes f_0 ab. So konvergiert die algebraische Rekonstruktionstechnik für den Startwert f_0 gegen die f_0 -Minimum-Norm-Lösung (siehe Satz 2.28).

Die nächsten beiden Sätze geben wichtige Eigenschaften der verallgemeinerten Inversen an.

Satz 2.8. Die verallgemeinerte Inverse A^\dagger von $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ hat die folgenden Eigenschaften.

- (a) $\mathcal{D}(A^\dagger) = Y$ genau dann, wenn $\mathcal{R}(A) = \overline{\mathcal{R}(A)}$.
- (b) $\mathcal{R}(A^\dagger) = \mathcal{N}(A)^\perp$.
- (c) A^\dagger ist linear.

(d) A^\dagger ist genau dann stetig, wenn $\mathcal{R}(A) = \overline{\mathcal{R}(A)}$.

Beweis. Siehe z. B. RIEDER [96]. □

Satz 2.9 (Moore-Penrose-Axiome). *Die verallgemeinerte Inverse A^\dagger von $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ ist eindeutig durch die vier Moore-Penrose-Axiome charakterisiert:*

$$AA^\dagger A = A, \quad A^\dagger AA^\dagger = A^\dagger, \quad A^\dagger A = \mathcal{P}_{\overline{\mathcal{R}(A^*)}}, \quad AA^\dagger = \mathcal{P}_{\overline{\mathcal{R}(A)}}.$$

Beweis. Siehe z. B. ENGL ET AL. [34]. □

Für schlecht gestellte Probleme (A, X, Y) haben wir durch die Einführung der verallgemeinerten Inverse A^\dagger die Punkte (a) und (b) von Satz 2.2 für $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ sicherstellen können. Punkt (c), die Stetigkeit der inversen Abbildung, bleibt allerdings weiterhin problematisch, da laut Satz 2.8 (d) A^\dagger nur stetig ist, falls $\mathcal{R}(A)$ abgeschlossen ist. Dies ist z. B. bei kompakten Operatoren nur für $\dim \mathcal{R}(A) < \infty$ der Fall, sodass wir im Allgemeinen eine Regularisierung von A^\dagger benötigen (vgl. [96, S. 27]).

Kompakte Operatoren

Kompakte Operatoren können als Verallgemeinerung endlichdimensionaler linearer Operatoren (Matrizen) auf unendlichdimensionale Räume aufgefasst werden. Da ihre verallgemeinerte Inverse unbeschränkt ist, wenn das Bild unendlichdimensional ist, sind Operatorgleichungen mit einem kompakten Operator Beispiele für schlechtgestellte Probleme.

Definition 2.10. Seien X und Y normierte Räume. Der lineare Operator $A : X \rightarrow Y$ heißt *kompakt* genau dann, wenn jede beschränkte Teilmenge U von X ein relativ kompaktes Bild unter A hat, d. h. \overline{AU} ist kompakt in Y .

Wir setzen

$$\mathcal{K}(X, Y) := \{A : X \rightarrow Y : A \text{ ist linear und kompakt}\}$$

und $\mathcal{K}(X) := \mathcal{K}(X, X)$. Die Ähnlichkeit mit Matrizen wird durch die Spektraleigenschaften kompakter Operatoren deutlich. Wir schreiben im Folgenden kurz $\mathbb{R}^+ := (0, \infty)$. So können wir für einen kompakten Operator die folgende Singulärwertzerlegung (SWZ) angeben:

Definition 2.11. Die Reihenentwicklung

$$Af = \sum_{j=1}^{\infty} \sigma_j \langle f, v_j \rangle_X u_j$$

heißt *Singulärwertzerlegung* von $A \in \mathcal{K}(X, Y)$ mit den monoton fallend angeordneten Singulärwerten σ_j und den singulären Funktionen bzw. Vektoren u_j und v_j . Die Menge von Tripeln

$$\{(\sigma_j; v_j, u_j) : j \in \mathbb{N}\} \subset \mathbb{R}^+ \times X \times Y$$

heißt *singuläres System* von A .

Mithilfe der Singulärwertzerlegung eines kompakten Operators können wir eine Glattheitsbedingung an die rechte Seite formulieren.

Satz 2.12 (Picard-Bedingung). *Sei $A : X \rightarrow Y$ ein kompakter Operator mit singulärem System $\{(\sigma_j; v_j, u_j)\}$. Ein Element $g \in \overline{\mathcal{R}(A)}$ liegt genau dann in $\mathcal{R}(A)$, wenn die Reihe*

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\langle g, u_j \rangle_Y|^2}{\sigma_j^2}$$

konvergiert.

Beweis. Siehe z. B. ENGL ET AL. [34]. □

Die Singulärwerte σ_j streben gegen 0 und damit $\sigma_j^{-2} \rightarrow \infty$ für $j \rightarrow \infty$. Damit die obige Reihe konvergiert, müssen die Fourier-Koeffizienten $\langle g, u_j \rangle_Y$ hinreichend schnell abfallen. Die Picard-Bedingung können wir auch als Konsistenzbedingung auffassen. So nennen wir $g \in Y$ *konsistent* genau dann, wenn g die Picard-Bedingung erfüllt und damit $g \in \mathcal{R}(A)$ ist.

Für die verallgemeinerte Inverse A^\dagger eines kompakten Operators A können wir ebenfalls eine Singulärwertzerlegung angeben.

Satz 2.13. *Sei $A \in \mathcal{K}(X, Y)$ mit singulärem System $\{(\sigma_j; v_j, u_j)\}$. Dann ist*

$$A^\dagger g = \sum_{j=1}^{\infty} \sigma_j^{-1} \langle g, u_j \rangle_Y v_j \quad \text{für } g \in \mathcal{D}(A^\dagger).$$

Hat A ein endlichdimensionales Bild, dann ist A^\dagger stetig.

Beweis. Siehe z. B. ENGL ET AL. [34]. □

Wir werden die SWZ im Rahmen der Regularisierung schlechtgestellter Probleme heranziehen.

Regularisierung schlecht gestellter Probleme

Wir beschäftigen uns nun mit der Regularisierung schlecht gestellter Probleme und folgen dabei im Wesentlichen der Darstellung in ENGL ET AL. [34, S. 49 ff.]. Dabei gehen wir auch auf Konvergenzraten unter Zuhilfenahme von Quellbedingungen ein, wie wir sie in Kapitel 2.2.4 bzw. 3.4 benötigen.

Eine Regularisierung von A^\dagger ist eine Familie $\{T_\gamma\}_{\gamma>0}$ von stetigen Operatoren $T_\gamma : Y \rightarrow X$, die punktweise auf $\mathcal{D}(A^\dagger)$ gegen A^\dagger konvergieren, d. h. für die

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} T_\gamma g = A^\dagger g$$

gilt. Ist A^\dagger nicht beschränkt, gilt $\|T_\gamma\| \rightarrow \infty$ für $\gamma \rightarrow 0$. Mithilfe der Regularisierung können wir (2.7) näherungsweise lösen. Durch Messfehler stehen uns nur verrauschte Daten g^δ zur Verfügung mit einem Rauschpegel δ , sodass

$$\|g - g^\delta\|_Y \leq \delta$$

gilt. Wir können nun die Näherungslösung $f_\gamma^\delta = T_{\gamma(\delta)} g^\delta$ berechnen. Bei Betrachtung des Rekonstruktionsfehlers

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

fällt auf, dass sich dieser durch einen Datenfehler $T_{\gamma(\delta)}(g^\delta - g)$ und einen Approximationsfehler $(T_{\gamma(\delta)} - A^\dagger)g$ abschätzen lässt. Wählen wir den Regularisierungsparameter $\gamma(\delta)$ derart, dass für $\delta \rightarrow 0$

$$\gamma(\delta) \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \|T_{\gamma(\delta)}\| \delta \rightarrow 0$$

ist, gilt für den Rekonstruktionsfehler

$$\|T_{\gamma(\delta)} g^\delta - A^\dagger g\|_X \leq \|T_{\gamma(\delta)}\| \delta + \|T_{\gamma(\delta)} g - A^\dagger g\|_X \rightarrow 0,$$

d. h. $T_{\gamma(\delta)} g^\delta$ approximiert A^\dagger dann gut, wenn g^δ nahe bei g liegt (vgl. NATTERER [84, S. 86]). Bei gestörten Daten gilt für den Rauschpegel $\delta > 0$ und somit kann der Rekonstruktionsfehler nicht beliebig klein werden. Vielmehr verhalten sich Daten- und Approximationsfehler gegensätzlich für $\gamma \rightarrow 0$. Während der Approximationsfehler aufgrund der punktweisen Konvergenz in diesem Fall ebenfalls gegen Null geht, wächst der Datenfehler stark an und Mess- und Rundungsfehler werden betont. Der Rekonstruktionsfehler steigt sowohl für $\gamma \rightarrow 0$ als auch für $\gamma \rightarrow \infty$ stark an, sodass ein geeignetes Gleichgewicht zwischen Daten- und Approximationsfehler gefunden werden muss, über das die Wahl des Regularisierungsparameters entscheidet. Diese

Überlegungen können wir in folgender Definition zusammenfassen:

Definition 2.14. Sei $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ und sei $\{T_\gamma\}_{\gamma>0}$ eine Familie stetiger Operatoren von Y nach X mit $T_\gamma 0 = 0$. Existiert eine Abbildung $\gamma : \mathbb{R}^+ \times Y \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \{\gamma(\delta, g^\delta) : g^\delta \in Y, \|g^\delta - g\|_Y \leq \delta\} = 0,$$

sodass für jedes $g \in \mathcal{R}(A)$

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \{\|T_{\gamma(\delta, g^\delta)} g^\delta - A^\dagger g\|_X : g^\delta \in Y, \|g^\delta - g\|_Y \leq \delta\} = 0$$

gilt, dann heißt $(\{T_\gamma\}_{\gamma>0}, \gamma)$ ein *Regularisierungsverfahren* (*Regularisierung*) für A^\dagger . Die Abbildung γ heißt *Parameterwahl(-strategie)*, der Wert $\gamma(\delta, g^\delta)$ *Regularisierungsparameter*.

Wir unterscheiden

- (a) *a priori Strategien*, die nur von δ abhängen,
- (b) *a posteriori Strategien*, die von δ und g^δ abhängen,
- (c) *heuristische Strategien*, die nur von g^δ abhängen.

Bei iterativen Verfahren kann anstatt $\gamma \in \mathbb{R}^+$ auch $\gamma \in D$ für eine diskrete Menge $D \subset \mathbb{R}^+$ gelten, wenn es nur eine Folge $\{\gamma_k\}_k \subset D$ gibt mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \gamma_k = 0$. Wir vertiefen hier nur die a priori Strategien, welche wir für die Konvergenzraten in Kapitel 2.2.4 benötigen. Darüber hinaus wird eine heuristische Strategie für die modifizierte ART in Kapitel 3.3.3 vorgestellt.

Satz 2.15. Sei $\{T_\gamma\}_{\gamma>0}$ eine Regularisierung von A^\dagger . Dann existiert eine a priori Strategie γ , sodass (T_γ, γ) ein Regularisierungsverfahren ist.

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Wir können a priori Parameterwahlen wie folgt charakterisieren:

Satz 2.16. Sei $\{T_\gamma\}_{\gamma>0}$ eine Regularisierung und $\gamma : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ eine a priori Strategie für jedes $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$. Dann ist (T_γ, γ) ein Regularisierungsverfahren genau dann, wenn gilt

- (a) $\lim_{\delta \rightarrow 0} \gamma(\delta) = 0$,
- (b) $\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \|T_{\gamma(\delta)}\|_{\mathcal{L}(X, Y)} = 0$.

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Die Bedingung (b) im obigen Satz bedeutet, dass γ nicht zu schnell im Verhältnis zu δ gegen null gehen darf, da $\|T_\gamma\|_{\mathcal{L}(X,Y)} \rightarrow \infty$ für $\gamma \rightarrow 0$. Daher haben a priori Strategien üblicherweise die Form $\gamma(\delta) = \delta^r$ für ein $r < 1$.

Wir sind bei der Betrachtung von Regularisierungsverfahren (T_γ, γ) oft an Konvergenzraten in der Form

$$\|T_\gamma g^\delta - A^\dagger g\|_X \leq \phi(\delta) \quad (2.10)$$

für eine Funktion $\phi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\lim_{\delta \rightarrow 0} \phi(\delta) = 0$ interessiert. Allerdings sind die (bestmöglichen) Konvergenzraten nur bei zusätzlichen Annahmen über die Lösung $f^\dagger = A^\dagger g$ (oder äquivalent über die exakten Daten g) zu erreichen und eng mit der Größe

$$\Omega(\delta, \mathcal{M}) := \sup\{\|f\| : f \in \mathcal{M}, \|Af\| \leq \delta\}$$

für Unterräume $\mathcal{M} \subseteq X$ und $\delta > 0$ verbunden. Im Allgemeinen kann $\Omega(\delta, \mathcal{M})$ unendlich sein, z. B. für unbeschränkte \mathcal{M} mit $\mathcal{M} \cap \mathcal{N}(A) \neq \{0\}$. Ist dagegen $\mathcal{M} \cap \mathcal{N}(A) = \{0\}$, so ist $\Omega(\delta, \mathcal{M})$ endlich, dann und nur dann, wenn A^\dagger stetig auf $A\mathcal{M}$ ist. So gilt z. B. $\Omega(\delta, \mathcal{M}) < \infty$, falls \mathcal{M} kompakt und $\mathcal{M} \cap \mathcal{N}(A) = \{0\}$ ist.

Jedes beliebige Verfahren zur Lösung von (2.7) kann in der allgemeinen Form $f = Tg$ mit $T : Y \rightarrow X$ geschrieben werden, wobei T nicht notwendigerweise linear sein muss. Uns interessiert der Rekonstruktionsfehler der schlimmstenfalls auftreten kann, wenn wir ein solches Verfahren auf gestörte Daten g^δ unter der Annahme $f^\dagger \in \mathcal{M}$ anwenden. Der sog. *schlimmste Fehler* ist dann durch

$$\Delta(\delta, \mathcal{M}, T) := \sup\{\|Tg^\delta - f\| : f \in \mathcal{M}, g^\delta \in Y, \|Tf - g^\delta\| \leq \delta\}$$

gegeben. Eine „optimale Methode“ T_0 aus einer Klasse von Methoden \mathcal{T} wäre diejenige, für die

$$\Delta(\delta, \mathcal{M}, T_0) := \inf\{\Delta(\delta, \mathcal{M}, T) : T \in \mathcal{T}\}$$

gilt, wobei sich die Optimalität auf die a priori Information $f^\dagger \in \mathcal{M}$ und die betrachtete Klasse von Methoden bezieht. Die erreichbare Genauigkeit beliebiger Methoden ist durch $\Omega(\delta, \mathcal{M})$ beschränkt:

Satz 2.17. Sei $\mathcal{M} \subseteq X$, $\delta > 0$ und $T : Y \rightarrow X$ eine beliebige Abbildung mit $T0 = 0$. Dann gilt

$$\Delta(\delta, \mathcal{M}, T) \geq \Omega(\delta, \mathcal{M}).$$

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Wir kommen nun zurück zu den Konvergenzraten von Regularisierungsverfahren. Der folgende Satz gibt an, dass wir eine Abschätzung wie (2.10) nicht erwarten können,

da die Konvergenz $T_\gamma \rightarrow A^\dagger$ lediglich punktweise aber nicht gleichmäßig ist, falls $\mathcal{R}(A)$ nicht abgeschlossen ist. Somit kann die Konvergenz für jedes Regularisierungsverfahren beliebig langsam sein.

Satz 2.18. *Sei $\mathcal{R}(A)$ nicht abgeschlossen und sei $\{T_\gamma\}$ ein Regularisierungsoperator für A^\dagger mit $T_\gamma 0 = 0$ und einer Parameterwahl $\gamma = \gamma(\delta, g^\delta)$. Dann gibt es keine Funktion $\phi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\lim_{\delta \rightarrow 0} \phi(\delta) = 0$, sodass*

$$\|T_{\gamma(\delta, g^\delta)} g^\delta - A^\dagger g\|_X \leq \phi(\delta)$$

gilt für alle $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ mit $\|g\| \leq 1$ und alle $\delta > 0$.

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Die Kenntnis von δ allein reicht also nicht aus, um Fehlerschranken angeben zu können. Allerdings können wir Konvergenzraten auf Teilmengen von $\mathcal{D}(A^\dagger)$ oder von X angeben. Dazu müssen wir weitere Voraussetzungen an die exakten Daten g bzw. die gesuchte Minimum-Norm-Lösung $f^\dagger = A^\dagger g$ stellen. Wir geben diese a priori Voraussetzungen bezogen auf die exakten Lösungen an, indem wir Teilmengen von X der Form

$$\{f \in X : f = Bw, \|w\| \leq \varrho\}$$

betrachten, wobei B ein beschränkter linearer Operator von einem Hilbertraum nach X ist. Hier werden wir

$$B = (A^* A)^\mu$$

für $\mu > 0$ betrachten und führen die Mengen

$$X_{\mu, \varrho} := \{f \in X : f = (A^* A)^\mu w, \|w\| \leq \varrho\} \quad (2.11)$$

und

$$X_\mu := \bigcup_{\varrho > 0} X_{\mu, \varrho} = \mathcal{R}((A^* A)^\mu)$$

ein. Die Bedingung $f^\dagger \in X_{\mu, \varrho}$ bezeichnen wir als *Quellbedingung* und das Element $w \in X$ mit $(A^* A)^\mu w = f^\dagger$ als *Quelldarstellung*. Die Bedingung, dass ein Element in $X_{\mu, \varrho}$ sein soll, kann als abstrakte Glattheitsbedingung angesehen werden. Bei kompakten Operatoren erkennen wir anhand der Singulärwertzerlegung, dass die Bedingung $f^\dagger \in X_\mu$ einer strengeren Picard-Bedingung (Satz 2.12) entspricht.

Satz 2.19. *Sei $A \in \mathcal{K}(X, Y)$ mit singulärem System $\{(\sigma_j; v_j, u_j)\}$. Dann ist*

$$A^\dagger g \in \mathcal{R}((A^* A)^\mu), \quad \mu > 0 \quad (2.12)$$

genau dann, wenn gilt

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\langle g, u_j \rangle_Y|^2}{\sigma_j^{2+4\mu}} < \infty$$

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Für $\mu = 0$ entspricht (2.12) der Picard-Bedingung. Ansonsten kann (2.12) als Bedingung an die Abklingrate der Fourier-Koeffizienten gesehen werden, die umso strenger wird je größer μ ist.

Satz 2.17 gibt eine untere Grenze für die Genauigkeit zur Lösung von (2.7) unabhängig von der verwendeten Methode an. Für die konkrete Wahl $\mathcal{M} = X_{\mu, \varrho}$ können wir scharfe Schranken für $\Omega(\delta, \mathcal{M})$ angeben.

Satz 2.20. Sei $A \in \mathcal{K}(X, Y)$, $\mu, \varrho > 0$ und $X_{\mu, \varrho}$ wie in (2.11) definiert. Dann gilt für alle $\delta > 0$

$$\Omega(\delta, X_{\mu, \varrho}) \leq \delta^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \varrho^{\frac{1}{2\mu+1}}. \quad (2.13)$$

Außerdem existiert eine Folge $\{\delta_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ mit $\delta_k \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$, sodass

$$\Omega(\delta_k, X_{\mu, \varrho}) = \delta_k^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \varrho^{\frac{1}{2\mu+1}} \quad (2.14)$$

ist.

Beweis. Siehe ENGL ET AL. [34]. □

Anhand des Satzes 2.20 sehen wir, dass für einen kompakten Operator A mit nicht abgeschlossenem Bild der Fehler von keinem Regularisierungsverfahren für $\delta \rightarrow 0$ schneller gegen 0 konvergiert als $\delta_k^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \varrho^{\frac{1}{2\mu+1}}$, vorausgesetzt, dass $f^\dagger \in X_{\mu, \varrho}$. Nach Satz 2.17 können wir den schlimmsten Fehler nach unten abschätzen: $\Delta(\delta, X_{\mu, \varrho}, T_\gamma) \geq \Omega(\delta, X_{\mu, \varrho})$. Dies motiviert die folgende Definition über *optimale* Regularisierungsverfahren.

Definition 2.21. Sei $\mathcal{R}(A)$ nicht abgeschlossen und $\{T_\gamma\}$ ein Regularisierungsoperator für A^\dagger mit Parameterwahl γ . Für $\mu, \varrho > 0$ und $g \in AX_{\mu, \varrho}$ nennen wir das Regularisierungsverfahren (T_γ, γ) *optimal* bezüglich $X_{\mu, \varrho}$ wenn

$$\Delta(\delta, X_{\mu, \varrho}, T_\gamma) = \delta^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \varrho^{\frac{1}{2\mu+1}}$$

für alle $\delta > 0$ gilt. Wir nennen (T_γ, γ) *ordnungsoptimal* bzgl. $X_{\mu, \varrho}$, falls eine Konstante $c \geq 1$ existiert, sodass

$$\Delta(\delta, X_{\mu, \varrho}, T_\gamma) \leq c \delta^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \varrho^{\frac{1}{2\mu+1}}$$

für alle $\delta > 0$ gilt.

Die Ordnungsoptimalität hängt also stark von der Menge $X_{\mu, \varrho}$ ab, in der die gesuchte Lösung $A^\dagger g$ liegt. Diese Forderung kann sehr einschränkend sein, wenn z. B. die Singulärwerte von A exponentiell fallen und die gesuchte Lösung entsprechend glatt sein muss.

Sind wir, wie in Kapitel 2.2.4 und 3.4, nur an Konvergenzraten interessiert, verlangen wir die Quellbedingung $f^\dagger \in X_\mu$ und nennen ein Regularisierungsverfahren ordnungsoptimal für μ , falls eine Konstante $c \geq 1$ existiert mit

$$\Delta(\delta, X_\mu, T_\gamma) \leq c\delta^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}.$$

Unter allen Konvergenzraten der Form δ^s ist demnach $s = 2\mu/(2\mu + 1)$ die bestmögliche.

Regularisierungen können auf verschiedene Arten erreicht werden. Wir betrachten nur den Fall der Regularisierung durch die Wahl eines iterativen Verfahrens, wie wir es später auch bei der modifizierten ART vorliegen haben. Zur Lösung von $Af = g$ berechnen iterative Verfahren eine Folge von Approximationen an f^\dagger . Sei

$$f^{k+1} = B_k f^k + C_k g, \quad k = 0, 1, \dots$$

beispielsweise ein derartiges iteratives Verfahren mit linear stetigen Operatoren B_k und C_k und einem Startwert f^0 , dessen Iterierten für $k \rightarrow \infty$ gegen $A^\dagger g$ konvergieren. Für jedes $\gamma > 0$ sei $k(\gamma)$ ein Index, für den $k(\gamma) \rightarrow \infty$ für $\gamma \rightarrow 0$ gilt. Dann ist

$$T_\gamma g = f^{k(\gamma)}$$

offensichtlich eine Regularisierung von A^\dagger . Der Iterationsindex k entspricht bei iterativen Verfahren also dem Regularisierungsparameter. Iterative Verfahren zeigen bei Anwendung auf gestörte Daten die sog. Semikonvergenz. Nachdem der Rekonstruktionsfehler zunächst mit steigendem Iterationsindex kleiner wird, steigt er anschließend wieder an. Die geeignete Wahl des Abbruchindex entscheidet demnach über die Güte der Rekonstruktion (vgl. [84]).

Schlechtgestelltheit bei der Lösung linearer Gleichungssysteme

Die Diskretisierung im Rahmen der algebraischen Rekonstruktionstechnik führt das inverse Problem auf die Lösung eines linearen Gleichungssystems zurück. Aus diesem Grund gehen wir hier auf die Auswirkungen der Diskretisierung auf schlecht gestellte Probleme ein. Die Abbildung $A \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^N)$ wird nun durch $N \times M$ -Matrizen beschrieben. Die Adjungierte A^* entspricht bei reellen Matrizen der transponierten

Matrix A^T . Der Bildraum \mathbb{R}^N lässt sich in $\mathbb{R}^N = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T)$ aufspalten. Verallgemeinerte Lösungen können analog zum unendlichdimensionalen Fall eingeführt werden. Wir können für Matrizen eine Singulärwertzerlegung angeben.

Satz 2.22 (Singulärwertzerlegung). *Für eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{N \times M}$ existieren die unitären Matrizen $U \in \mathbb{C}^{N \times N}$ und $V \in \mathbb{C}^{M \times M}$ mit*

$$A = U \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^*$$

mit einer Diagonalmatrix $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) > 0$. Die Singulärwerte von A sind σ_i und die Eigenwerte von A^*A und von AA^* sind σ_i^2 , $i = 1, \dots, r$. Der Rang der Matrix A ist $\text{rang}(A) = r$.

Beweis. Siehe z. B. LOUIS [78]. □

Setzen wir $U = (u_1, \dots, u_N)$ und $V = (v_1, \dots, v_M)$, so sind u_i und v_i die linken bzw. rechten singulären Vektoren zu σ_i , $i = 1, \dots, r$. Mit ihnen lassen sich die vier fundamentalen Unterräume wie folgt darstellen

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(A) &= \text{span}\{v_{r+1}, \dots, v_M\}, & \mathcal{R}(A) &= \text{span}\{u_1, \dots, u_r\}, \\ \mathcal{R}(A^*) &= \text{span}\{v_1, \dots, v_r\}, & \mathcal{N}(A^*) &= \text{span}\{u_{r+1}, \dots, u_N\}. \end{aligned}$$

Auch die verallgemeinerte Inverse und die Minimum-Norm-Lösung können mit der Singulärwertzerlegung beschrieben werden.

Satz 2.23. *Für die verallgemeinerte Inverse gilt*

$$A^\dagger = V \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^*$$

und die Minimum-Norm-Lösung von $Af = g$ ist

$$f^\dagger = \sum_{i=1}^r \sigma_i^{-1} \langle g, u_i \rangle v_i.$$

Beweis. Siehe z. B. [13]. □

Wir verwenden im Folgenden die euklidische Norm $\|f\|_2 := \sqrt{f^T f}$ und die zugehörige Spektralnorm

$$\|A\|_2 := \max_{f \neq 0} \frac{\|Af\|_2}{\|f\|_2} = \max_{\|f\|_2=1} \|Af\|_2$$

und lassen in den folgenden Kapiteln, soweit nicht anders angegeben, den Index der verwendeten Norm weg. Die Spektralnorm können wir auch über den maximalen Singulärwert darstellen.

Satz 2.24. Sei $A \in \mathbb{C}^{N \times M}$. Dann gilt

(a) $\|A\|_2 = \sigma_1$.

(b) Die Spektralnorm ist invariant unter unitären Transformationen, d. h.

$$\|U^*AV\|_2 = \|A\|_2$$

für alle unitäre Matrizen $U \in \mathbb{C}^{N \times N}$ und $V \in \mathbb{C}^{M \times M}$.

(c) Die Kondition einer Matrix A ist für $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r$ gegeben durch

$$\kappa(A) := \|A\|_2 \|A^\dagger\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}.$$

Beweis. Siehe HACKBUSCH [46]. □

Im Endlichdimensionalen ist Punkt (c) von Satz 2.2 erfüllt, da wegen $\dim \mathcal{R}(A) < \infty$ der Bildraum $\mathcal{R}(A)$ abgeschlossen und damit die verallgemeinerte Inverse A^\dagger stetig ist. Hier gilt $\mathcal{R}(A) = \overline{\mathcal{R}(A)}$ und damit auch $\mathcal{D}(A^\dagger) = Y$. Für die Identitäten für den Bild- und Nullraum in Satz 2.3 gilt nun

$$\mathcal{R}(A) = \mathcal{N}(A^T)^\perp \quad \text{und} \quad \mathcal{R}(A^T) = \mathcal{N}(A)^\perp. \quad (2.15)$$

Die Schlechtgestelltheit durch die Unbeschränktheit der verallgemeinerten Inverse im Unendlichdimensionalen überträgt sich im endlichdimensionalen Fall auf eine schlechte Kondition des Problems, d. h. $\kappa(A) \gg 1$. Auch hier führen kleine Fehler in den Messdaten zu großen Fehlern in der Lösung. Daher bleibt auch im Endlichdimensionalen eine Regularisierung, z. B. durch ein iteratives Verfahren, nötig. Der Einfluss der schlechten Kondition lässt sich an folgendem Beispiel verdeutlichen.

Beispiel 2.25 (LOUIS [78, S. 149]). Sei $0 < \xi \in \mathbb{R}$ und

$$A = \begin{pmatrix} 1 + \xi^2 & 1 \\ 1 & 1 + \xi^2 \end{pmatrix}.$$

Dann hat A die Eigenwerte

$$\lambda_1 = 2 + \xi^2, \quad \lambda_2 = \xi^2$$

und die normierten Eigenvektoren

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Die Kondition der Matrix A ist also

$$\kappa(A) = \frac{2 + \xi^2}{\xi^2}.$$

Für kleine ξ ist der zweite Eigenwert λ_2 ebenfalls sehr klein und für die Kondition gilt $\kappa(A) \gg 1$, womit wir ein schlecht konditioniertes Problem vorliegen haben. Die Singulärwertzerlegung der Lösung von $Af = g$ ist

$$f = \sum_{i=1}^2 \lambda_i^{-1} \langle f_i, g \rangle f_i.$$

Die Auswirkung der unterschiedlich großen Eigenwerte lässt sich leicht veranschaulichen. Sei zunächst $g^\delta = g + \delta f_1$. Dann ist die Lösung f^δ gegeben durch

$$f^\delta = f + \frac{\delta}{2 + \xi^2} f_1.$$

Der Datenfehler beträgt $\|g^\delta - g\| = \delta$. Für den Fehler im Ergebnis gilt

$$\|f^\delta - f\| = \frac{\delta}{2 + \xi^2} < \delta$$

und ist also kleiner als der Fehler in den Daten.

Ganz anders ist die Situation, wenn der Datenfehler Anteile von f_2 enthält. Sei nun $g^\delta = g + \delta f_2$. Dann ist die Lösung

$$f^\delta = f + \frac{\delta}{\xi^2} f_2$$

und für die Norm des Fehlers gilt

$$\|f^\delta - f\| = \frac{\delta}{\xi^2}.$$

Dies ist für kleine ξ eine extreme Verstärkung des Datenfehlers. Somit ist klar, dass Anteile von Eigenvektoren zu kleinen Eigenwerten im Datenfehler das Ergebnis extrem stören, was auch durch eine exakte Arithmetik nicht verhindert werden kann. Für eine Lösung von $Af = g$ mit kleinem Fehler ist also eine Regularisierung nötig.

2.2.2. Mathematisches Modell für die 2D-THz-Tomographie

Wir stellen basierend auf unseren Betrachtungen in Kapitel 2.1.3 ein vereinfachtes Modell für die 2D-THz-Tomographie vor, welches Integralgleichungen statt der Wellen- oder der Helmholtz-Gleichung verwendet. Daher beschreiben wir nun die zugrunde liegende Radon-Transformation und gehen auf die parallele Messgeometrie ein, die den Messvorgang aus Kapitel 2.1.2 mathematisch beschreibt. Wir beschränken uns dabei auf die für uns wesentlichen Notationen und verweisen für weitere Eigenschaften der Radon-Transformation auf die Arbeiten von LOUIS [78] und NATTERER [84, 85].

Allgemein suchen wir nach einer Funktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, die z. B. einen Materialparameter eines Objektes mit endlicher Ausdehnung beschreibt. Wir nehmen an, dass f einen kompakten Träger in $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x\| \leq \mathfrak{R}\}$ hat. Wir können die Linien $L(\varphi, s)$ im \mathbb{R}^2 durch die Parametrisierung

$$\Gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad \Gamma(t) = s\omega(\varphi) + t\omega^\perp(\varphi) \quad (2.16)$$

mit dem Abstand $s \in \mathbb{R}$ vom Ursprung, einem Winkel $\varphi \in [0, 2\pi)$ und den Einheitsvektoren $\omega(\varphi) = (\cos \varphi, \sin \varphi)^\top$ und $\omega^\perp(\varphi) = (-\sin \varphi, \cos \varphi)^\top$ darstellen:

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

Bei dieser Darstellung ist ω^\perp der Richtungsvektor und ω der Normalenvektor zu der Geraden $L(\varphi, s)$ (siehe auch Abbildung 2.6).

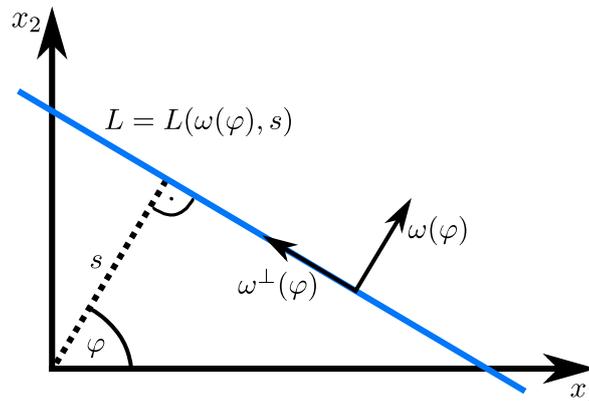


Abbildung 2.6.: Parametrisierung von L

Die Integraltransformation $\mathcal{R} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, die einer Funktion $f \in \mathbb{R}^2$ ihre Linienintegrale zuordnet, d. h.

$$\mathcal{R}f(\omega, s) = \int_{L(\omega, s)} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} f(\Gamma(t)) dt = \int_{\mathbb{R}} f(s\omega + t\omega^\perp) dt, \quad (2.17)$$

wird (zweidimensionale) Radon-Transformation genannt. Das inverse Problem besteht darin, aus Messungen von $g(\varphi, s) = \mathcal{R}f(\omega(\varphi), s)$ zu gegebenen Geraden $L(\omega, s)$ die Funktion f zu rekonstruieren. Man kann zeigen, dass diese Aufgabe schlecht gestellt und eine Regularisierung nötig ist (siehe LOUIS [78, Kapitel 6]). Das mathematische Modell für die Computertomographie wird durch die Radon-Transformation beschrieben. Hierbei beschreibt f den Absorptionskoeffizienten des untersuchten Objektes, welcher aus Messungen des Transmissionsgrades rekonstruiert werden soll.

Der hier betrachtete THz-Tomograph nimmt Daten in einer parallelen Geometrie auf. Damit stehen die Messdaten $g(\varphi_i, s_j)$ für die Winkel $\varphi_i = 2\pi(i-1)/p$ für $i = 1, \dots, p$ und Abständen vom Ursprung $s_j = \mathfrak{R}j/q$, für $j = -q, \dots, q$ für die Rekonstruktion zur Verfügung. Bei festem i werden also $2q+1$ Messungen senkrecht zu $\omega(\varphi_i)$ durchgeführt. Insgesamt können wir $(2q+1)p$ Messungen verwenden.

Wir betrachten eine 2D-THz-Transmissions- und Laufzeittomographie basierend auf Messungen des Transmissionsgrades τ und dem Wegunterschied d mit einer parallelen Geometrie. Ziel ist die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex

$$\tilde{n}(x) = n(x) + i\alpha(x) \frac{c_0}{4\pi f}, \quad x \in \Omega, \quad f > 0.$$

Die Frequenz f der THz-Strahlung sei konstant gewählt und es gelte $n(x) - 1 = 0$ und $\kappa(x) = 0$, falls $x \notin \Omega$. Die THz-Strahlung breite sich entlang eines Weges L aus. Der Weg L ist abhängig vom Brechungsindex und den Grenzflächen des Objektes und verläuft deshalb i. d. R. nicht geradlinig. Den genauen Verlauf von L behandeln wir in Kapitel 3.2. Mithilfe der Radon-Transformation können wir die Integralgleichungen für die Transmissions- und die Laufzeittomographie formulieren und erhalten somit einen mathematischen Zusammenhang zwischen den gesuchten Materialparametern n und α und den Messdaten τ und d . Nach dem Lambert-Beerschen Gesetz ist dieser Zusammenhang durch

$$g_{\text{abs}}(L) = \int_L \alpha(x) \, dx = \ln \left(\frac{I_0}{I} \right) = \ln \left(\frac{1}{\tau} \right) \quad (2.18)$$

gegeben. Die Laufzeit T ist definiert als

$$T = \frac{1}{c_0} \int_L n(x) \, dx$$

und der Wegunterschied

$$g_{\text{ref}}(L) = \int_L (n(x) - 1) \, dx = d$$

ergibt sich nach Abzug der Strecke durch die Luft mit einem Brechungsindex von $n_0 = 1$ (vgl. [84]). Mit diesen Integralgleichungen lässt sich das hier betrachtete inverse Problem formulieren:

Problem 2.26. Das inverse Problem der 2D-THz-Tomographie besteht darin, den komplexen Brechungsindex

$$\tilde{n}(x) = n(x) + i\alpha(x) \frac{c_0}{4\pi f}, \quad x \in \Omega, \quad f > 0$$

aus den bekannten Messdaten

$$g_{\text{abs}}(\varphi_i, s_j) = \ln \left(\frac{1}{\tau(\varphi_i, s_j)} \right) \quad \text{und} \quad g_{\text{ref}}(\varphi_i, s_j) = d(\varphi_i, s_j)$$

einer parallelen Messung mit den (Anfangs-)Winkeln $\varphi_i = 2\pi(i-1)/p$ für $i = 1, \dots, p$ und (Anfangs-)Abständen vom Ursprung $s_j = \Re j/q$, für $j = -q, \dots, q$ zu rekonstruieren. Wir suchen also eine Approximation von \tilde{n} , welche die Gleichungen

$$\int_{L(\varphi_i, s_j)} (n(x) - 1) \, dx = g_{\text{ref}}(\varphi_i, s_j) \quad \text{und} \quad \int_{L(\varphi_i, s_j)} \alpha(x) \, dx = g_{\text{abs}}(\varphi_i, s_j)$$

für $i = 1, \dots, p$ und $j = -q, \dots, q$ möglichst gut erfüllt.

Bemerkung 2.27. Da keine geradlinige Strahlausbreitung betrachtet wird, gilt im Gegensatz zur Computertomographie i. d. R. $g_{\text{abs}}(\varphi + \pi, -s) \neq g_{\text{abs}}(\varphi, s)$ bzw. $g_{\text{ref}}(\varphi + \pi, -s) \neq g_{\text{ref}}(\varphi, s)$. Die Winkel φ_i sollten demnach gleichmäßig über das Intervall $[0, 2\pi)$ verteilt sein.

2.2.3. Algebraische Rekonstruktionstechnik

Die algebraische Rekonstruktionstechnik ist ein iteratives Verfahren zur Bildrekonstruktion in der Computertomographie. Der im Folgenden entwickelte Algorithmus basiert auf der ART, weshalb das Verfahren hier vorgestellt werden soll. Wir folgen dabei den Ausführungen von NATTERER [84, S. 128 ff., 137 ff.] bzw. NATTERER UND WÜBBELING [85, S. 110 ff.].

Die Idee hinter der ART ist die Anwendung der Kaczmarz-Methode auf Radons Integralgleichung (2.17). In [61] stellte KACZMARZ ein iteratives Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme vor. GORDON ET AL. [43] entdeckten das Verfahren 1970 für Rekonstruktionen aus elektronenmikroskopischen Messdaten wieder und nannten es algebraische Rekonstruktionstechnik. Seitdem findet die algebraischen Rekonstruktionstechnik und abgeleitete Verfahren wie die simultane ART (SART, siehe [9]) oder

Block-iterative Methoden (siehe [29, 104]) Anwendung in verschiedensten tomographischen Disziplinen, wie anfangs in der Röntgen-Computertomographie, aber auch heutzutage in der THz-Tomographie (siehe z. B. [94]). Als iteratives Verfahren können über den Startwert leicht a priori Informationen eingebracht werden, was wir später bei der modifizierten ART nutzen werden.

Zunächst werden wir die Kaczmarz-Methode allgemein für lineare Gleichungen beschreiben. Dazu seien $H, H_\nu, \nu = 1, \dots, N$ reelle Hilberträume und

$$\mathcal{R}^\nu : H \rightarrow H_\nu, \quad \nu = 1, \dots, N$$

lineare, stetige und surjektive Abbildungen von H auf H_ν . Nun möchten wir für gegebene $g^\nu \in H_\nu$ ein $f \in H$ derart bestimmen, dass

$$\mathcal{R}^\nu f = g^\nu, \quad \nu = 1, \dots, N \quad (2.19)$$

bzw. mit $\mathcal{R} = (\mathcal{R}^1, \dots, \mathcal{R}^N)^\top$ und $g = (g^1, \dots, g^N)^\top$

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

gilt. Sei \mathcal{P}^ν die Orthogonalprojektion auf den affinen Teilraum $\{f \in H : \mathcal{R}^\nu f = g^\nu\}$ und

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\lambda^\nu &:= (1 - \lambda)I + \lambda\mathcal{P}^\nu \\ \mathcal{P}_\lambda &:= \mathcal{P}_\lambda^N \dots \mathcal{P}_\lambda^1 \end{aligned}$$

mit einem Relaxationsparameter $\lambda > 0$ gegeben. Die Kaczmarz-Methode zur Lösung von (2.19) lässt sich nun als

$$f^{r+1} = \mathcal{P}_\lambda f^r, \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad (2.20)$$

mit einem beliebigen Startwert $f^0 \in H$ schreiben. Für die Anwendung in z. B. der Computertomographie benötigen wir eine explizitere Form von (2.20), weswegen wir zunächst \mathcal{P}^ν berechnen.

Wegen $\mathcal{P}^\nu f - f \perp \mathcal{N}(\mathcal{R}^\nu)$ ist $\mathcal{P}^\nu f - f \in \mathcal{N}(\mathcal{R}^\nu)^\perp = \overline{\mathcal{R}(\mathcal{R}^{\nu*})}$ und daher existiert ein $u^\nu \in H_\nu$, sodass

$$\mathcal{R}^{\nu*} u^\nu = \mathcal{P}^\nu f - f \quad (2.21)$$

gilt. Auflösen nach $\mathcal{P}^\nu f$ und einsetzen in $\mathcal{R}^\nu \mathcal{P}^\nu f = g^\nu$ liefert

$$\mathcal{R}^\nu (f + \mathcal{R}^{\nu*} u^\nu) = g^\nu \Leftrightarrow \mathcal{R}^\nu \mathcal{R}^{\nu*} u^\nu = g^\nu - \mathcal{R}^\nu f.$$

Die Surjektivität von \mathcal{R}^ν und die Injektivität von $\mathcal{R}^{\nu*}$ und damit auch von $\mathcal{R}^\nu \mathcal{R}^{\nu*}$

sorgen dafür, dass wir obige Gleichung nach

$$u^\nu = (\mathcal{R}^\nu \mathcal{R}^{\nu*})^{-1} (g^\nu - \mathcal{R}^\nu f)$$

auflösen können. Nach dem Einsetzen in (2.21) erhalten wir für \mathcal{P}^ν

$$\mathcal{P}^\nu f = f + \mathcal{R}^{\nu*} (\mathcal{R}^\nu \mathcal{R}^{\nu*})^{-1} (g^\nu - \mathcal{R}^\nu f) \quad (2.22)$$

und damit folgende alternative Darstellung von (2.20):

$$\hat{f}^{k+1} = \mathcal{P}_\lambda^\nu \hat{f}^k = \hat{f}^k + \lambda \mathcal{R}^{\nu*} (\mathcal{R}^\nu \mathcal{R}^{\nu*})^{-1} (g^\nu - \mathcal{R}^\nu \hat{f}^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.23)$$

mit $\nu = (k \bmod N) + 1$. Die Iterationsvorschriften (2.20) und (2.23) verwenden unterschiedliche Iterationsindizes deren Zusammenhang durch $f^r = \hat{f}^{rN}$ gegeben ist. Ein Iterationsschritt der Kaczmarz-Methode in (2.20) entspricht der Hintereinanderausführung von N Orthogonalprojektionen. Diese werden in (2.23) dagegen explizit aufgeführt. Hierbei gehen wir der Einfachheit halber von einer zyklischen Verwendung der Gleichungen aus. Nachdem alle Gleichungen verwendet wurden, wird wieder von vorn begonnen. Die Anwendung dieser Gruppe von N Orthogonalprojektionen wird „Sweep“ genannt, womit f^r die „Sweep-Iterierte“ ist (vgl. [19]).

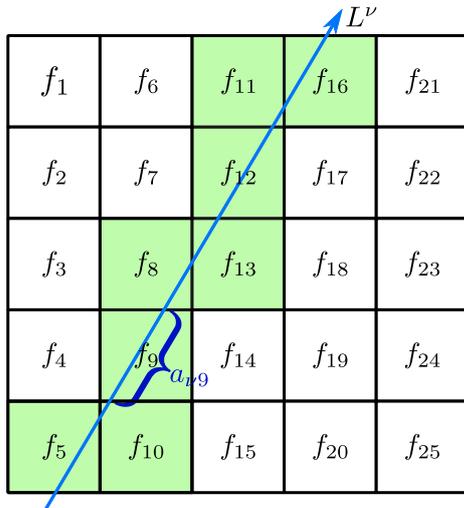
Als nächster Schritt folgt die Anwendung der Kaczmarz-Methode auf Radons Integralgleichung und damit der Übergang zur algebraischen Rekonstruktionstechnik. Die Gleichungen

$$\mathcal{R}^\nu f = \int_{L^\nu} f(x) dx = g^\nu, \quad \nu = 1, \dots, N, \quad x \in \Omega \quad (2.24)$$

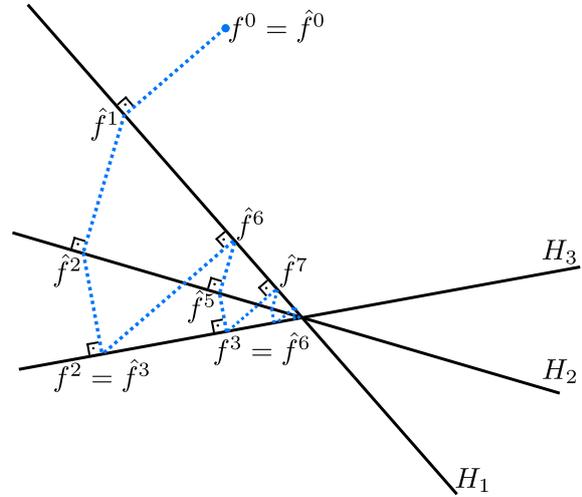
mit $N = p(2q + 1)$ sollen für die Geraden $L^\nu := L(\varphi^\nu, s^\nu)$, eine Funktion f (hier der Brechungsindex $f = n - 1$ oder der Absorptionskoeffizient $f = \alpha$, siehe Kapitel 2.2.2) und Messdaten $g^\nu := g(\varphi^\nu, s^\nu)$ (Wegunterschieds- oder Intensitätsdaten) auf dem Gebiet Ω gelöst werden. Hierzu wird Radons Integralgleichung durch eine Diskretisierung des betrachteten Gebietes in ein lineares Gleichungssystem umgewandelt. Das Gebiet Ω wird mit Pixeln $S_\mu = [a_\mu, b_\mu) \times [c_\mu, d_\mu)$, $\mu = 1, \dots, M$ überdeckt, sodass

$$\Omega \subset \bigcup_{\mu=1}^M S_\mu$$

gilt. Die Pixel werden spaltenweise durchnummeriert (siehe Abbildung 2.7a). Die



(a) Skizze der Diskretisierung des Gebietes Ω und Berechnung der Matrix A mit $M = 25$ (angelehnt an HANSEN [48])



(b) Skizze der Kaczmarz-Methode für drei Gleichungen mit $\lambda = 1$ im \mathbb{R}^2 (angelehnt an CENSOR [19])

Abbildung 2.7.: ART: Diskretisierung und Kaczmarz-Methode

diskretisierte Version \tilde{f} hat die Darstellung

$$f(x) \approx \tilde{f}(x) = \sum_{\mu=1}^M f_{\mu} \chi_{\mu}(x), \quad x \in \Omega \quad (2.25)$$

mit stückweise konstanten Ansatzfunktionen

$$\chi_{\mu}(x) = \begin{cases} 1, & \text{falls } x \in S_{\mu} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Das Integral wird durch

$$\int_{L^{\nu}} f(x) \, dx \approx \sum_{\mu=1}^M a_{\nu\mu} f_{\mu}$$

mit $a_{\nu\mu} = \text{Länge von } (L^{\nu} \cap S_{\mu})$ approximiert. Mit $a^{\nu} := (a_{\nu 1}, \dots, a_{\nu M})^T \in \mathbb{R}^M$ und $F = (f_1, f_2, \dots, f_M)^T \in \mathbb{R}^M$ folgt mit dem Skalarprodukt im \mathbb{R}^M die diskrete Version von (2.24):

$$\langle a^{\nu}, F \rangle = g^{\nu}, \quad \nu = 1, \dots, N. \quad (2.26)$$

Das Gleichungssystem $AF = g$ mit $A = (a_{\nu\mu})_{\nu=1, \dots, N, \mu=1, \dots, M}$ soll nun mit der Kaczmarz-Methode gelöst werden. Die ν -te Zeile von A und das zugehörige Element der rechten

Seite g^ν spannen die Hyperebene

$$H_\nu = \{F \in \mathbb{R}^M : \langle a^\nu, F \rangle = g^\nu\}$$

auf. Durch die Diskretisierung ergeben sich für die Kaczmarz-Methode nun

$$\mathcal{R}^\nu F = \langle a^\nu, F \rangle, \quad H = \mathbb{R}^M, \quad H_\nu = \mathbb{R}^1, \quad \nu = 1, \dots, N.$$

Für ein $\alpha \in \mathbb{R}^1$ gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\nu*} \alpha &= \alpha (a_{\nu 1}, \dots, a_{\nu M})^\top = \alpha a^\nu, \\ \mathcal{R}^\nu (\mathcal{R}^{\nu*} \alpha) &= \alpha \mathcal{R}^\nu a^\nu = \alpha \langle a^\nu, a^\nu \rangle = \alpha \|a^\nu\|^2, \end{aligned}$$

womit sich die Orthogonalprojektion (2.22) für ein beliebiges $F \in \mathbb{R}^M$ als

$$\mathcal{P}^\nu F = F + \frac{g^\nu - \langle a^\nu, F \rangle}{\|a^\nu\|^2} a^\nu$$

ergibt. Entsprechend folgt aus (2.23) die Iterationsvorschrift der ART

$$\hat{F}^{k+1} = \hat{F}^k + \lambda \frac{g^\nu - \langle a^\nu, \hat{F}^k \rangle}{\|a^\nu\|^2} a^\nu, \quad \nu = (k \bmod N) + 1, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (2.27)$$

wobei der Zusammenhang zur (diskretisierten) Sweep-Iterierten wieder $F^r = \hat{F}^{rN}$ ist.

Für $\lambda = 1$ erhalten wir das von Kaczmarz vorgeschlagene Verfahren, welches in Abbildung 2.7b skizziert ist. In diesem Fall ist \hat{F}^{k+1} die Orthogonalprojektion von \hat{F}^k auf H_ν . Die Lösung des linearen Gleichungssystems wird durch Orthogonalprojektionen sukzessive approximiert. Ein Relaxationsparameter $\lambda \neq 1$ ermöglicht, dass die nächste Iterierte \hat{F}^{k+1} stattdessen ein Punkt auf der Geraden ist, welche durch \hat{F}^k verläuft und senkrecht zur Hyperebene H_ν ist (vgl. [19]).

Die Konvergenz von ART wurde bereits ausführlich untersucht. So gibt TANABE [107] 1971 einen Konvergenzbeweis für den endlichdimensionalen Fall mit $\lambda = 1$ an. Der Konvergenzbeweis kann auch allgemein in Hilberträumen geführt (vgl. NATTERER UND WÜBBELING [85]), im Rahmen des SOR-Verfahrens untersucht (vgl. NATTERER [84]) oder auf den inkonsistenten Fall, d. h. $g \notin \mathcal{R}(A)$, erweitert werden (vgl. CENSOR ET AL. [20], ELSNER [33]). Des Weiteren existieren diverse Konvergenzbeobachtungen für Block-iterative Methoden, die als Spezialfall ART enthalten, siehe z. B. ELFVING [29] und JIANG [57]. In ELFVING ET AL. [30] wird auch auf die Semi-konvergenz bei gestörten Daten eingegangen.

Wir geben zum Abschluss ein Konvergenzresultat an, bevor wir im nächsten Ka-

pitel ausführlicher Konvergenzraten für die ART betrachten. Die Konvergenz der algebraischen Rekonstruktionstechnik wird i. d. R. bezüglich der Sweep-Iterierten F^r gezeigt.

Satz 2.28 (Konvergenzsatz der algebraischen Rekonstruktionstechnik). *Sei $AF = g$ konsistent (d. h. $g \in \mathcal{R}(A)$). Dann konvergiert die Iteration (2.27) für $0 < \lambda < 2$ und es gilt mit $F^r = \hat{F}^{rN}$*

$$\lim_{r \rightarrow \infty} F^r = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)} F^0 + A^\dagger g \quad (2.28)$$

mit $\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)}$ der Orthogonalprojektion auf $\mathcal{N}(A)$ und A^\dagger die verallgemeinerte Inverse von A .

Beweis. Siehe NATTERER UND WÜBBELING [85]. □

2.2.4. Konvergenzraten für Kaczmarz-artige Regularisierungsmethoden

Bei den Konvergenzbetrachtungen für die modifizierte ART in Kapitel 3.4 können wir Ergebnisse aus der Konvergenztheorie von Kaczmarz-artigen Verfahren von KINDERMANN UND LEITÃO [66] verwenden. KINDERMANN UND LEITÃO beweisen Konvergenzraten für explizite Landweber-Kaczmarz und implizite Tikhonov-Kaczmarz-Verfahren und ihre symmetrischen Versionen. Die algebraische Rekonstruktionstechnik ist ein Spezialfall des nicht symmetrischen Landweber-Kaczmarz-Verfahrens, auf das wir uns im Folgenden beschränken wollen. Darüber hinaus werden die Verfahren für Operatoren mit Blockstruktur betrachtet, was die oben beschriebene ART ebenfalls nicht betrifft, da dort ein Block aus einer Zeile der Matrix A besteht. Wir fassen die wichtigsten Ergebnisse aus [66] für Operatoren mit Blockstruktur zusammen und leiten den für uns relevanten Spezialfall ab.

Wir betrachten schlecht gestellte Probleme mit einem Vorwärtsoperator mit Blockstruktur. Gegeben seien lineare Operatoren

$$A^\nu : H \rightarrow H_\nu$$

mit reellen Hilberträumen H, H_ν . Wir suchen die Lösung eines Systems bestehend aus N Gleichungen

$$A^\nu f = g^\nu, \quad \nu = 1, \dots, N, \quad (2.29)$$

wobei g^ν durch (gestörte) Daten gegeben und das System schlecht gestellt oder schlecht konditioniert sei. Vernachlässigen wir die Blockstruktur entspricht dies der Gleichung (2.19) bzw. im diskretisierten Fall (2.26) für ART. Wir fassen die Blöcke

zusammen

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} A^1 \\ \vdots \\ A^N \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} g^1 \\ \vdots \\ g^N \end{pmatrix}$$

und schreiben Blockvariablen in fetter Schrift. Damit suchen wir die Lösung der Gleichung $\hat{\mathbf{A}}f = \hat{\mathbf{g}}$. Zur Verallgemeinerung führen wir Vorkonditionierungsoperatoren $M_\nu : H_\nu \rightarrow H_\nu$, $\nu = 1, \dots, N$ ein, welche symmetrisch positiv definit und beschränkt sein sollen. Die vorkonditionierte Version des betrachteten Gleichungssystems ist dementsprechend

$$M_\nu^{\frac{1}{2}} A^\nu f = M_\nu^{\frac{1}{2}} g^\nu, \quad \nu = 1, \dots, N, \quad (2.30)$$

die für positiv definite M_ν äquivalent zu (2.29) ist. Die Vorkonditionierer werden ebenfalls in einer Blockdiagonalmatrix zusammengefasst:

$$\mathbf{M} = \text{diag}(M_\nu), \quad \nu = 1, \dots, N.$$

Im weiteren Verlauf verwenden wir vor allem die vorkonditionierten Operatoren und Daten, weshalb wir

$$\mathbf{A} := \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} M_1^{\frac{1}{2}} A^1 \\ \vdots \\ M_N^{\frac{1}{2}} A^N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g} := \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} M_1^{\frac{1}{2}} g^1 \\ \vdots \\ M_N^{\frac{1}{2}} g^N \end{pmatrix}$$

definieren. Für verrauschte Daten gelte $\hat{\mathbf{g}}^\delta$

$$\|\hat{\mathbf{g}} - \hat{\mathbf{g}}^\delta\| \leq \delta$$

bzw. in der vorkonditionierten Version mit $\mathbf{g}^\delta = \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{g}}^\delta$

$$\|\mathbf{g} - \mathbf{g}^\delta\| \leq \delta_M \leq \|\mathbf{M}^{\frac{1}{2}}\| \delta.$$

Nun können wir die klassische (nicht symmetrische) Landweber-Kaczmarz Methode zur Berechnung von Näherungen an die Lösung von (2.29) bzw. (2.30) angeben:

$$\begin{aligned} \hat{f}^{k+1} &= \hat{f}^k - A^{\nu*} M_\nu (A^\nu \hat{f}^k - g^{\delta,\nu}), \quad \nu = (k \bmod N) + 1 \\ f^r &:= \hat{f}^{rN}, \quad r = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (2.31)$$

ausgehend von einem Startwert \hat{f}^0 . Für die Landweber-Kaczmarz Methode muss die Bedingung

$$\|A^{\nu*} M_\nu A^\nu\| < 2, \quad \forall \nu = 1, \dots, N \quad (2.32)$$

erfüllt sein, welche garantiert, dass der Iterationsoperator $I - A^{\nu*}M_{\nu}A^{\nu}$ eine nicht-expansive Abbildung ist.

Die obige Iterationsvorschrift beinhaltet die hier relevante ART. Betrachten wir den endlichdimensionalen Fall, wählen als Blöcke die Zeilen der Matrix A , also $A^{\nu} = a^{\nu T}$ (damit ist das Verfahren voll sequentiell und ohne Blockstruktur) und verwenden den Vorkonditionierer $M_{\nu} = \lambda \|a^{\nu}\|^{-2}$ mit $\lambda > 0$, so gelangen wir sofort zu der Iterationsvorschrift (2.27). Bei dieser Wahl wird aus der Bedingung (2.32)

$$\|a^{\nu}\lambda\|a^{\nu}\|^{-2}a^{\nu T}\| = \lambda < 2,$$

was der Bedingung $0 < \lambda < 2$ im Satz 2.28 entspricht, die im zugehörigen Beweis garantiert, dass der Iterationsoperator auf $\mathcal{N}(A)^{\perp}$ kontrahierend ist (siehe auch NATTERER UND WÜBBELING [85, THEOREM 5.1]). Die Blockdiagonalmatrix M wird zur Diagonalmatrix

$$M = \text{diag}(\lambda\|a^{\nu}\|^{-2}), \quad \nu = 1, \dots, N.$$

Bei der Konvergenzanalyse von Kaczmarz-artigen Methoden wird oft ausgenutzt, dass sich diese als vorkonditionierte (Block-) Landweber-Verfahren darstellen lassen. So zeigte bereits NATTERER [84], dass sich das klassische Kaczmarz-Verfahren mit dem Vorkonditionierer $M_{\nu} = \lambda(A^{\nu}A^{\nu*})^{-1}$ als eine Variante des SOR-Verfahrens darstellen lässt. Für allgemeine Vorkonditionierer M_{ν} wurde die Äquivalenz zwischen Landweber-Kaczmarz Methoden und mit Gauß-Seidel vorkonditionierte Landweber Iterationen von ELFVING UND NIKAZAD [31] gezeigt.

Hierfür definieren wir den Operator

$$\mathbf{L} := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ M_2^{\frac{1}{2}}A^2A^{1*}M_1^{\frac{1}{2}} & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ M_N^{\frac{1}{2}}A^NA^{N-1*}M_{N-1}^{\frac{1}{2}} & \cdots & M_N^{\frac{1}{2}}A^NA^{N-1*}M_{N-1}^{\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

als den Teil unterhalb der Diagonale von $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ mit dem wir folgenden Satz formulieren können.

Satz 2.29. *Sei f^r die Iterierte der Landweber-Kaczmarz Methode (2.31). Dann kann die Iteration (2.31) als nicht symmetrisches blockweise vorkonditioniertes Landweber-Verfahren in der Form*

$$f^{r+1} = f^r - \mathbf{A}^*\mathbf{M}_B(\mathbf{A}f^r - \mathbf{g}^{\delta}) \quad (2.33)$$

mit

$$\mathbf{M}_B = (\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1},$$

geschrieben werden.

Beweis. Siehe ELFVING UND NIKAZAD [31]. \square

Wir bezeichnen mit $f^{\delta,r}$ die Iteration (2.33) mit verrauschten Daten $(g_\nu^\delta)_{\nu=1}^N$, während f^r die Iteration mit exakten Daten $(A^\nu f^\dagger)_{\nu=1}^N$ ist. Damit ist f^r die Iterierte bei der g^δ durch $g = \mathbf{A}f^\dagger$ ersetzt wird, mit f^\dagger einer Lösung zu (2.29).

Nun können wir das Hauptergebnis von KINDERMANN UND LEITÃO [66] zu den Konvergenzraten der Landweber-Kaczmarz Methode angeben, welche, wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben, mithilfe einer Quellbedingung an die Lösung erreicht werden können.

Satz 2.30 (Konvergenzrate für die Landweber-Kaczmarz Methode). *Sei für \mathbf{L} und \mathbf{A} die Bedingung*

$$\|\mathbf{L}\| + \frac{1}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{A}^*\| < 1 \quad (2.34)$$

und darüber hinaus die Quellbedingung

$$f^0 - f^\dagger = (\mathbf{A}^* \mathbf{M}_B \mathbf{A})^\mu w, \quad \text{für ein } 0 < \mu < \infty$$

erfüllt. Dann genügen die Iterierten der Landweber-Kaczmarz Methode (2.31) der Fehlerabschätzung

$$\|f^{\delta,r} - f^\dagger\| \leq \|f^r - f^\dagger\| + \|f^{\delta,r} - f^r\| \leq c_1 \frac{1}{r^\mu} + c_2 \sqrt{r} \delta_M,$$

mit positiven Konstanten c_1 und c_2 . Für die a priori Parameterwahl¹ $r \sim \delta_M^{\frac{-2}{2\mu+1}}$ erhalten wir die ordnungsoptimale Konvergenzrate

$$\|f^{\delta,r} - f^\dagger\| \sim \delta_M^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \leq C(\|\mathbf{M}^{1/2}\|\delta)^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}.$$

Beweis. Der Satz ist eine Zusammenfassung der Lemmata 3.2, 3.5 und 3.8 aus [66], die ebenfalls bei KINDERMANN UND LEITÃO bewiesen werden. \square

Bemerkung 2.31. Verwenden wir einen skalierten Vorkonditionierer λM_ν mit $\lambda > 0$ können wir gewährleisten, dass die Bedingung (2.34) bei entsprechender Wahl von λ immer erfüllt ist, da λM_ν und damit $\|\mathbf{L}\| + \frac{1}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{A}^*\|$ hinreichend klein werden. Bei der ART übernimmt dies der Relaxationsparameter λ .

Wir können statt (2.34) eine einfachere hinreichende Bedingung für die Konvergenzrate in Satz 2.30 angeben, wenn wir die Norm von \mathbf{L} abschätzen. Dazu definieren wir die untere Dreiecksmatrix $|\mathbf{L}| \in \mathbb{R}^{N \times N}$ als

$$|\mathbf{L}|_{i,j} := \begin{cases} 0, & \text{für } j \geq i \\ \|\mathbf{L}_{i,j}\|, & \text{sonst} \end{cases}, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (2.35)$$

¹Die Notation $a \sim b$ bedeutet, dass Konstanten $0 < c_1 \leq c_2$ existieren, sodass $c_1 b \leq a \leq c_2 b$ gilt.

Dann erhalten wir:

Lemma 2.32. *Sei $|\mathbf{L}|$ wie in (2.35) gegeben. Dann gilt*

$$\|\mathbf{L}\| \leq \sigma_{\max}(|\mathbf{L}|),$$

wobei σ_{\max} der größte Singulärwert von $|\mathbf{L}|$ ist.

Beweis. Siehe KINDERMANN UND LEITÃO [66]. □

Damit erhalten wir folgende neue Bedingung.

Korollar 2.33. *Sei $|\mathbf{L}|$ wie in (2.35) gegeben. Die in Satz 2.30 angegebene Konvergenzrate gilt auch dann, wenn die Bedingung*

$$\sigma_{\max}(|\mathbf{L}|) + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^N \|A^{\nu*} M_{\nu} A^{\nu}\| < 1$$

erfüllt ist.

Wir beschließen diesen Abschnitt, indem wir die obigen Ergebnisse für den Spezialfall der algebraischen Rekonstruktionstechnik zusammenfassen, wie wir sie für die Konvergenzbetrachtungen in Kapitel 3.4 verwenden werden.

Korollar 2.34 (Konvergenzrate für die algebraische Rekonstruktionstechnik). *Die Iterationsvorschrift (2.27) kann in der Form*

$$F^{r+1} = F^r - A^T M_B (A F^r - g)$$

geschrieben werden mit

$$A = M \begin{pmatrix} (a^1)^T \\ \vdots \\ (a^N)^T \end{pmatrix}, \quad A^T = M (a^1, \dots, a^N) \quad \text{und} \quad g = M \begin{pmatrix} g^1 \\ \vdots \\ g^N \end{pmatrix}$$

mit $M = \text{diag}(\lambda \|a^{\nu}\|^{-2}), \nu = 1, \dots, N$ und $M_B = (I + L)^{-1}$ mit

$$L := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \lambda \frac{(a^2)^T a^1}{\|a^2\| \|a^1\|} & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ \lambda \frac{(a^N)^T a^1}{\|a^N\| \|a^1\|} & \cdots & \lambda \frac{(a^N)^T a^{N-1}}{\|a^N\| \|a^{N-1}\|} & 0 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \cos \beta_{2,1} & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ \cos \beta_{N,1} & \cdots & \cos \beta_{N,N-1} & 0 \end{pmatrix}$$

mit den Winkeln $\beta_{i,j}$, die von den Vektoren a^i und a^j eingeschlossen werden.

Sei für L und A die Quellbedingung

$$\hat{F}^0 - F^\dagger = (A^T M_B A)^\mu w, \quad \text{für ein } 0 < \mu < \infty$$

erfüllt. Für den Relaxationsparameter λ gelte

$$0 < \lambda < \frac{1}{\sigma_{\max}(|\tilde{L}|) + \frac{N}{2}} \quad (2.36)$$

mit $|L| = \lambda|\tilde{L}|$. Dann genügen die Iterierten der algebraischen Rekonstruktionstechnik (2.27) der Fehlerabschätzung

$$\|F^{\delta,r} - F^\dagger\| \leq c_1 \frac{1}{r^\mu} + c_2 \sqrt{r} \delta_M,$$

mit positiven Konstanten c_1 und c_2 . Für die a priori Parameterwahl $r \sim \delta_M^{\frac{-2}{2\mu+1}}$ erhalten wir die ordnungsoptimale Konvergenzrate

$$\|F^{\delta,r} - F^\dagger\| \sim \delta_M^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \leq \tilde{C} \delta_M^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}$$

$$\text{mit } \tilde{C} = C \|M^{\frac{1}{2}}\|^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} = C \left(\sqrt{\max_{\nu=1,\dots,N} \lambda \|a^\nu\|^{-1}} \right)^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} = C \lambda^{\frac{\mu}{4\mu+2}} \left(\max_{\nu=1,\dots,N} \|a^\nu\|^{-1} \right)^{\frac{\mu}{2\mu+1}}.$$

Die Wahl des Relaxationsparameters in (2.36) ergibt sich direkt aus dem Korollar 2.33. Wir erhalten die obige Konvergenzrate, wenn wir λ klein genug wählen. Mit $|L| = \lambda|\tilde{L}|$ und

$$|\tilde{L}|_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{für } j \geq i \\ |\cos \varphi_{i,j}|, & \text{sonst} \end{cases}, \quad i, j = 1, \dots, N$$

können wir die obere Schranke für den Relaxationsparameter angeben. Mit

$$\begin{aligned} \sigma_{\max}(|L|) + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^N \|a^{\nu*} \lambda \|a^\nu\|^{-2} a^\nu\| &= \lambda \sigma_{\max}(|\tilde{L}|) + \frac{\lambda}{2} \sum_{\nu=1}^N \|a^\nu\|^2 \|a^\nu\|^{-2} \\ &= \lambda \sigma_{\max}(|\tilde{L}|) + \lambda \frac{N}{2} < 1 \end{aligned}$$

ist die Bedingung (2.34) für

$$\lambda < \frac{1}{\sigma_{\max}(|\tilde{L}|) + \frac{N}{2}} = \frac{1}{\left\| |\tilde{L}| \right\|^2 + \frac{N}{2}} \quad (2.37)$$

erfüllt. Die Spektralnorm von $|\tilde{L}|$ ist dabei nur von Matrixeinträgen von A abhängig, also von der gewählten Messgeometrie, und lässt sich vor der Rekonstruktion

berechnen.

2.2.5. Störungstheorie für die verallgemeinerte Inverse

Der folgende Abschnitt basiert auf der Arbeit von WEDIN [116], der im Rahmen der Lösung linearer Gleichungssysteme mit der Methode der kleinsten Quadrate die Störung verallgemeinerter Inversen untersucht hat.

Wie bei der klassischen ART führt die Diskretisierung bei der modifizierten ART zu Matrizen, deren Einträge der Länge des ν -ten Strahls im μ -ten Pixel entsprechen (siehe Kapitel 3.3.2 und die Abbildungen 2.7a und 3.3). Die Strahlwege hängen allerdings vom zu rekonstruierendem Brechungsindex ab und werden an Grenzflächen nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz gebrochen. Die modifizierte ART rekonstruiert neben dem komplexen Brechungsindex auch die Strahlwege, sodass die Approximation der Strahlwege in der i -ten Iteration durch eine Matrix A_i beschrieben wird. Da der Unterschied zwischen der Matrix A , die auf „korrekt“ gebrochenen Strahlwegen basiert, und den iterierten Matrizen A_i auch als Störung aufgefasst werden kann, sind die Resultate von WEDIN für die Abschätzungen bei den Konvergenzbetrachtungen der modifizierten ART in Kapitel 3.4 von großem Nutzen und sollen hier beschrieben werden. Wir folgen dabei den Beweisen in WEDIN [116] und führen sie weiter aus.

Wir betrachten dazu die linearen Abbildungen $A : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$ und $B : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$, wobei B die gestörte Version von A sei, also $B = A + T$ mit einer Störung T gelte. Wir interessieren uns dafür, wie sich die Störung in A auf ihre verallgemeinerte Inverse auswirkt und werden dazu die Abschätzungen

$$\|B^\dagger\| \leq \frac{\|A^\dagger\|}{1 - \|A^\dagger\|\|T\|} \quad \text{und} \quad \|B^\dagger - A^\dagger\| \leq c\|B^\dagger\|\|A^\dagger\|\|B - A\|, \quad c \in \mathbb{R}^+$$

herleiten. Die gesuchten Abschätzungen für $\|B^\dagger\|$ und $\|B^\dagger - A^\dagger\|$ werden wir nur für den Fall angeben können, wenn

$$\text{rang}(A) = \text{rang}(B) =: r \tag{2.38}$$

und $\|B - A\|$ klein ist. Das folgende Beispiel zeigt, dass die verallgemeinerte Inverse von B stark von A^\dagger abweichen kann, falls (2.38) nicht mehr gilt.

Beispiel 2.35 (WEDIN [116]). Wir betrachten die folgenden Matrizen:

$$A = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^\dagger = \begin{pmatrix} 1/\sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 0 & \eta \\ \eta & 0 \end{pmatrix}, \quad \|T\| = \eta,$$

$$B = A + T = \begin{pmatrix} \sigma & \eta \\ \eta & 0 \end{pmatrix}, \quad B^\dagger = B^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\eta \\ 1/\eta & -\sigma/\eta^2 \end{pmatrix}.$$

Der Rang der Matrizen ist verschieden, da $\text{rang}(A) = 1$ bzw. $\text{rang}(B) = 2$. Somit ist

$$B^\dagger - A^\dagger = \begin{pmatrix} -1/\sigma & 1/\eta \\ 1/\eta & -\sigma/\eta^2 \end{pmatrix}, \quad (B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} = \begin{pmatrix} -1/\sigma & 0 \\ 1/\eta & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\|B^\dagger - A^\dagger\| \geq \|(B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}\| \geq 1/\eta.$$

Für kleine Störungen η wird der Unterschied zwischen den verallgemeinerten Inversen sehr groß, was wir später allgemein in Satz 2.43 sehen werden.

Des Weiteren gelten die folgenden Abschätzungen nur für unitär invariante Normen, zu denen auch die hier betrachtete Spektralnorm gehört (vgl. Satz 2.24).

Definition 2.36. Eine Norm $\|\cdot\|$ auf $\mathbb{C}^{N \times M}$ heißt unitär invariant, falls

$$\|U^*AV\| = \|A\|$$

für alle unitären U und V gilt.

Die Moore-Penrose-Axiome (siehe Satz 2.9) liefern die Zusammenhänge

$$\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} = AA^\dagger = A^{\dagger T}A^T \tag{2.39}$$

und analog

$$\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^T)} = A^T A^{\dagger T} = A^\dagger A,$$

welche wir im Folgenden oft nutzen werden.

Seien

$$\sigma_1(A) \geq \sigma_2(A) \geq \dots \sigma_r(A) > 0$$

und analog $\{\sigma_j(B)\}_{j=1}^r$ die Singulärwerte von A bzw. B . Darüber hinaus sei $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \dots = \sigma_M = 0$ für A und B . Die Spektralnorm einer Matrix entspricht ihrem maximalen Singulärwert (vgl. Satz 2.24 (a)). Damit erhalten wir

$$\|A^\dagger\| = \frac{1}{\sigma_r(A)}.$$

Das nächste Lemma dient der Charakterisierung von Singulärwerten mit deren Hilfe wir eine Abschätzung für $\|B^\dagger\|$ angeben werden.

Lemma 2.37 (Stabilität von Singulärwerten). *Seien A und $B = A + T \in \mathbb{R}^{N \times M}$, $N \geq M$ mit den zugehörigen Singulärwerten $\{\sigma_\mu(A)\}_{\mu=1}^M$ und $\{\sigma_\mu(B)\}_{\mu=1}^M$. Dann gilt*

$$|\sigma_\mu(B) - \sigma_\mu(A)| \leq \|T\| = \|B - A\|, \quad \mu = 1, 2, \dots, M. \tag{2.40}$$

Beweis. Siehe STEWART [105]. □

Nun können wir den Satz für die Abschätzung von $\|B^\dagger\|$ angeben.

Satz 2.38 (Abschätzung für $\|B^\dagger\|$). *Ist $\text{rang}(A) = \text{rang}(B)$ sowie $\|T\| < \frac{1}{\|A^\dagger\|}$, dann gilt*

$$\|B^\dagger\| = \|(A + T)^\dagger\| \leq \frac{\|A^\dagger\|}{1 - \|A^\dagger\|\|T\|}. \quad (2.41)$$

Beweis. Aus den Annahmen des Satzes und Lemma 2.37 folgt

$$\frac{1}{\|B^\dagger\|} = \sigma_r(A + T) \geq \sigma_r(A) - \|T\| = \frac{1}{\|A^\dagger\|} - \|T\| > 0,$$

woraus sich sofort (2.41) ergibt. □

Wir untersuchen nun $B^\dagger - A^\dagger$ und geben zunächst wesentliche Zerlegungen an.

Lemma 2.39. *Sei $T = B - A$, dann gilt*

$$B^\dagger - A^\dagger = -B^\dagger T A^\dagger + B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} A^\dagger, \quad (2.42)$$

$$\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)} \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = -A^\dagger T \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}, \quad (2.43)$$

$$\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)} = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} T B^\dagger. \quad (2.44)$$

Beweis. $B^\dagger - A^\dagger$ wird in \mathbb{R}^N bezüglich $\mathcal{R}(A)$ und $\mathcal{R}(A)^\perp = \mathcal{N}(A^\dagger)$ und in \mathbb{R}^M bezüglich $\mathcal{R}(B^\dagger)$ und $\mathcal{R}(B^\dagger)^\perp = \mathcal{N}(B)$ zerlegt:

$$\begin{aligned} B^\dagger - A^\dagger &= (\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)} + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)})(B^\dagger - A^\dagger)(\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}) \\ &= \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}(B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} + \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} - \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}A^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} \\ &\quad + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} \\ &\quad + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} \\ &= \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}(B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} + B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger \\ &\quad - \underbrace{\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}A^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} + \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}}_{=0} \\ &= \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}(B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} + B^\dagger\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger \end{aligned} \quad (2.45)$$

Die Gleichung (2.45) beweist (2.42), da mithilfe der Moore-Penrose-Axiome

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}(B^\dagger - A^\dagger)\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)} &= B^\dagger B(B^\dagger - A^\dagger)AA^\dagger = B^\dagger BB^\dagger AA^\dagger - B^\dagger BA^\dagger AA^\dagger \\ &= B^\dagger AA^\dagger - B^\dagger BA^\dagger = -(B^\dagger(B - A)A^\dagger) \\ &= -B^\dagger T A^\dagger \end{aligned}$$

gilt. Die Aussagen (2.43) und (2.44) ergeben sich auch direkt aus den Axiomen:

$$\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = A^\dagger A \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = A^\dagger (B - T) \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = \underbrace{A^\dagger B \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}}_{=0} - A^\dagger T \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}$$

und

$$\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)} = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} B B^\dagger = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} (T + A) B^\dagger = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} T B^\dagger + \underbrace{\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} A B^\dagger}_{=0}.$$

□

Für die Abschätzung von $\|B^\dagger - A^\dagger\|$ benötigen wir noch die folgenden beiden Lemmata:

Lemma 2.40. *Seien X und Y Teilräume des \mathbb{R}^M und \mathcal{P}_X bzw. \mathcal{P}_Y die Orthogonalprojektionen auf X bzw. Y . Für alle unitär invarianten Normen gilt*

$$\|(I - \mathcal{P}_Y)\mathcal{P}_X\| = \|(I - \mathcal{P}_X)\mathcal{P}_Y\| \quad (2.46)$$

dann und nur dann, wenn

$$\dim(X) = \dim(Y).$$

Beweis. Siehe WEDIN [116, Theorem 7.1].

□

Lemma 2.41. *Sei $\text{rang}(A) = \text{rang}(B)$, dann gilt*

$$\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)}\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\| \leq \min \{\|TA^\dagger\|, \|TB^\dagger\|\} \quad (2.47)$$

$$\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)}\| \leq \min \{\|A^\dagger T\|, \|B^\dagger T\|\} \quad (2.48)$$

für unitär invariante Normen.

Beweis. Die Gleichungen in (2.47) und (2.48) ergeben sich durch die Anwendung von Lemma 2.40 als

$$\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)}\| = \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)^\perp})\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)}\| = \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)})\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)^\perp}\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\|$$

bzw.

$$\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| = \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)^\perp})\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| = \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)})\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)^\perp}\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)}\|.$$

Die Abschätzungen können durch die Anwendung der Zerlegungen (2.43) und (2.44) bzw. der zugehörigen Zerlegungen von $\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)}$ und $\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}$ erreicht werden.

Nun gilt für

$$\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| = \|-A^\dagger T\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| \leq \|A^\dagger T\|\|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}\| = \|A^\dagger T\|$$

und analog $\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A)}\| \leq \|B^\dagger T\|$. Die Ausnutzung der Selbstadjungiertheit von Orthogonalprojektionen führt zu

$$\begin{aligned} \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\| &= \|(\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)})^\top\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)}\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}TB^\dagger\| \\ &\leq \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\|\|TB^\dagger\| = \|TB^\dagger\| \end{aligned}$$

und analog zu $\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B^\dagger)}\| \leq \|TA^\dagger\|$. \square

Jetzt können wir den für die Abschätzungen in Kapitel 3.4 wichtigen Satz formulieren und beweisen.

Satz 2.42 (Abschätzung für $\|B^\dagger - A^\dagger\|$). *Seien die Matrizen $A \in \mathbb{R}^{N \times M}$ und $B \in \mathbb{R}^{N \times M}$ vom selben Rang, d. h.*

$$\text{rang}(A) = \text{rang}(B),$$

dann gilt

$$\|B^\dagger - A^\dagger\| \leq c\|B^\dagger\|\|A^\dagger\|\|B - A\| \quad (2.49)$$

mit

$$c = \begin{cases} \frac{1+\sqrt{5}}{2}, & \text{für } \text{rang}(A) < \min(M, N) \\ \sqrt{2}, & \text{für } \text{rang}(A) = \min(M, N), M \neq N \\ 1, & \text{für } \text{rang}(A) = M = N. \end{cases} \quad (2.50)$$

Beweis. Sei wieder $T = B - A$ und u ein Vektor in \mathbb{R}^M mit $\|u\| = 1$. Aus der Zerlegung (2.42) leiten wir folgende Abschätzung mithilfe des Satzes des Pythagoras und der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung ab:

$$\begin{aligned} \|(B^\dagger - A^\dagger)u\|^2 &= \|-B^\dagger TA^\dagger u + B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u - \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger u\|^2 \\ &= \|-B^\dagger TA^\dagger u + B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger u\|^2 \\ &= \|B^\dagger TA^\dagger u\|^2 + 2\langle -B^\dagger TA^\dagger u, B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u \rangle + \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger u\|^2 \\ &\leq \|B^\dagger TA^\dagger u\|^2 + 2\|B^\dagger TA^\dagger u\|\|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\| + \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger u\|^2 \\ &= (\|B^\dagger TA^\dagger u\| + \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|)^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger u\|^2 \\ &= (\|B^\dagger TA^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}u\| + \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|)^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}u\|^2 \\ &\leq (\|B^\dagger TA^\dagger\|\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}u\| + \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\|\|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|)^2 + \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)}A^\dagger\|^2\|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}u\|^2 \\ &=: \varphi. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Setzen wir nun

$$\cos \psi = \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(A)}u\| \quad \text{und} \quad \sin \psi = \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}u\|$$

und

$$\alpha = \|B^\dagger T A^\dagger\|, \quad \beta = \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\|, \quad \gamma = \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} A^\dagger\|$$

erhalten wir mit diesen Notationen

$$\varphi = (\alpha \cos \psi + \beta \sin \psi)^2 + \gamma^2 \cos^2 \psi$$

und

$$\Phi := \sup_{0 \leq \psi \leq \frac{\pi}{2}} \varphi = \frac{1}{2} \left\{ \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + ((\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)^2 - 4\beta^2 \gamma^2)^{1/2} \right\}. \quad (2.52)$$

Damit können wir eine Schranke für die Norm angeben, denn wir haben

$$\|B^\dagger - A^\dagger\|^2 = \sup_{\|u\|=1} \|(B^\dagger - A^\dagger)u\| \leq \sup_{0 \leq \psi \leq \frac{\pi}{2}} \varphi = \Phi,$$

wobei φ eine bezüglich α, β und γ ansteigende Funktion ist.

Für $\text{rang}(A) = M = N$ ist $\mathcal{N}(A) = \mathcal{N}(A^\dagger) = \{0\}$ und daher $\mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)} = \mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = 0$. Damit sind $\beta = \gamma = 0$ und $\sqrt{\Phi} = \alpha$. Für $\text{rang}(B) = \text{rang}(A) = M < N$ ist wegen $\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} = 0$ dann $\gamma = 0$ und $\sqrt{\Phi} = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$. Im allgemeinen Fall $\text{rang}(A) < \min\{M, N\}$, nehmen wir an, dass $\max\{\alpha, \beta, \gamma\} \leq \theta$ ist. Dann erhalten wir aus (2.52)

$$\sqrt{\Phi} \leq \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ 3\theta^2 + (9\theta^4 - 4\theta^4)^{1/2} \right\}} = \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2} \theta^2} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \theta.$$

Nun können wir noch α, β und γ mit Lemma 2.41 abschätzen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \alpha &= \|B^\dagger T A^\dagger\| \leq \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\| \\ \beta &= \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\| = \|B^\dagger \mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)} \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\| \leq \|B^\dagger\| \|\mathcal{P}_{\mathcal{R}(B)} \mathcal{P}_{\mathcal{N}(A^\dagger)}\| \leq \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\| \\ \gamma &= \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} A^\dagger\| = \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)} A^\dagger\| \leq \|\mathcal{P}_{\mathcal{N}(B)} \mathcal{P}_{\mathcal{R}(A^\dagger)}\| \|A^\dagger\| \leq \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\| \end{aligned}$$

und damit auch

$$\max\{\alpha, \beta, \gamma\} \leq \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\| = \theta.$$

Fassen wir zusammen, so ist

$$\|B^\dagger - A^\dagger\| \leq \begin{cases} \frac{1+\sqrt{5}}{2} \theta & = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\|, & \text{für } \text{rang}(A) < \min(M, N) \\ \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} & = \sqrt{2} \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\|, & \text{für } \text{rang}(A) = \min(M, N), M \neq N \\ \alpha & = \|B^\dagger\| \|A^\dagger\| \|T\|, & \text{für } \text{rang}(A) = M = N, \end{cases}$$

womit der Satz bewiesen ist. □

Die Störung der Matrix A sollte nicht so groß sein, dass sie den Rang der Matrix verändert, da in diesem Fall $\|B^\dagger - A^\dagger\|$ nicht mehr abgeschätzt und der Fehler beliebig groß werden kann:

Satz 2.43. *Ist $\text{rang}(A) \neq \text{rang}(B)$ oder $\|B - A\| > \frac{1}{\|A^\dagger\|}$, so gilt*

$$\|B^\dagger - A^\dagger\| \geq \frac{1}{\|B - A\|}.$$

Des Weiteren gilt für $\text{rang}(B) \geq \text{rang}(A)$

$$\|B^\dagger\| \geq \frac{1}{\|B - A\|}.$$

Beweis. Siehe STEWART [106]. □

Für $\text{rang}(A) \neq \text{rang}(B)$ ist $\|B^\dagger - A^\dagger\|$ also immer dann groß, wenn der Unterschied $\|B - A\|$ zwischen den Matrizen A und B klein wird. Für den Fall $r = \text{rang}(B) > \text{rang}(A)$ lässt sich dies leicht nachvollziehen. Die Matrix B besitzt nun r Singulärwerte ungleich Null. Da A weniger als r Singulärwerte ungleich Null hat, muss mindestens einer der Singulärwerte von B gegen Null gehen, sobald B sich A nähert. Das bedeutet aber, dass B^\dagger , dessen Spektralnorm gleich dem Kehrwert des kleinsten Singulärwertes von B ist, divergiert (vgl. STEWART [106, S. 141 und 146]).

Kapitel 3

Modifizierte ART

Wir betrachten nun, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, eine 2D-THz-Transmissions- und Laufzeittomographie mit paralleler Geometrie zur Berechnung des komplexen Brechungsindex. Dafür entwickeln wir einen effizienten Lösungsalgorithmus, welcher nur die dominanten physikalischen Effekte berücksichtigt, um rechenintensive Rekonstruktionen, z. B. auf Basis der Wellengleichung, zu umgehen. Die algebraische Rekonstruktionstechnik erweitern wir derart, dass gebrochene Strahlwege und Reflexionsverluste berücksichtigt werden. Wir verwenden dafür die in Kapitel 2.1.4 beschriebenen Formeln von Snell und Fresnel und benötigen als a priori Information die Positionen und die Normalen der Grenzflächen des zu untersuchenden Objektes. Das Ergebnis ist die modifizierte ART für die THz-Tomographie, welche Brechung, Transmission und Reflexionsverluste berücksichtigt und anhand gemessener Wegunterschiede und Intensitätsdaten den Brechungsindex und den Absorptionskoeffizienten simultan innerhalb eines Algorithmus bestimmen kann.

Die Berücksichtigung der Brechung des Strahls und der Reflexionsverluste wurde bereits von MUKHERJEE ET AL. [83] für zylindrische Objekte und bekannt vorausgesetztem Brechungsindex für die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten beschrieben. Hier wird dieses Vorgehen für allgemeine Objekte mit gegebenen Grenzflächen, unbekanntem n und die Rekonstruktion von sowohl des Brechungsindex, als auch des Absorptionskoeffizienten, erweitert.

Die Ausführungen in diesen Kapiteln basieren auf der Veröffentlichung von TEPE UND SCHUSTER [108] und werden in detaillierterer Form dargestellt.

3.1. Darstellung von Grenzflächen

Um die Ausbreitung entlang gebrochener Strahlen mathematisch beschreiben zu können, werden wir zunächst die Darstellung von Grenzflächen behandeln. Die Lage der Grenzflächen des Objektes durch die Angabe der zugehörigen Normalenvektoren

wird als bekannt vorausgesetzt. Dies ist eine recht starke Annahme, allerdings ist in vielen Fällen die (ungefähre) Lage einiger Grenzflächen tatsächlich bekannt, sei es z. B. durch CAD-Zeichnungen des Bauteils oder durch eine Voruntersuchung mittels eines Röntgen-CTs. So können wir dem Algorithmus zumindest die „idealisierte“ Lage der Grenzflächen als a priori Information zur Verfügung stellen. Unbekannt dagegen bleiben weiterhin Abweichungen, wie die Grenzflächen etwaiger Störstellen, insbesondere von z. B. Lufteinschlüssen. Trotzdem wird sich zeigen, dass bereits die Kenntnis einiger Grenzflächen zu einer deutlich besseren Rekonstruktion führt.

In der Literatur existieren einige Ansätze zur Bestimmung der Grenzflächen, häufig auf Basis der Laufzeitinformation der Strahlung, die von den Grenzflächen reflektiert wurde. Die *Synthetic Aperture Focusing Technique* (SAFT, siehe z. B. [18, 74]) wird auch in der THz-Tomographie eingesetzt, etwa als „Terahertz wide aperture reflection tomography“ zur Rekonstruktion eines Metallprofils von PEARCE ET AL. [88] oder mit modifizierten SAFT-Methoden, wie denen von ZHANG ET AL. [121] und FRATSCHER [42]. Die Grenzflächen können allerdings nur sehr grob rekonstruiert werden, was oft an der mangelnden Berücksichtigung der Brechung bzgl. n liegt. Daher gibt es auch Ansätze den SAFT-Algorithmus mit Schätzungen des Brechungsindex zu erweitern und zu verbessern (siehe z. B. LITTAU ET AL. [75, 77]). Der derzeitige Stand der Rekonstruktionen von Grenzflächen aus Laufzeitdaten reicht nicht aus, um aus ihnen die a priori Information für den hier vorgestellten Algorithmus zu gewinnen. Darüber hinaus werden mit den obigen Algorithmen nur „Grenzflächenbilder“ bestimmt, aus denen in einem weiteren Schritt die benötigten Normalen noch abgeleitet werden müssen.

Die Detektion der Grenzflächen und der zugehörigen Normalen soll hier nicht weiter vertieft und daher als a priori Information vorausgesetzt werden. Wir geben die Definition von Grenzflächen an und beschreiben die nötigen Annahmen für Objekte, die aus mehreren Grenzflächen zusammengesetzt sind.

Definition 3.1 (Grenzfläche). Eine *Grenzfläche* ist eine reguläre, stetig differenzierbare und injektive Immersion $\Xi : [a, b] \rightarrow \Omega \subset \mathbb{R}^2$ mit $\Xi'(\sigma) = \frac{d\Xi}{d\sigma} \neq 0, \forall \sigma \in [a, b]$.

Eine Grenzfläche $\Xi(\sigma) := (\xi_1(\sigma), \xi_2(\sigma))^T$ wird also als eine reguläre parametrisierte Kurve in Ω mit Injektivitätsbedingung modelliert, wobei wir $\Xi'(\sigma)$ auf den Intervallgrenzen entsprechend fortsetzen. Da Ξ' nirgends verschwindet, besitzt die Kurve in jedem Punkt eine Tangente und, im Folgenden wichtiger, eine Normale. Der Tangentenvektor an Ξ in $\sigma_0 \in [a, b]$ ist gegeben durch

$$\Xi'(\sigma_0) = \left. \frac{d\Xi}{d\sigma} \right|_{\sigma=\sigma_0} = \left(\xi_1'(\sigma_0), \xi_2'(\sigma_0) \right)^T,$$

womit wir den für das Snelliussche Gesetz benötigten Normalenvektor als

$$\mathbf{n}(\sigma_0) = \left(-\xi'_2(\sigma_0), \xi'_1(\sigma_0) \right)^T$$

festlegen. Für das zu rekonstruierende Objekt seien $K \in \mathbb{N}$ Grenzflächen $\Xi_k, k = 1, \dots, K$ bekannt. Die einzelnen Grenzflächen dürfen sich berühren oder schneiden, um auch nicht glatte Grenzflächen von z. B. rechteckigen Objekten behandeln zu können. Bei solchen zusammengesetzten Grenzflächen ist allerdings die Wahl der Normale an Eck- und Schnittpunkten nicht mehr eindeutig, da mehrere Grenzflächen betroffen sind. Dieser Umstand wird durch eine lokale Glättung gehandhabt. Sei

$$P := \bigcap_{\iota=1}^{\tilde{K}} \Xi_{k_\iota}$$

der gemeinsame Schnittpunkt von $\tilde{K} \in \{1, \dots, K\}$ verschiedenen Grenzflächen Ξ_{k_ι} mit $k_\iota \in \{1, \dots, K\}, \iota = 1, \dots, \tilde{K}$. Dann sind $\sigma_{k_\iota} := \Xi_{k_\iota}^{-1}(P) \in [a_{k_\iota}, b_{k_\iota}]$ die Parameter des Schnittpunktes und $\mathbf{n}_{k_\iota}(\sigma_{k_\iota})$ die zugehörigen Normalen für $\iota = 1, \dots, \tilde{K}$. Die Normale in P wird als

$$\mathbf{n} := \frac{\sum_{\iota=1}^{\tilde{K}} \mathbf{n}_{k_\iota}(\sigma_{k_\iota})}{\left\| \sum_{\iota=1}^{\tilde{K}} \mathbf{n}_{k_\iota}(\sigma_{k_\iota}) \right\|} \quad (3.1)$$

berechnet, was sich als mittlere Orientierung der Grenzflächen, die P enthalten, auffassen lässt. Dieses Vorgehen setzt für den Schnittpunkt eine Normale, die durch eine punktuelle Glättung der Ecke in P entsteht (siehe Abbildung 3.1). Ist $\tilde{K} = 1$ wird der Normalenvektor normiert.

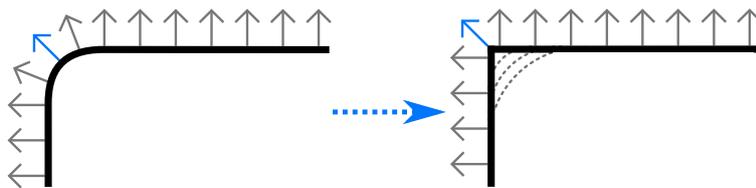


Abbildung 3.1.: Behandlung von Grenzflächen am Beispiel einer Kante: die berechnete Normale in der Unstetigkeit entspricht der Normalen einer geglätteten Grenzfläche an dieser Stelle

3.2. Strahlverlauf unter Berücksichtigung der Brechung

Die Ausbreitung der THz-Strahlen soll unter Berücksichtigung der Brechung erfolgen, weshalb der Strahl i. d. R. nicht geradlinig verläuft. Vielmehr wird der Strahl an

Grenzflächen nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz gebrochen und propagiert dann entlang aneinander gesetzter Geradenstücke. Im Folgenden werden die Abschnitte eines THz-Strahls zwischen zwei Grenzflächen als „Teilstrahlen“ $L_l \subseteq L$ mit $l = 1, \dots, \hat{K} + 1$ und der Anzahl der geschnittenen Grenzflächen \hat{K} bezeichnet.

Der erste Teilstrahl L_1 wird bis zum Erreichen der ersten Grenzfläche analog zur Computertomographie parametrisiert (siehe Kapitel 2.2.2). Mit der Parametrisierung Γ nach (2.16) lässt sich der (Anfangs-)Strahl als

$$L_1(\varphi, s) = \{\Gamma(t) : t \in [-\infty, t_1(\varphi, s)]\} \quad (3.2)$$

darstellen, wobei $t_1(\varphi, s)$ der Zeitpunkt des Auftreffens auf die jeweilige erste Grenzfläche sei. In der klassischen Computertomographie wird dieser Parameter auf $t_1 = \infty$ gesetzt.

Beim Übergang in das nächste Medium wird der Strahl gebrochen und die Strahlrichtung muss neu berechnet werden. Damit ergibt sich folgender Strahlverlauf unter Berücksichtigung der Brechung:

Für jeden (gebrochenen) Teilstrahl L_l muss der nächste Schnittpunkt mit einer Grenzfläche bestimmt werden. In diesem Schnittpunkt wird anschließend die Richtungsänderung des Strahls berechnet. Sei L_l durch einen Winkel φ_l und einen Abstand s_l vorgegeben, d.h.

$$L_l(\varphi_l, s_l) = \left\{ \Gamma_l(t) = s_l \omega_l + t \omega_l^\perp : t \in [t_{l-1}^{\Gamma_l}, t_l^{\Gamma_l}] \right\}. \quad (3.3)$$

Die Intervallgrenzen hängen ebenfalls vom jeweiligen Teilstrahl und vom Brechungsindex ab. Nun lassen sich die Schnittpunkte von L_l mit den Grenzflächen berechnen und wir bestimmen den Parameter

$$t_l^{\Gamma_l}(\varphi_l, s_l) = \min_t \left\{ t \in (t_{l-1}^{\Gamma_l}, \infty] : \Gamma_l(t) = \Xi_k(\sigma), \sigma \in [a_k, b_k], k = 1, \dots, K \right\} \quad (3.4)$$

für den die nächste Grenzfläche erreicht wird mit $l \geq 1$ und $t_0^{\Gamma_1} = -\infty$. Sei $\Xi_{\tilde{k}}(\sigma)$, $\tilde{k} \in [1, K]$ die zuerst getroffene Grenzfläche und $\tilde{\sigma}$ der zu $t_l^{\Gamma_l}$ zugehörige Parameter des Schnittpunktes $\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) = s_l \omega_l + t_l^{\Gamma_l} \omega_l^\perp$. Mit der Normalen $\mathbf{n} := \mathbf{n}(\tilde{\sigma})$ nach (3.1) können die für das Snelliussche Brechungsgesetz benötigten Brechungsindizes vor und nach der Grenzfläche durch

$$\begin{aligned} n_{l,1} &:= n(\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) - \varepsilon \mathbf{n}) \quad \text{und} \quad n_{l,2} := n(\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) + \varepsilon \mathbf{n}), \quad \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle > 0 \\ n_{l,1} &:= n(\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) + \varepsilon \mathbf{n}) \quad \text{und} \quad n_{l,2} := n(\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) - \varepsilon \mathbf{n}), \quad \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle \leq 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

mit geeignetem kleinem $\varepsilon > 0$ bestimmt werden. Der Einfallswinkel

$$\gamma_{l,1} = \arccos |\langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle|$$

entspricht dem Winkel zwischen dem Richtungsvektor des einfallenden Strahls ω_l^\perp und \mathbf{n} mit dem Skalarprodukt im \mathbb{R}^2 . Mit dem Snelliusschen Brechungsgesetz (2.5)

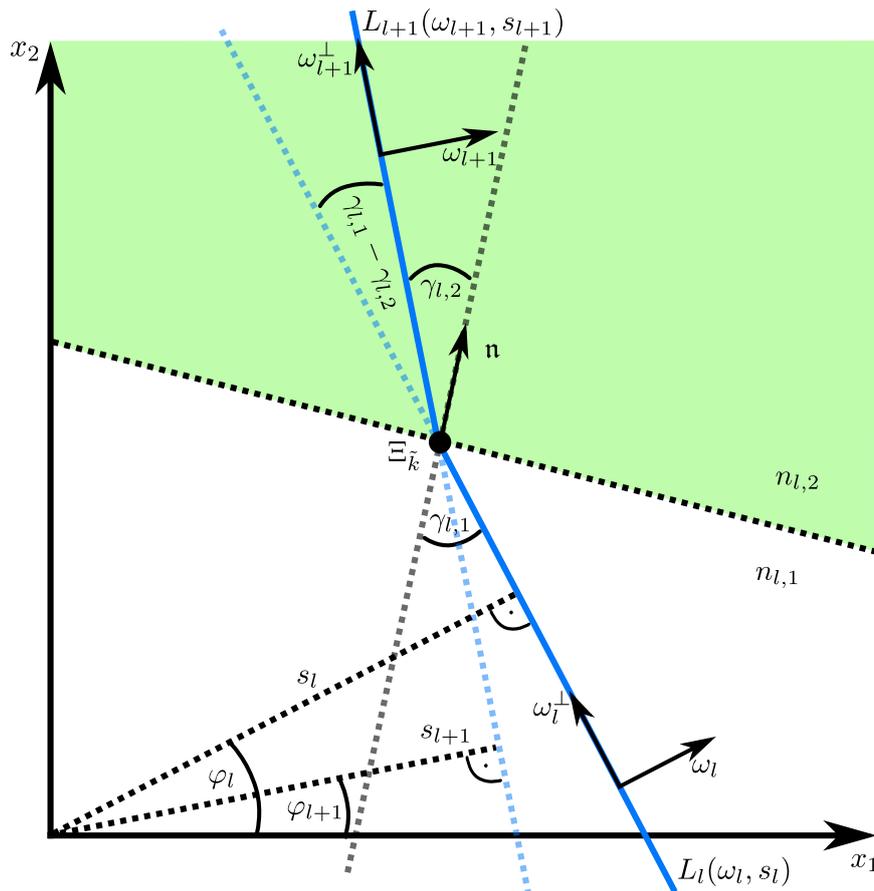


Abbildung 3.2.: Das Snelliussche Brechungsgesetz und die Parametrisierung des THz-Strahls

lässt sich der Winkel des gebrochenen Strahls bestimmen:

$$\gamma_{l,2} = \begin{cases} \pi - \gamma_{l,1}, & \text{falls } n_{l,1} > n_{l,2} \wedge \gamma_{l,1} \geq \arcsin \frac{n_{l,2}}{n_{l,1}} \text{ (Totalreflexion)} \\ \arcsin \frac{n_{l,1} \sin \gamma_{l,1}}{n_{l,2}}, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Der nächste Normalenvektor ω_{l+1} von L_{l+1} kann leicht durch eine Drehung von

$\omega_l := \omega(\varphi_l)$ um einen Winkel $\theta = \pm(\gamma_{l,1} - \gamma_{l,2})$ mit der Rotationsmatrix

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

bestimmt werden (siehe Abbildung 3.2). Das Vorzeichen von θ hängt von der Orientierung der Normalen zum einfallenden Strahl ab. Nach Anwendung von Additionstheoremen können φ_{l+1} und ω_{l+1} als

$$\omega_{l+1}(\varphi_{l+1}) := \begin{cases} \omega(\overbrace{\gamma_{l,1} - \gamma_{l,2} + \varphi_l}^{=: \varphi_{l+1}}), & \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle < 0 \wedge \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n}^\perp \rangle \leq 0 \\ \omega(\gamma_{l,1} - \gamma_{l,2} + \varphi_l), & \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle > 0 \wedge \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n}^\perp \rangle \geq 0 \\ \omega(\gamma_{l,2} - \gamma_{l,1} + \varphi_l), & \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle \leq 0 \wedge \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n}^\perp \rangle > 0 \\ \omega(\underbrace{\gamma_{l,2} - \gamma_{l,1} + \varphi_l}_{=: \theta}), & \text{falls } \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n} \rangle \geq 0 \wedge \langle \omega_l^\perp, \mathbf{n}^\perp \rangle < 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

berechnet werden. Der neue Abstand vom Ursprung s_{l+1} von L_{l+1} ergibt sich direkt aus dem Schnittpunkt der Geraden $(0 + u\omega_{l+1}) \cap (\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) + t\omega_{l+1}^\perp)$ mit den Parametern t und u . Mit $\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) = (\xi_1, \xi_2)^\top$ erhalten wir zunächst

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi_{l+1} \\ \sin \varphi_{l+1} \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\sin \varphi_{l+1} \\ \cos \varphi_{l+1} \end{pmatrix} t$$

und Auflösen nach t und u ergibt

$$t = \xi_1 \sin \varphi_{l+1} - \xi_2 \cos \varphi_{l+1} \quad \text{und} \quad u = \xi_1 \cos \varphi_{l+1} + \xi_2 \sin \varphi_{l+1},$$

womit der Schnittpunkt als

$$\begin{aligned} (0 + u\omega_{l+1}) \cap (\Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}) + t\omega_{l+1}^\perp) &= (\xi_1 \cos \varphi_{l+1} + \xi_2 \sin \varphi_{l+1}) \begin{pmatrix} \cos \varphi_{l+1} \\ \sin \varphi_{l+1} \end{pmatrix} \\ &= \langle \Xi_{\tilde{k}}(\tilde{\sigma}), \omega_{l+1} \rangle \omega_{l+1} \end{aligned}$$

gegeben ist. Damit gilt

$$s_{l+1} = u = \xi_1 \cos \varphi_{l+1} + \xi_2 \sin \varphi_{l+1}. \quad (3.7)$$

Dementsprechend ist der gesamte gebrochene Strahlverlauf durch die Vereinigung

$$L(\varphi, s) := \bigcup_{l=1}^{\hat{K}+1} \left\{ \Gamma_l(t) : t \in \left[t_{l-1}^{\Gamma_l}, t_l^{\Gamma_l} \right] \right\} \quad (3.8)$$

aller Teilstrahlen $L_l(\varphi_l, s_l)$ nach (3.6) und (3.7) mit einer Anfangsrichtung $\varphi = \varphi_1$ und einem Anfangsabstand vom Ursprung $s = s_1$, $t_0^{\Gamma_1} = -\infty$, $t_{\hat{K}+1}^{\Gamma_{\hat{K}+1}} = \infty$ und der Anzahl der getroffenen Grenzflächen \hat{K} gegeben. Die Anzahl \hat{K} ist anfangs unbekannt und hängt vom Strahlverlauf ab. Dabei ist zu beachten, dass beim Übergang von einem Teilstrahl zum nächsten die linke Intervallgrenze der neuen Parametrisierung angepasst werden muss. Der Parameter $t_{l-1}^{\Gamma_l}$ kann leicht durch Einsetzen von $\Xi_k(\tilde{\sigma})$ in Γ_l bestimmt werden. Wir suchen $t_{l-1}^{\Gamma_l}$ derart, dass

$$\Xi_k(\tilde{\sigma}) \stackrel{!}{=} s_l \omega_l + t_{l-1}^{\Gamma_l} \omega_l^\perp$$

erfüllt ist und erhalten nach dem Auflösen:

$$t_{l-1}^{\Gamma_l} = \begin{cases} s_l - \frac{2}{\sqrt{2}} \xi_1, & \text{falls } \varphi_l \in \left\{ \frac{\pi}{4}, \frac{5\pi}{4} \right\} \\ \frac{\xi_1 + \xi_2 - s_l (\cos(\varphi_l) + \sin(\varphi_l))}{\cos(\varphi_l) - \sin(\varphi_l)}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.9)$$

Bemerkung 3.2. Man beachte, dass die Berechnung der gebrochenen Strahlen vom Brechungsindex abhängt, welcher beim inversen Problem allerdings unbekannt ist! Daher sind die tatsächlichen Strahlverläufe anfangs ebenso unbekannt und werden im Laufe des Rekonstruktionsprozesses angenähert. Dieses Problem tritt in ähnlicher Form auch in der Ultraschall-Vektortomographie auf, siehe SCHRÖDER UND SCHUSTER [100].

Bemerkung 3.3. Eine ausführlichere Berechnung der Schnittpunkte eines Teilstrahls mit einer Grenzfläche $\Xi(\tilde{\sigma})$ bzw. der Normalen $\mathbf{n}(\tilde{\sigma})$ und der zugehörigen Parameter \tilde{t} und $\tilde{\sigma}$ ist im Anhang A für Grenzflächen in Form von Geraden und Ellipsen zu finden.

3.3. Algorithmentwicklung

Wenden wir den gebrochenen Strahlverlauf (3.8) auf die Integralgleichungen (2.24) an, erhalten wir

$$\mathcal{R}^\nu f = \sum_{l=1}^{\hat{K}+1} \int_{t_{l-1}^{\Gamma_l}}^{t_l^{\Gamma_l}} f(s_l' \omega_l^\nu + t \omega_l^{\nu\perp}) dt = g^\nu, \quad \nu = 1, \dots, N. \quad (3.10)$$

Die Gleichung (3.10) wird analog zur ART mit Pixeln diskretisiert. Die modifizierte ART erfordert wegen der Berücksichtigung der Brechung eine komplexere Berechnung der Strahlwege und damit der Matrix A . Die beiden resultierenden linearen Gleichungssysteme (vgl. Problem 2.26)

$$\begin{aligned} AF_{\text{ref}} &= g_{\text{ref}} \\ AF_{\text{abs}} &= g_{\text{abs}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

für den Brechungsindex mit $F_{\text{ref}} \approx n - 1$, den Absorptionskoeffizienten mit $F_{\text{abs}} \approx \alpha$, den Messdaten des Wegunterschieds $g_{\text{ref}} = d$ und des Transmissionsgrades $g_{\text{abs}} = \ln(1/\tau)$ besitzen dieselbe Struktur und verwenden die gleichen Strahlwege, weshalb sie simultan zur Berechnung des komplexen Brechungsindex mittels der Kaczmarz-Methode gelöst werden. Die Einbeziehung der Fresnelverluste führt zu einer Korrektur von g_{abs} , welche wir im nächsten Kapitel beschreiben.

3.3.1. Berücksichtigung der Fresnelschen Formeln

Reflexionsverluste beeinflussen den gemessenen Transmissionsgrad. Dies hat zur Folge, dass am Empfänger eine Verringerung der Intensität gemessen wird, welche sich aus Reflexions- und Absorptionsverlusten zusammensetzt. Das Ziel ist, die gemessenen Intensitätsdaten so zu korrigieren, dass nur die Absorptionsverluste für die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten berücksichtigt werden. Ohne diese Korrektur wird α zu groß rekonstruiert, da die Reflexionsverluste ebenfalls der Absorption zugeschrieben werden würden. Dieses Vorgehen wurde bei MUKHERJEE ET AL. [83] bereits erfolgreich für zylindrische Objekte durchgeführt und wird hier für beliebige Grenzflächen und anfangs unbekanntem Brechungsindex erweitert.

Nach den Fresnelschen Formeln ist der Reflexionsverlust an einer Grenzfläche durch ρ nach Gleichung (2.6) gegeben. Die hierfür benötigten Winkel des einfallenden und transmittierten Strahls sind aus der Berechnung der Strahlwege nach dem Snelliusschen Gesetz bekannt und die Brechungsindizes vor und nach der Grenzfläche können nach (3.5) bestimmt werden. Sei $\hat{K} \in \mathbb{N}$ die Anzahl der Grenzflächen, die vom Strahl L geschnitten wurden und ρ_{k_ν} der Reflexionsverlust an der Grenzfläche Ξ_{k_ν} mit $k_\nu \in \{1, \dots, \hat{K}\}$, $\nu = 1, \dots, \hat{K}$. Die emittierte Intensität verringert sich durch die zugehörigen Reflexionsverluste um den Faktor

$$C_{\text{abs}} := \prod_{\nu=1}^{\hat{K}} (1 - \rho_{k_\nu}).$$

Des Weiteren wird die Intensität des Strahls durch die Absorptionsverluste

$$a = \exp\left(-\int_L \alpha(x) dx\right)$$

nach dem Lambert-Beerschen Gesetz verringert. Am Empfänger wird demnach

$$\tau = a \prod_{\nu=1}^{\hat{K}} (1 - \rho_{k_\nu})$$

gemessen. Da α rekonstruiert werden soll, kann die rechte Seite der zugehörigen Integralgleichung (2.18) wie folgt korrigiert werden:

$$\tilde{g}_{\text{abs}} = \ln \left(\frac{I_0}{I} \right) = \ln \left(\frac{1}{a} \right) = \ln \left(\frac{1}{\tau} \prod_{\iota=1}^{\hat{K}} (1 - \rho_{k_\iota}) \right). \quad (3.12)$$

Bemerkung 3.4. Im Folgenden betrachten wir ausschließlich senkrecht polarisierte Strahlung, wie sie auch vom hiesigen THz-Tomographen generiert wird. Analoge Betrachtungen sind für parallele Polarisation ebenfalls möglich. Darüber hinaus nehmen wir an, dass alle Grenzflächen eines Probekörpers senkrecht zum betrachteten Gebiet Ω sind. Damit liegen alle Normalen \mathbf{n} und alle Einfallsebenen in Ω und die senkrechte Polarisation bleibt nach der Brechung an einer Grenzfläche erhalten (vgl. [14]). Andernfalls kann sich die Polarisation der THz-Strahlung durch das Auftreffen auf einer Grenzfläche ändern und die Korrektur der Messdaten lässt sich nicht mehr so einfach wie in (3.12) durchführen.

3.3.2. Berücksichtigung des gebrochenen Strahlverlaufs

Die Matrixeinträge $a_{\nu\mu}$ entsprechen analog zur klassischen ART der Länge, mit der der (gebrochene) Strahl ν das Pixel μ durchläuft. Allerdings kann die Berechnung der $a_{\nu\mu}$ eines Strahls ν nicht auf einmal erfolgen, da der Strahlweg selbst durch die Materialparameter beeinflusst wird. Die Matrix A hängt demnach sowohl von der a priori Information über die Grenzflächen, als auch vom zum rekonstruierenden $n \approx 1 + F_{\text{ref}}$ ab. Stattdessen wird zunächst der Parameter $t_l^{\Gamma_l}$ des Erreichens der nächsten Grenzfläche für den Teilstrahl $L_l^\nu(\varphi_l, s_l)$ des ν -ten Strahls wie in Kapitel 3.2 bestimmt. Anschließend können die $a_{\nu\mu}$ bis zur Grenzfläche berechnet werden. Im Anschluss werden der neue Winkel φ_{l+1} nach dem Snelliusschen Gesetz und der Reflexionsverlust ρ_l an der aktuellen Grenzfläche $\Xi_{\tilde{k}}$ nach den Fresnelschen Formeln berechnet. Dann können die Schritte für den nächsten Teilstrahl L_{l+1}^ν , $l = 1, \dots, \hat{K}$ und $\nu = 1, \dots, N$ wiederholt werden. In Abbildung 3.3 haben wir die Berechnung der Matrix A bei einem gebrochenen Strahlverlauf skizziert (siehe im Vergleich dazu auch Abbildung 2.7a der klassischen ART).

Der Pseudocode für die Berechnung von A und der Reflexionsverluste ist in Algorithmus 3.1 gegeben. Die Rekonstruktion von $\text{Re}(\tilde{n}) = n$ hat einen direkten Einfluss auf die Rekonstruktion von α , da die Reflexionsverluste unter Verwendung der Brechungsindizes der zur Grenzfläche gehörenden Materialien berechnet werden. Die restlichen Schritte der ART bleiben identisch. Für die Rekonstruktion von $n - 1$ und α kann das gleiche A verwendet werden und somit erfolgt die Berechnung der Iterierten F_{ref}^r

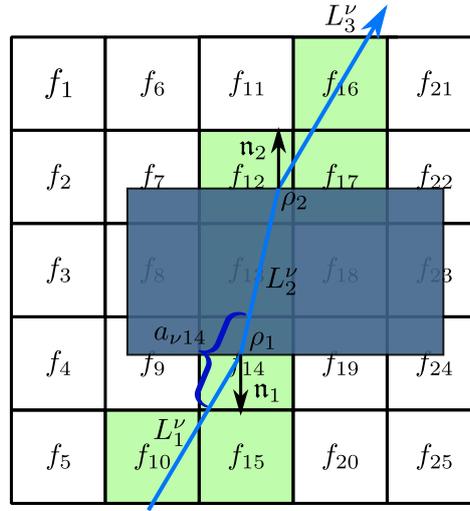


Abbildung 3.3.: Skizze zur Berechnung der Matrix A bei der modifizierten ART mit eingezeichnetem Probekörper mitsamt Normalen, Reflexionsverluste und Teilstrahlen

F_{abs}^r in derselben Schleife. Wir führen zwei Abbildungen ein, die die Berechnungen in Algorithmus 3.1 zusammenfassen.

Definition 3.5. Die Abbildung

$$\mathfrak{A} : \mathbb{R}_+^M \rightarrow \mathbb{R}_+^{N \times M}, \quad F_{\text{ref}} \mapsto A,$$

die zu gegebenen Grenzflächen $\Xi_k, k = 1, \dots, K$, Anfangswinkel φ^ν und -abstände $s^\nu, \nu = 1, \dots, N$ und einer Diskretisierung mit M Pixel einer Approximation an den Brechungsindex $F_{\text{ref}} \in \mathbb{R}_+^M$ die zugehörige Systemmatrix $A \in \mathbb{R}_+^{N \times M}$ nach Algorithmus 3.1 zuweist, heißt *Strahlwegabbildung*.

Die Abbildung

$$\mathfrak{g} : \mathbb{R}_+^M \rightarrow \mathbb{R}^N, \quad F_{\text{ref}} \mapsto \tilde{g}_{\text{abs}},$$

welche F_{ref} über die Fresnelschen Reflexionsverluste die korrigierten Messwerte \tilde{g}_{abs} nach Algorithmus 3.1 zuweist, heißt *Messwertkorrektur*.

Da schlimmstenfalls keinerlei Information über den Brechungsindex vom zu rekonstruierenden Objekt am Anfang vorliegt und die Anfangsschätzung daher dem komplexen Brechungsindex von Luft entspricht, d. h. $F_{\text{ref}}^0 = F_{\text{abs}}^0 = 0$, ist es sinnvoll das Kaczmarz-Verfahren mehrmals hintereinander anzuwenden und A und C_{abs} für die Intensitätsmessdaten zwischen den Verfahren anhand der aktuellen Approximationen des Brechungsindex neu zu berechnen. Diese Aktualisierung der Strahlwege, ausgehend von einer Anfangsschätzung wie $F_{\text{ref}}^0 = 0$, wurde schon in [60] und [98]

Algorithmus 3.1 Berechnung der Matrix A und der korrigierten Messwerte \tilde{g}_{abs}

Input: Approximation des Brechungsindex F_{ref} , Grenzflächen $\Xi_k, k = 1, \dots, K$, Anfangswinkel φ_1^ν und Anfangsabstände $s_1^\nu, \nu = 1, \dots, N$

- 1: **for** $\nu = 1$ to N **do**
- 2: $\rho = 0, t_0^{\Gamma_1} = -\infty, l = 1$
- 3: **while** $t_{l-1}^{\Gamma_l} < \infty$ **do**
- 4: Berechne $t_l^{\Gamma_l}$ nach (3.4)
- 5: Berechne $a_{\nu\mu} = \text{Länge von } (L_l^\nu \cap S_\mu)$ für $t \in [t_{l-1}^{\Gamma_l}, t_l^{\Gamma_l}]$
- 6: **if** $t_l^{\Gamma_l} < \infty$ **then**
- 7: Berechne den Teilstrahl $L_{l+1}^\nu(\varphi_{l+1}^\nu, s_{l+1}^\nu)$ mit (3.6) und (3.7)
- 8: Berechne die Reflexionsverluste ρ_l^ν an $\Xi_{\tilde{k}}$ mit (2.6)
- 9: Berechne $t_l^{\Gamma_{l+1}}$ nach (3.9)
- 10: **else**
- 11: $t_l^{\Gamma_{l+1}} = \infty$
- 12: **end if**
- 13: $l = l + 1$
- 14: **end while**
- 15: $\hat{K}^\nu = l - 2;$
- 16: Berechne $C_{\text{abs}}^\nu = \prod_{l=1}^{\hat{K}^\nu} (1 - \rho_l^\nu)$
- 17: **end for**
- 18: $\tilde{g}_{\text{abs}}^\nu = \ln\left(\frac{C_{\text{abs}}^\nu}{\tau^\nu}\right), \nu = 1, \dots, N$
- 19: **return** $A, \tilde{g}_{\text{abs}}$

im Zusammenhang mit Rekonstruktionen auf Basis der Eikonalgleichung vorgeschlagen. In diesem Fall entspricht das erste Kaczmarz-Verfahren der klassischen ART, da keinerlei Brechungen berücksichtigt werden. Anschließend erfolgen Schritte mit der modifizierten ART.

3.3.3. Ablaufplan

Wie zuvor beschrieben, werden wir mehrere Kaczmarz-Verfahren nacheinander ausführen. Wir geben die zugehörigen Iterierten zum r -ten Sweep in der i -ten Anwendung des Kaczmarz-Verfahrens mit $\tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}$ und $\tilde{F}_{\text{abs}}^{r,i}$ an. Sei Ψ die Anzahl der Anwendungen des Kaczmarz-Verfahrens. Damit gibt Ψ auch vor, wie oft die Strahlwege aktualisiert bzw. A neu berechnet und die Gleichungssysteme gelöst werden sollen. Für jede Anwendung können jeweils die Anzahl der Sweeps $\psi = (r_1^*, \dots, r_\Psi^*)$ und die Relaxationsparameter für den Brechungsindex $\lambda_{\text{ref}} = (\lambda_{\text{ref}}^1, \dots, \lambda_{\text{ref}}^\Psi)$ und den Absorptionskoeffizienten $\lambda_{\text{abs}} = (\lambda_{\text{abs}}^1, \dots, \lambda_{\text{abs}}^\Psi)$ angegeben werden. Eine geeignete Wahl von ψ ist hierbei wegen der Semikonvergenz iterativer Verfahren bei inversen Problemen wichtig. Die Abbruchindizes $r_i^*, i = 1, \dots, \Psi$ sind demnach die Regularisierungsparameter

der modifizierten ART und müssen geeignet gewählt werden. Die Iterationsvorschrift für die Bestimmung der Approximation

$$\tilde{n}^\Psi := n^\Psi + i\alpha^\Psi \frac{c_0}{2\omega} := \left(1 + \tilde{F}_{\text{ref}}^{0,\Psi+1}\right) + i \left(\tilde{F}_{\text{abs}}^{0,\Psi+1} \frac{c_0}{2\omega}\right)$$

an den komplexen Brechungsindex aufgrund von THz-Messdaten wird im Algorithmus 3.2 beschrieben. Insgesamt ergibt sich der Ablaufplan der modifizierten ART gemäß Abbildung 3.4.

Algorithmus 3.2 Modifizierte ART zur Berechnung von $\tilde{n} \approx \tilde{n}^\Psi := n^\Psi + i\alpha^\Psi$

Input: Startwerte $\tilde{F}_{\text{ref}}^{0,1}$, $\tilde{F}_{\text{abs}}^{0,1}$

```

1: for  $i = 1$  to  $\Psi$  do
2:   Berechne  $A_i := \mathfrak{A}(\tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i})$  und  $\tilde{g}_{\text{abs},i} := \mathfrak{g}(\tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i})$  nach Algorithmus 3.1
3:    $r = 0$ 
4:   while  $r \leq r_i^*$  do
5:      $F_{\text{ref}}^0 = \tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}$ ,  $F_{\text{abs}}^0 = \tilde{F}_{\text{abs}}^{r,i}$ 
6:     for  $\nu = 1$  to  $N$  do
7:        $F_{\text{ref}}^\nu = F_{\text{ref}}^{\nu-1} + \lambda_{\text{ref},i} \frac{g_{\text{ref}}^\nu - \langle a_i^\nu, F_{\text{ref}}^{\nu-1} \rangle}{\|a_i^\nu\|_2^2} a_i^\nu$ 
8:        $F_{\text{abs}}^\nu = F_{\text{abs}}^{\nu-1} + \lambda_{\text{abs},i} \frac{\tilde{g}_{\text{abs},i}^\nu - \langle a_i^\nu, F_{\text{abs}}^{\nu-1} \rangle}{\|a_i^\nu\|_2^2} a_i^\nu$ 
9:     end for
10:     $\tilde{F}_{\text{ref}}^{r+1,i} = F_{\text{ref}}^N$ ,  $\tilde{F}_{\text{abs}}^{r+1,i} = F_{\text{abs}}^N$ 
11:     $r = r + 1$ 
12:   end while
13:    $\tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i+1} = F_{\text{ref}}^N$ ,  $\tilde{F}_{\text{abs}}^{0,i+1} = F_{\text{abs}}^N$ 
14: end for
15: return  $\tilde{n} \approx \tilde{n}^\Psi := \left(1 + \tilde{F}_{\text{ref}}^{0,\Psi+1}\right) + i \left(\tilde{F}_{\text{abs}}^{0,\Psi+1} \frac{c_0}{2\omega}\right)$ 

```

Wir geben nun eine einfache, heuristische Strategie für die Wahl der Abbruchindizes r_i^* an, die sich für die modifizierte ART bewährt hat. Hierfür werden die Residuen der aktuellen und der letzten Iteration verwendet und mit dem „Anfangsresiduum“, d. h. zum Startwert der i -ten Iteration, ins Verhältnis gesetzt. So kann eine Toleranzgrenze angegeben werden, die sich speziell auf die Verkleinerung des Residuums in der i -ten Iteration bezieht:

Wir brechen die i -te Iteration ab, sobald der Abbruchindex

$$r_i^* = \min \left\{ r \in \mathbb{N} : \frac{\|A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{r+1,i} - A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}\|}{\|A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i} - g_{\text{ref}}\|} < \zeta_i \right\} \quad (3.13)$$

erreicht ist mit Toleranzgrenzen $\zeta_i = \frac{\zeta_1}{u^{i-1}}$, $\zeta_1 > 0$ und Verkleinerungsfaktor $u > 1$

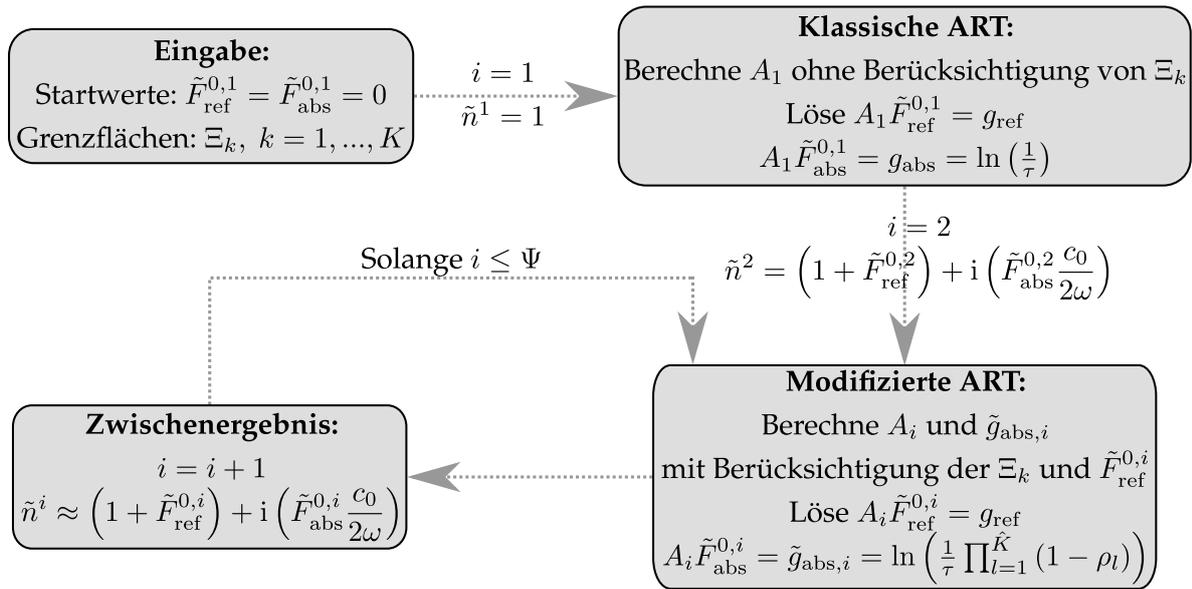


Abbildung 3.4.: Ablaufplan der modifizierten ART

für $i = 1, \dots, \Psi$. Für $\tilde{F}_{\text{abs}}^{r,i}$ können analog die Abbruchindizes bestimmt werden. Die Verkleinerung von ζ_i hat zur Folge, dass die ersten Kaczmarz-Verfahren früher abgebrochen werden, da ζ_i innerhalb weniger Iterationen erreicht wird. Dieses Vorgehen ist sinnvoll, da in den ersten Iterationen der Modellfehler groß ist und ein früher Abbruch eine Aktualisierung der Strahlwege und damit der Matrix A_i ermöglicht, wodurch der Modellfehler verringert wird. Der Faktor u gibt an, wie stark ζ_i für die nächste Anwendung des Kaczmarz-Verfahrens verkleinert werden soll.

Wir können das Verfahren weiter automatisieren, indem wir auch Ψ freigeben und $\lambda_{\text{ref},i}$ bzw. $\lambda_{\text{abs},i}$ in Abhängigkeit von i wählen. So können wir die modifizierte ART beenden, nachdem das Residuum unter die Grenze ζ_{target} gefallen ist. Die Anzahl der Kaczmarz-Verfahren wird also durch

$$\Psi = \min \left\{ i \in \mathbb{N} : \|A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i} - g_{\text{ref}}\| < \zeta_{\text{target}} \right\}$$

festgelegt. Die Relaxationsparameter wählen wir dann z. B. mit $\lambda_{\text{ref},i} = \frac{\lambda_{\text{ref},1}}{v^{i-1}}$ mit $v > 1$ für $i = 1, \dots, \Psi$ und $\lambda_{\text{abs},i}$ analog. In diesem Fall müssen nur noch die Startwerte $\lambda_{\text{ref},1}$, $\lambda_{\text{abs},1}$, ζ_1 , ζ_{target} und die Faktoren u und v angegeben werden.

Wir verzichten bei den Rekonstruktionen in Kapitel 4 auf die Wahl von ζ_{target} und den Relaxationsparametern nach dem obigen Schema, da die Wahl von λ_{ref} und λ_{abs} oft problemabhängig ist und eine feste Wahl von $\Psi = 5$ i. d. R. ausreicht. So können wir die Relaxationsparameter problemangepasst und „per Hand“ wählen (Trial-and-Error-Prinzip), um bessere Rekonstruktionen zu erreichen.

Eine Wahl der Parameter mit bewährten, nicht heuristischen Verfahren, wie dem Diskrepanzprinzip von Morozov (siehe [26]) wäre natürlich auch möglich, soll hier aber nicht weiter vertieft werden.

3.4. Konvergenzbetrachtungen

Die Iterationsvorschrift der modifizierten ART lautet entsprechend der Algorithmen 3.1 und 3.2

$$A_1 := \mathfrak{A}(\hat{F}_{\text{ref}}^{0,1}), \quad \hat{F}_{\text{ref}}^{0,1} = \hat{F}_{\text{abs}}^{0,1} = 0, \quad \tilde{g}_{\text{abs},1} = g_{\text{abs}}$$

$$\hat{F}_{\text{ref}}^{k+1,i} = \hat{F}_{\text{ref}}^{k,i} + \lambda_{\text{ref},i} \frac{g_{\text{ref}}^\nu - \langle a_i^\nu, \hat{F}_{\text{ref}}^{k,i} \rangle}{\|a_i^\nu\|^2} a_i^\nu, \quad \nu = (k \bmod N) + 1,$$

$$\hat{F}_{\text{abs}}^{k+1,i} = \hat{F}_{\text{abs}}^{k,i} + \lambda_{\text{abs},i} \frac{\tilde{g}_{\text{abs},i}^\nu - \langle a_i^\nu, \hat{F}_{\text{abs}}^{k,i} \rangle}{\|a_i^\nu\|^2} a_i^\nu, \quad k = 0, 1, \dots, k_i^* - 1$$

$$A_{i+1} := \mathfrak{A}(\hat{F}_{\text{ref}}^{k_i^*,i}), \quad \tilde{g}_{\text{abs},i+1} := \mathfrak{g}(\hat{F}_{\text{ref}}^{k_i^*,i}), \quad \hat{F}_{\text{ref}}^{0,i+1} := \hat{F}_{\text{ref}}^{k_i^*,i}, \quad \hat{F}_{\text{abs}}^{0,i+1} := \hat{F}_{\text{abs}}^{k_i^*,i}$$

$$i = 1, 2, \dots, \Psi.$$

Die Stoppindizes seien als $k_i^* = r_i^* N$ gewählt und es gelte wie zuvor $\tilde{F}_i^{r,i} = \hat{F}_i^{rN,i}$. Die Iteration endet also nach einem letzten vollständigen Sweep durch die Zeilen von A . Der Übersichtlichkeit halber verzichten wir im Folgenden auf die unteren Indizes bei den Iterierten ($\hat{F}_{\text{ref}}, \hat{F}_{\text{abs}}$) und den Messdaten ($g_{\text{ref}}, g_{\text{abs}}$), die auf den Brechungsindex bzw. Absorptionskoeffizienten hinweisen und betrachten das Konvergenzverhalten für ein allgemeines F und g mit der Iterationsvorschrift

$$A_1 := \mathfrak{A}(\hat{F}_0^0), \quad \hat{F}_0^0 = 0$$

$$\hat{F}_i^{k+1} = \hat{F}_i^k + \lambda_i \frac{g_i^\nu - \langle a_i^\nu, \hat{F}_i^k \rangle}{\|a_i^\nu\|^2} a_i^\nu, \quad \nu = (k \bmod N) + 1, \quad (3.14)$$

$$k = 0, 1, \dots, k_i^* - 1$$

$$A_{i+1} := \mathfrak{A}(\hat{F}_i^{k_i^*}), \quad g_{i+1} := \mathfrak{g}(\hat{F}_i^{k_i^*}), \quad \hat{F}_{i+1}^0 := \hat{F}_i^{k_i^*}, \quad i = 1, 2, \dots, \Psi.$$

Die Iterationsvorschrift erfasst sowohl den Brechungsindex als auch den Absorptionskoeffizienten. Für die Rekonstruktion des Brechungsindex fällt die Messwertkorrektur weg, d. h. $g_i = g_{\text{ref}}$ für alle i . Beim Absorptionskoeffizienten gehen wir weiterhin davon aus, dass sich die Matrizen A_i und die Messwerte g_i entsprechend der Iterierten des Brechungsindex ändern, auch wenn das in (3.14) nicht explizit dargestellt ist.

Es ist eine sehr herausfordernde Aufgabe, die Konvergenz der modifizierten ART gegen die exakte oder die Minimum-Norm-Lösung zu zeigen (wie es mit Satz 2.28 für die klassische ART möglich ist), d. h. $\tilde{n}^\Psi \rightarrow \tilde{n}$ für $\Psi \rightarrow \infty$. Da die Strahlwege bzw. die Matrix $A = \mathfrak{A}(\text{Re}(\tilde{n}))$ und damit der Vorwärtsoperator vom Realteil der Lösung \tilde{n} abhängen, ist die Rekonstruktion von \tilde{n} ein äußerst nichtlineares Problem und wir müssen gleichzeitig die Konvergenz von $\tilde{n}^\Psi \rightarrow \tilde{n}$ und $\mathfrak{A}(\text{Re}(\tilde{n}^\Psi)) \rightarrow \mathfrak{A}(\text{Re}(\tilde{n}))$ zeigen. Dieses Problem ist mathematisch eng mit dem inversen kinematischen Problem der Seismik verwandt, bei dem der Brechungsindex aus Laufzeitmessungen berechnet werden soll. Auch dort konnten bislang nur schwache Konvergenzresultate gezeigt werden, wenn ein Abstiegsverfahren verwendet wird (siehe z. B. SCHRÖDER UND SCHUSTER [100]).

In diesem Abschnitt zeigen wir die Konvergenz der Iteration unter der Annahme, dass die Konvergenz des Vorwärtsoperators gegeben ist. Des Weiteren betrachten wir die Konvergenz für eine a priori Parameterwahl und nicht für die in Kapitel 3.3.3 vorgestellte Heuristik.

Sei $A := \mathfrak{A}(n)$ die Matrix und $g := \mathfrak{g}(n)$ die Daten zur gesuchten Lösung n und

$$AF = g \quad (3.15)$$

das zugehörige lineare Gleichungssystem. Im i -ten Schritt wird das Gleichungssystem

$$A_i F_i = g_i \quad (3.16)$$

gelöst. Die Berechnung der Strahlwege bzw. von A_i und die Korrektur der Messwerte g_i basieren dabei auf der aktuellen Approximation $n \approx 1 + \tilde{F}_{i-1}^{r_{i-1}^*}$. Wir setzen für die iterierten A_i und g_i eine gewisse Nähe zu der (gesuchten) Matrix A und den Daten g voraus:

$$\|A_i - A\| \leq \eta_i, \quad (3.17)$$

$$\|g_i - g\| \leq \varepsilon_i. \quad (3.18)$$

Die erste Voraussetzung entspricht einer Beschränkung des Modellfehlers, während die zweite den Abstand der iterierten Messdaten zu den vollständig korrigierten Daten g beschränkt. Wir interpretieren den Unterschied zwischen A und den iterierten Matrizen A_i also als Störung der gesuchten Matrix bzw. des Vorwärtsoperators, wie wir es in Kapitel 2.2.5 bereits motiviert haben. Gleichung (3.18) ist nicht mit verrauschten Daten zu verwechseln. Zum Vergleich: bei verrauschten Daten g_i^δ mit $\|g_i - g_i^\delta\| \leq \delta_i$ und dem Rauschpegel $\delta_i > 0$ gilt hier

$$\|g_i^\delta - g\| \leq \|g_i - g\| + \|g_i - g_i^\delta\| = \varepsilon_i + \delta_i =: \mathbf{e}_i,$$

mit dem Gesamtdatenfehler ϵ_i . Wir bezeichnen zudem mit $F^\dagger = A^\dagger g$ bzw. $F_i^\dagger = A_i^\dagger g_i$ die Minimum-Norm-Lösungen von (3.15) bzw. (3.16) und kennzeichnen die Iterierten mit verrauschten Daten mit $\tilde{F}_i^{\delta,r} = \hat{F}_i^{\delta,rN}$.

Das folgende Lemma ist für eine Abschätzung in den folgenden Konvergenzbetrachtungen hilfreich.

Lemma 3.6. Für die Funktion $f(x) = \frac{b^2 x}{1-bx}$ mit $b \in \mathbb{R}^+$ und $0 \leq x \leq x_0 < \frac{1}{b}$ gilt

$$f(x) \leq c(x_0)b^2 x$$

für Konstanten $c(x_0) \geq \frac{1}{1-bx_0}$.

Beweis. Sei $c(x_0) \geq \frac{1}{1-bx_0}$. Dann ist $c(x_0)b^2 x_0 \geq \frac{b^2 x_0}{1-bx_0} \geq \frac{b^2 x}{1-bx}$ für $0 \leq x \leq x_0 < \frac{1}{b}$. \square

Wir können nun eine Konvergenzaussage für die modifizierte ART angeben. Dafür müssen die Voraussetzungen der Sätze zur Konvergenzrate von ART (Korollar 2.34) und der Störungstheorie der verallgemeinerten Inverse (Satz 2.38 und Satz 2.42) aus Kapitel 2.2 erfüllt sein.

Satz 3.7 (Konvergenzrate für die modifizierte ART). Sei $0 < \lambda_i < (\sigma_{\max}(|\tilde{L}_i|) + \frac{N}{2})^{-1}$ mit $|\tilde{L}_i| := \frac{|L_i|}{\lambda_i}$ und

$$L_i = \begin{cases} 0, & \text{für } k \geq j \\ \lambda_i \frac{(a_i^j)^\top a_i^k}{\|a_i^j\| \|a_i^k\|}, & \text{sonst} \end{cases}, \quad j, k = 1, \dots, N,$$

$\text{rang}(A) = \text{rang}(A_i)$ und $\eta_i < 1/\|A^\dagger\|$ für alle i . Darüber hinaus sei die Quellbedingung

$$\tilde{F}_i^0 - F_i^\dagger = (M_i^{\frac{1}{2}} A_i^\top M_B^i M_i^{\frac{1}{2}} A_i)^{\mu_i} w \quad \text{für ein } 0 < \mu_i < \infty$$

mit $M_i = \text{diag}(\lambda \|a_i^\nu\|^{-2})$, $\nu = 1, \dots, N$ und $M_B^i = (I + L_i)^{-1}$ für alle i erfüllt.

Dann genügen die Iterierten der modifizierten ART (3.14) der Fehlerabschätzung

$$\|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| \leq c \frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\| \eta_i} (\|g\| + \epsilon_i) + \|A^\dagger\| \epsilon_i + \tilde{C}_i \delta_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}$$

mit der a priori Parameterwahl $r_i^* \sim \delta_{M_i}^{\frac{-2}{2\mu+1}}$.

Falls $\eta_i = \mathcal{O}(\epsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}})$ ist, gilt

$$\|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| = \mathcal{O}(\epsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}})$$

für $\epsilon_i \rightarrow 0$ für $i \rightarrow \infty$.

Beweis. Mithilfe der Dreiecksungleichung erreichen wir den Zusammenhang

$$\|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| \leq \|F^\dagger - F_i^\dagger\| + \|F_i^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\|. \quad (3.19)$$

Wir betrachten zunächst nur den ersten Term:

$$\begin{aligned} \|F^\dagger - F_i^\dagger\| &= \|A^\dagger g - A_i^\dagger g_i\| \\ &= \|(A^\dagger - A_i^\dagger)g_i + A^\dagger(g - g_i)\| \\ &\leq \|(A^\dagger - A_i^\dagger)g_i\| + \|A^\dagger\|\varepsilon_i \\ &\leq \|A^\dagger - A_i^\dagger\|\|g_i\| + \|A^\dagger\|\varepsilon_i. \end{aligned}$$

Satz 2.42 liefert für $B = A_i$

$$\|A^\dagger - A_i^\dagger\| \leq c\|A_i^\dagger\|\|A^\dagger\|\|A_i - A\|$$

und mit $\|g_i\| = \|g - g + g_i\| \leq \|g\| + \varepsilon_i$ erhalten wir

$$\|F^\dagger - F_i^\dagger\| \leq c\|A_i^\dagger\|\|A^\dagger\|\eta_i(\|g\| + \varepsilon_i) + \|A^\dagger\|\varepsilon_i.$$

Mit Satz 2.38 können wir für $\eta_i < 1/\|A^\dagger\|$ die Norm von A_i^\dagger abschätzen

$$\|A_i^\dagger\| \leq \frac{\|A^\dagger\|}{1 - \|A^\dagger\|\eta_i}.$$

Damit gelangen wir schließlich zu der Abschätzung

$$\|F^\dagger - F_i^\dagger\| \leq c \frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\|\eta_i} (\|g\| + \varepsilon_i) + \|A^\dagger\|\varepsilon_i. \quad (3.20)$$

Im zweiten Term von (3.19) können wir den Fehler in der r_i -ten Iterierten mit Korollar 2.34 wie folgt abschätzen

$$\|F_i^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i}\| \leq c_1 \frac{1}{r_i^\mu} + c_2 \sqrt{r_i} \delta_{M_i}$$

mit positiven Konstanten c_1 und c_2 . Mit der a priori Parameterwahl $r_i^* \sim \delta_{M_i}^{\frac{-2}{2\mu+1}}$ erhalten wir die ordnungsoptimale Konvergenzrate

$$\|F_i^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| \sim \delta_{M_i}^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \leq \tilde{C}_i \delta_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}. \quad (3.21)$$

Zusammen ergeben (3.20) und (3.21):

$$\begin{aligned} \|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| &\leq c \frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\| \eta_i} (\|g\| + \varepsilon_i) + \|A^\dagger\| \varepsilon_i + \tilde{C}_i \delta_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \\ &\leq c \frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\| \eta_i} \|g\| + c \frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\| \eta_i} \varepsilon_i + \|A^\dagger\| \varepsilon_i + \tilde{C}_i \varepsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}. \end{aligned}$$

Wir betrachten das Verhalten für $\varepsilon_i, \eta_i \rightarrow 0$. Nach Lemma 3.6 finden wir für $\eta_i \rightarrow 0$ eine Konstante $\tilde{c} > 0$, sodass $\frac{\|A^\dagger\|^2 \eta_i}{1 - \|A^\dagger\| \eta_i} \leq \tilde{c} \|A^\dagger\|^2 \eta_i$ gilt. Mit $\varepsilon_i < \varepsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}$ für $\varepsilon_i < 1$ führt dies zu

$$\begin{aligned} \|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| &\leq c\tilde{c} \|A^\dagger\|^2 \|g\| \eta_i + c \|A^\dagger\|^2 \eta_i \varepsilon_i + (\|A^\dagger\| + \tilde{C}_i) \varepsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \\ &= C_1 \eta_i + C_2 \eta_i \varepsilon_i + C_3 \varepsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}} \end{aligned}$$

mit $C_1 = c\tilde{c} \|A^\dagger\|^2 \|g\|$, $C_2 = c \|A^\dagger\|^2$ und $C_3 = \|A^\dagger\| + \max_i \tilde{C}_i$ und damit zu

$$\|F^\dagger - \tilde{F}_i^{\delta, r_i^*}\| = \mathcal{O}(\eta_i) + \mathcal{O}(\varepsilon_i^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}).$$

□

Bemerkung 3.8. Die Forderung nach der Gleichheit des Ranges der Matrizen A und A_i beschränkt ebenfalls, wie weit die iterierten A_i vom gesuchten A entfernt sein dürfen, um das obige Resultat zu gewährleisten. Sind die Strahlwege im i -ten Schritt (denn diese legen die Matrix A_i fest) so weit von den tatsächlichen Wegen entfernt, dass $\text{rang}(A) \neq \text{rang}(A_i)$ gilt, kann $\|A_i^\dagger - A^\dagger\|$ nicht mehr abgeschätzt werden. Nach Satz 2.43 gilt nun

$$\|A_i^\dagger - A^\dagger\| \geq \frac{1}{\eta_i}$$

und der Fehler kann beliebig groß werden.

Kapitel 4

Numerische Evaluation

Wir werden nun die modifizierte ART sowohl mit synthetischen Daten als auch anhand von dem THz-Tomographen aus Kapitel 2.1.2 erfassten Daten validieren. Die Ergebnisse zeigen, dass der komplexe Brechungsindex mit dem neuen Algorithmus detaillierter und mit kleinerem Fehler rekonstruiert werden kann als mit klassischen Verfahren aus der Computertomographie. Dazu werden zunächst Rekonstruktionen von synthetischen und verrauschten Messdaten betrachtet. Anschließend erfolgt ein Vergleich der Rekonstruktionen der gefilterten Rückprojektion, der klassischen ART und der modifizierten ART anhand von realen Messdaten. Den Abschluss bildet die Rekonstruktion eines Objektes, bei dem nur die äußeren Grenzflächen als bekannt vorausgesetzt werden. Auch unter diesen Umständen können bessere Resultate als mit den Standardverfahren erreicht werden.

Synthetische und reale Messdaten wurden jeweils für $p = 360$ Anfangswinkel und $q = 70$, also 141 Verschiebungen generiert. Somit besteht ein Datensatz aus $N = 50760$ Messwerten. Die Implementierung erfolgte in Matlab und das Gebiet Ω wurde in $M = 21609$ Pixel unterteilt. Zur Bestimmung der Abbruchindizes r_i^* verwenden wir die in Gleichung (3.13) vorgestellte Strategie. Bei den folgenden Angaben für $\psi = (r_1^*, \dots, r_\Psi^*)$ handelt es sich daher um die Abbruchindizes, die nach dieser Strategie gewählt wurden. Wir legen die Anzahl der Anwendungen des Kaczmarz-Verfahrens auf $\Psi = 5$ fest und geben zu jeder Rekonstruktion die vorzugebenden Parameter ζ_1 , u , λ_{ref} und λ_{abs} an. Die a priori Information über die Lage der Grenzflächen wird vor jedem Kaczmarz-Verfahren auch dazu genutzt, den Brechungsindex bis zum Auftreffen auf die erste Grenzfläche auf $n - 1 = 0$ zu setzen. Die Berechnung der Winkel vom einfallenden bzw. transmittierten Strahl nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz erfolgt somit genauer, da nun tatsächlich an einem Sprung im Brechungsindex gebrochen wird. Als Startwerte werden überall $\tilde{F}_{\text{ref}}^{0,1} = \tilde{F}_{\text{abs}}^{0,1} = 0$ verwendet, womit die erste Iteration dem klassischen ART-Verfahren entspricht.

Zum Abschluss gehen wir auch auf die Grenzen des Verfahrens ein. Einige der folgenden Ergebnisse wurden bereits in LITTAU, TEPE ET AL. [77] und TEPE UND SCHUS-

TER [108] veröffentlicht und werden hier ausführlicher behandelt.

4.1. Rekonstruktion mit synthetischen Daten

Zunächst werden wir den Algorithmus anhand synthetischer Daten testen. Da in diesem Fall die Rekonstruktion auf wohlbekannten Messdaten basiert und der Modellfehler zur Realität nicht relevant ist, können wir so unter „idealen“ Bedingungen zunächst die allgemeine Funktionstüchtigkeit des Algorithmus überprüfen. Die synthetischen Messdaten für den Transmissionsgrad und den Wegunterschied wurden mit gleichverteilten Zufallszahlen verrauscht, sodass für beide Messdatentypen

$$\frac{\|g - g^\delta\|}{\|g\|} \leq 0.05$$

mit den verrauschten Daten g^δ gilt.

4.1.1. Kreisscheibe mit eingelassenem Rechteck

Das erste Testobjekt besteht aus einer Kreisscheibe mit einem Radius von 50 mm, $n = 1.4$ und $\alpha = 0.05 \text{ cm}^{-1}$. In der Kreisscheibe ist ein Rechteck mit den Maßen $25 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ und $n = 1.7$, $\alpha = 0.25 \text{ cm}^{-1}$ eingebracht. Wie in Kapitel 3.3.3 beschrieben, ist es sinnvoll, mehrere Kaczmarz-Verfahren hintereinander auszuführen, wenn keine Information über \tilde{n} vorliegt. Hier wurden $\Psi = 5$ Verfahren durchgeführt, bei denen die Parameter wie folgt determiniert bzw. von der Parameterstrategie bestimmt wurden:

$$\begin{aligned} \zeta_1 &= 0.1, \quad u = 1.7, \quad \psi = (3, 3, 3, 4, 5), \\ \lambda_{\text{ref}} &= (0.01, 0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125), \\ \lambda_{\text{abs}} &= (0.002, 0.005, 0.005, 0.004, 0.003). \end{aligned}$$

Die Ergebnisse in den Abbildungen 4.1a und 4.2a zeigen, dass die modifizierte ART das Testobjekt, trotz der recht hohen Sprünge im Brechungsindex und den damit verbundenen gebrochenen Strahlwege, grundsätzlich gut rekonstruieren kann. Der absolute Fehler ist in den meisten Bereichen des Objektes klein (siehe Abbildungen 4.1b und 4.2b), wobei die größten Abweichungen in der Nähe der Grenzflächen und Ecken auftreten. Insgesamt ist der Fehler im Brechungsindex verhältnismäßig kleiner als im Absorptionskoeffizienten. Ein Grund hierfür ist, dass die Rekonstruktion von n die Rekonstruktion von α über die berechneten Reflexionsverluste beeinflusst. Die Fehler in der Rekonstruktion von n in der Nähe der Grenzflächen des Rechtecks führen

zu einer fehlerbehafteten Berechnung der Reflexionsverluste und damit zu weiteren Fehlern in der Rekonstruktion von α .

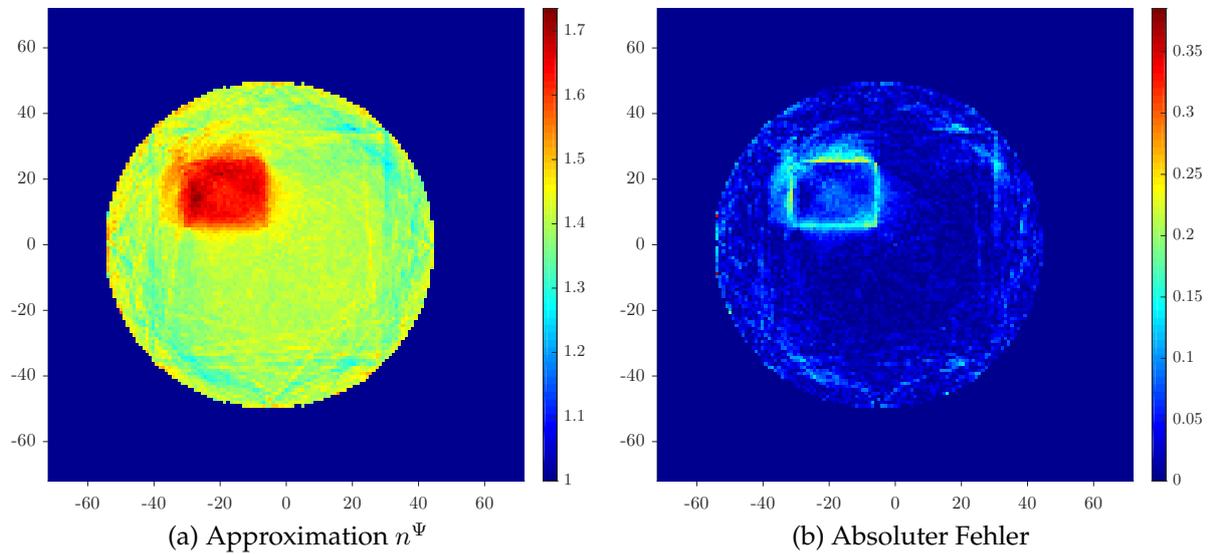


Abbildung 4.1.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von n anhand synthetischer Daten von der Kreisscheibe mit eingelassenem Rechteck

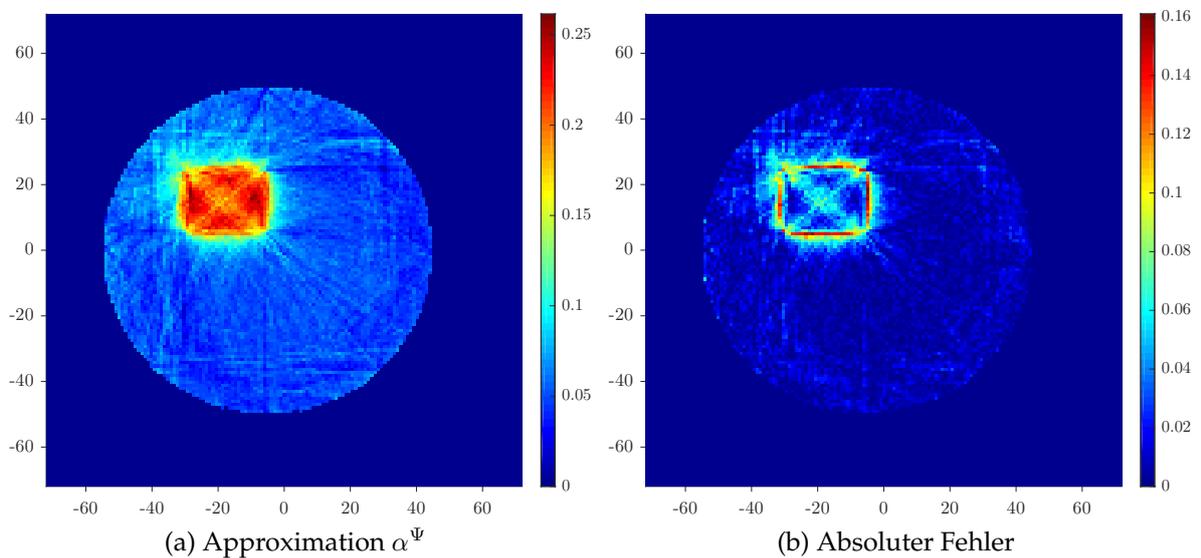


Abbildung 4.2.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von α anhand synthetischer Daten von der Kreisscheibe mit eingelassenem Rechteck

In Abbildung 4.3 haben wir den relativen Fehler des komplexen Brechungsindex

$$\varepsilon_{\tilde{n}}^{r,i} := \frac{\|\tilde{n} - \left((1 + \tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}) + \mathbf{i}(\tilde{F}_{\text{abs}}^{r,i} \frac{c_0}{2\omega}) \right)\|}{\|\tilde{n}\|}$$

und das „relative Residuum“

$$\tau_n^{r,i} := \frac{\|A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{r+1,i} - A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{r,i}\|}{\|A_i \tilde{F}_{\text{ref}}^{0,i} - g_{\text{ref}}\|}$$

nach (3.13) für $r = 1, \dots, r_i^*$ für $i = 1, \dots, \Psi$ aufgetragen. Wir können an den Sprüngen in $\tau_n^{r,i}$ gut erkennen, wann ein ζ_i erreicht wird. Zu den entsprechenden Iterationen (grau gestrichelte Linien) werden auch die Strahlwege bzw. A_i aktualisiert und anschließend ein neues Kaczmarz-Verfahren begonnen. Insgesamt wird das relative Residuum zunehmend kleiner. Auch der relative Fehler nimmt rasch ab und pendelt sich bei ca. 2% ein. Insgesamt wird das Objekt also gut detektiert, womit die Grundvoraussetzung sichergestellt ist, dass die modifizierte ART mit synthetischen Daten korrekte Ergebnisse liefert.

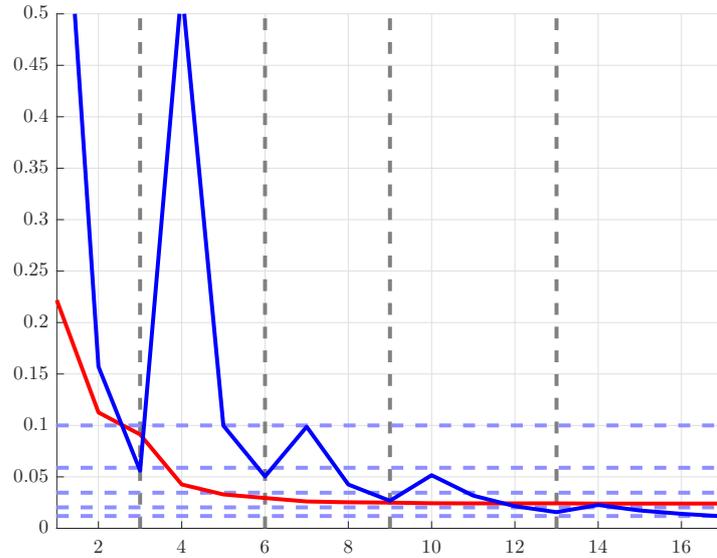


Abbildung 4.3.: Relativer Fehler und Parameterstrategie:

x -Achse: kumulierte Iterationsanzahl $r = 1, \dots, \sum_{i=1}^{\Psi} r_i^*$,
rot: relativer Fehler im komplexen Brechungsindex: $\varepsilon_{\tilde{n}}$,

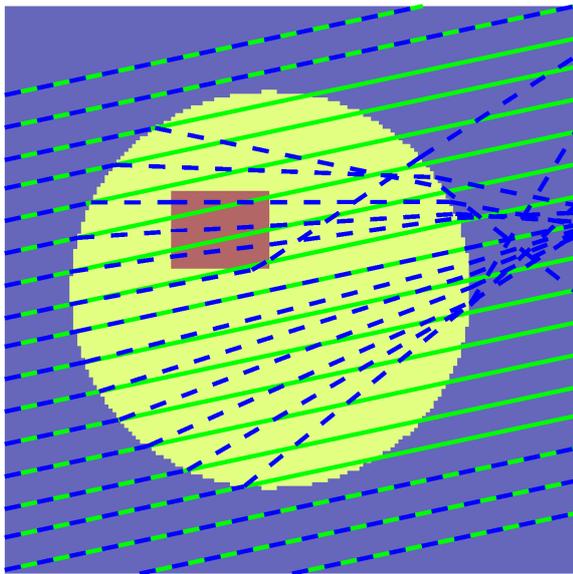
blau: relatives Residuum τ_n ,

hellblau gestrichelt: Toleranzgrenzen $\zeta_i = \frac{\zeta_1}{u^{i-1}}$, $i = 1, \dots, \Psi$ und

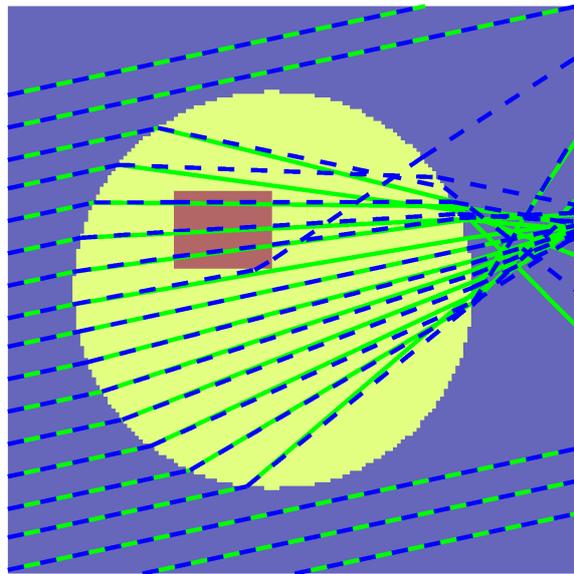
grau gestrichelt: kumulierte Abbruchindizes $\sum_{i=1}^{\Psi} r_i^*$

Neben dem komplexen Brechungsindex werden auch die gebrochenen Strahlwege

rekonstruiert (siehe Abbildung 4.4). Der gebrochene Strahlverlauf führt dazu, dass einige Pixel unterschiedlich stark von Strahlen durchlaufen werden, was zu zusätzlichen Artefakten führen kann. Hier verhält sich der äußere Kreis des Objektes nahezu wie eine Sammellinse, wodurch die gebrochenen Strahlen das betrachtete Gebiet nicht mehr gleichmäßig beleuchten. Abhängig vom zu rekonstruierenden Objekt können bei der THz-Tomographie sog. „cold spots“ entstehen. Dabei handelt es sich um Bereiche in Ω , die trotz der Drehung der Anfangsstrahlen schlecht bis gar nicht beleuchtet und somit von keinem oder nur wenigen Strahlen durchlaufen werden. Dieses Problem tritt auch in der Ultraschall-Vektortomographie auf und wird z. B. von SCHRÖDER UND SCHUSTER in [100] ausführlich beschrieben. Der Sprung im Brechungsindex an der Luft-Kunststoff-Grenzfläche hat zudem den größten Einfluss auf den weiteren Strahlverlauf. Der Sprung an der inneren Grenzfläche des Rechtecks ist kleiner und führt nur bei vereinzelt Strahlen zu einer stärkeren Wegänderung.



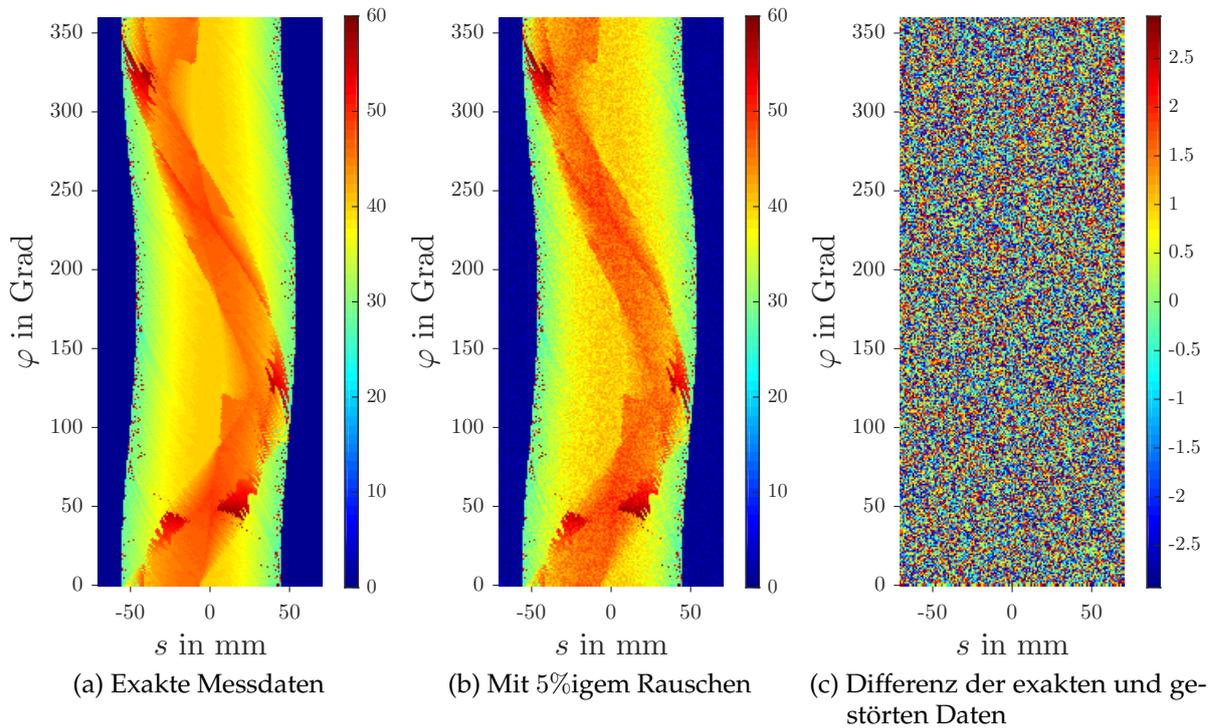
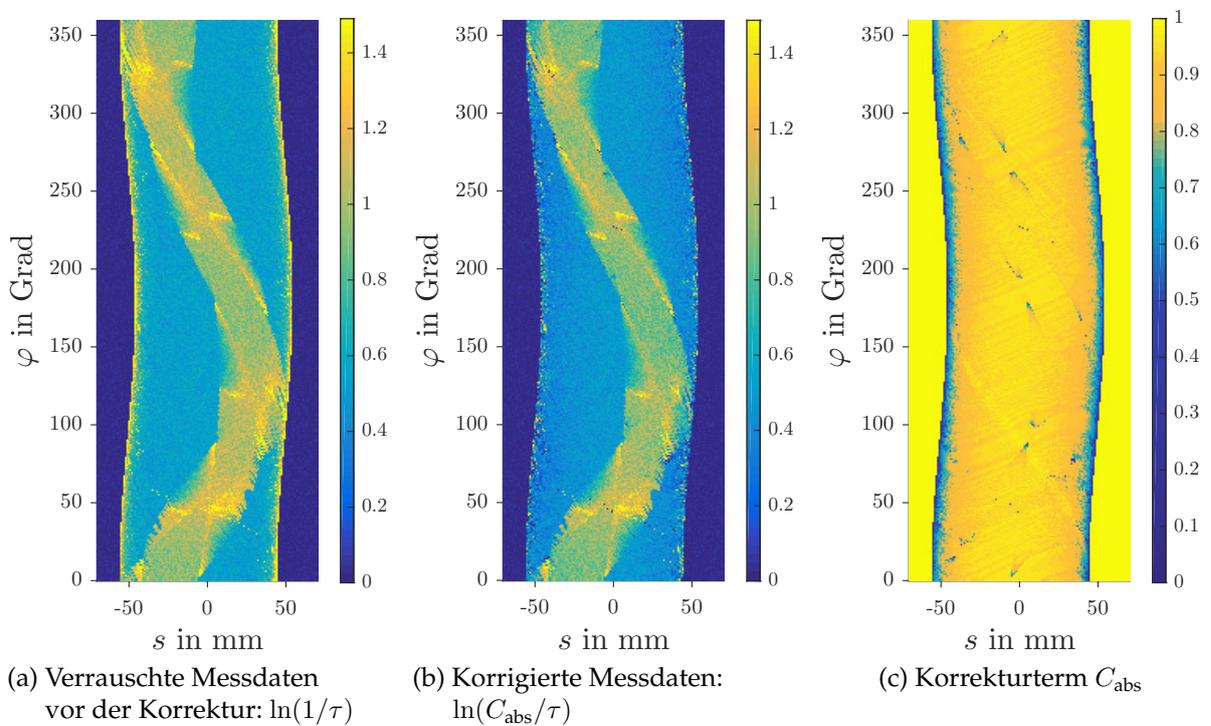
(a) blau: exakte Strahlwege, grün: Verlauf entlang gerader Strahlen (Ausgangspunkt erste Kaczmarz-Iteration)



(b) blau: exakte Strahlwege, grün: rekonstruierte Strahlwege mit der modifizierten ART

Abbildung 4.4.: Rekonstruktion der Strahlwege für $\varphi = 282^\circ$

Die Messdaten können in einem Sinogramm dargestellt werden (siehe Abbildungen 4.5 und 4.6). In Abbildung 4.5 sind die exakten und verrauschten Messdaten vom Wegunterschied d und das Rauschen selbst dargestellt. Die längeren Wegunterschiede, sobald ein gebrochener Strahl durch das Rechteck mit dem höheren Brechungsindex laufen muss, sind klar zu erkennen.

Abbildung 4.5.: Sinogramm Wegunterschied d Abbildung 4.6.: Sinogramm Transmissionsgrad τ

Bei den Messdaten des Transmissionsgrades ist vor allem die Korrektur um die Reflexionsverluste interessant, sodass in Abbildung 4.6 neben den verrauschten Daten auch die korrigierten Daten und der Korrekturterm C_{abs} selbst angegeben sind. Die Messdaten aller Strahlen, die durch das Objekt laufen, werden entsprechend korrigiert. Dabei treten hohe Reflexionsverluste für Strahlen auf, die mit einem Einfallswinkel $\gamma_1 \approx 90^\circ$ auf die Kreisgrenzfläche treffen. Dies ist z. B. in Abbildung 4.4 beim dritten Strahl von oben zu sehen. In diesem Fall ist nach den Fresnelschen Formeln (2.6) $\rho \approx 1$ und dementsprechend $C_{\text{abs}} \approx 0$.

Auf die Auswirkungen des Korrekturterms auf die Rekonstruktion von α gehen wir detaillierter in Kapitel 4.2.1 mithilfe eines Beispiels mit exakten Daten ein.

4.1.2. THz-Schriftzug

Als nächstes künstliches Testobjekt betrachten wir einen THz-Schriftzug, siehe Abbildung 4.7. Hierbei besteht das „T“ aus einem Material mit $n = 1.2$, $\alpha = 0.2 \text{ cm}^{-1}$,



Abbildung 4.7.: THz-Schriftzug

das „H“ aus $n = 1.3$, $\alpha = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ und das „z“ aus $n = 1.1$, $\alpha = 0.15 \text{ cm}^{-1}$. Die Rekonstruktionen wurden mit den Parametern

$$\begin{aligned}\psi &= (3, 4, 6, 6, 8), \\ \lambda_{\text{ref}} &= (0.0025, 0.005, 0.005, 0.0025, 0.00125), \\ \lambda_{\text{abs}} &= (0.0025, 0.005, 0.005, 0.0025, 0.00125),\end{aligned}$$

erzeugt. Der Schriftzug stellt durch seine vielen Grenzflächen und Luft-Kunststoff-Luft Übergänge eine Herausforderung für den Algorithmus dar, da stark gebrochene Strahlen entstehen können. Die Abbildungen 4.8 und 4.9 zeigen, dass der komplexe Brechungsindex auch unter diesen Umständen rekonstruiert werden kann. Die größten Schwierigkeiten treten beim „z“ auf, welches auch die komplexesten Grenzflächen aufweist. Die Fehler in der Rekonstruktion des Brechungsindex vom „z“ führen zu weiteren Fehlern in der Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten. So kommen größere Abweichungen besonders an den Grenzflächen vom „z“ im Absorptionskoeffizienten vor (Abbildung 4.9b).

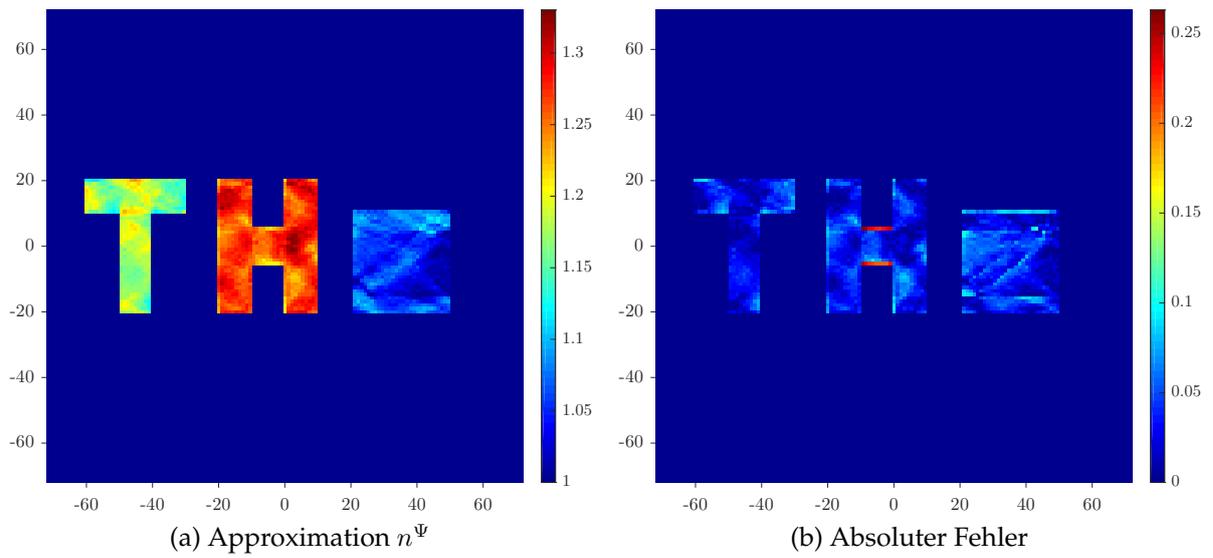


Abbildung 4.8.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von n anhand synthetischer Daten vom THz-Schriftzug

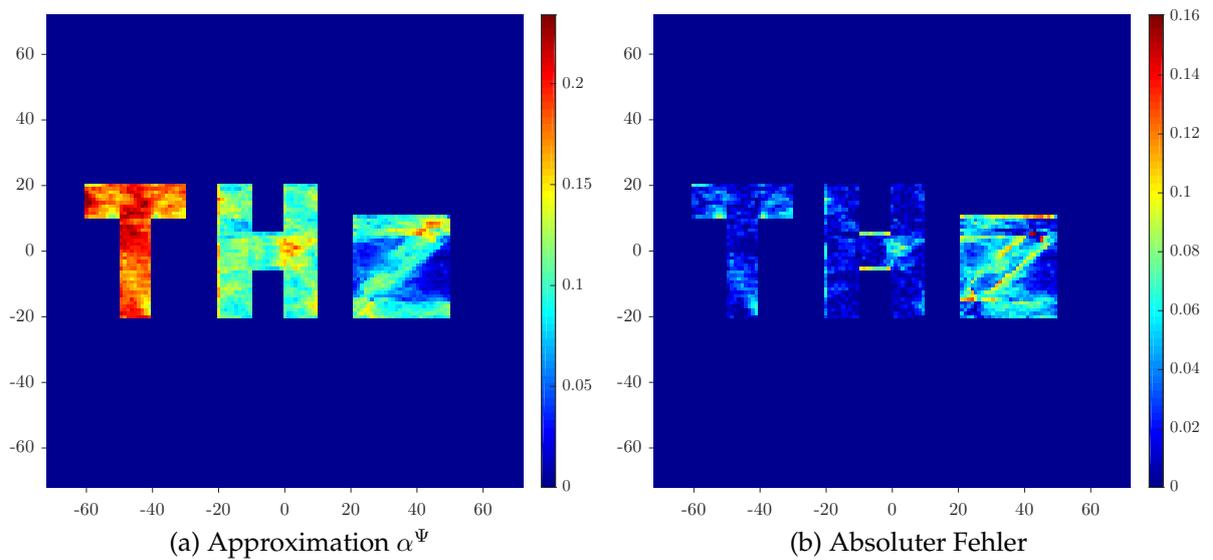


Abbildung 4.9.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von α anhand synthetischer Daten vom THz-Schriftzug

4.2. Rekonstruktion mit experimentellen Daten und Vergleich mit klassischen Verfahren

Nun soll die modifizierte ART an realen Messdaten getestet und die Ergebnisse mit der gefilterten Rückprojektion (FBP für „filtered back projection“) und der herkömmlichen ART verglichen werden. Im Falle von synthetischen Messdaten liegen für die Rekonstruktion, unabhängig davon wie stark die Strahlen gebrochen worden sind, verwertbare Messdaten g_{abs} und g_{ref} vor. Das ist hier nicht mehr der Fall: Der verwendete THz-Tomograph verwendet einen Empfänger in Transmissionsanordnung (direkt gegenüber dem Sender) und deckt daher nur einen Bruchteil von $\partial\Omega$ ab. Die Strahlen können somit vom Objekt abgelenkt werden und den Empfänger vollständig verfehlen. Der Transmissionsgrad ist in diesem Fall $\tau = 0$ und wird gesondert behandelt. So können oft bessere Rekonstruktionsergebnisse erzielt werden, wenn Messdaten zu Strahlen mit $\tau \leq \varepsilon_{\text{miss}}$ und $\varepsilon_{\text{miss}}$ hinreichend groß aussortiert, d. h. bei der Iteration gar nicht berücksichtigt, werden. Hierbei muss beachtet werden, dass dieser Fall auch bei starken Absorbern eintreten und dann zu verfälschten Rekonstruktionsergebnissen führen kann.

4.2.1. Blöcke aus Polyethylen und Polyamid

Bei den ersten beiden Testobjekten mit echten Messdaten handelt es sich um Blöcke aus Polyethylen (PE) mit $n_{\text{PE}} \approx 1.51$ bzw. Polyamid (PA) mit $n_{\text{PA}} \approx 1.75$. Für die Absorptionskoeffizienten der hier betrachteten Blöcke wurden leider keine Werte experimentell ermittelt und sind daher unbekannt. Allerdings weist PE typischerweise ein vergleichsweise niedriges α im THz-Frequenzbereich auf und ist nahezu vollständig transparent, weshalb PE oft auch als Linsenmaterial zur Fokussierung des Gauß-Strahls zum Einsatz kommt (auch im hier verwendeten THz-Tomographen). Dagegen ist der Absorptionskoeffizient von PA „deutlich größer“. Wir werden überprüfen, ob wir per Rekonstruktion diese Einschätzung bestätigen können. PIESIEWICZ ET AL. [92] ermittelten durch eine THz-Spektroskopie einen Absorptionskoeffizienten für PE bei $\alpha_{\text{PE}} = 0.06 \text{ cm}^{-1}$ und für PA bei $\alpha_{\text{PA}} = 0.9 \text{ cm}^{-1}$, was wir als ungefähre Einschätzung der Größenordnung hinzuziehen wollen. Der PE-Block misst in der Breite 59.5 mm und in der Tiefe 30.25 mm, während der PA-Block die Maße 51 mm \times 30 mm besitzt. Bei der Rekonstruktion von PE werden für die beiden ART-Verfahren Strahlen, die zu einer Messung von $\tau \leq 0.34$ führen, aussortiert. Für PA wählen wir $\varepsilon_{\text{miss}} = 0.07$. Diese Werte wurden empirisch bestimmt und führen zu guten Rekonstruktionen.

Rekonstruktion mit FBP und ART

Zunächst betrachten wir die Ergebnisse der klassischen Verfahren aus der Computertomographie. Für die gefilterte Rückprojektion wird der Shepp-Logan Filter und $\varepsilon_{\text{miss}} = 0$ verwendet, während die algebraische Rekonstruktionstechnik nach 7 Iterationen und Relaxationsparametern von $\lambda_{\text{ref}} = 0.015$ und $\lambda_{\text{abs}} = 0.00025$ abgebrochen wird.

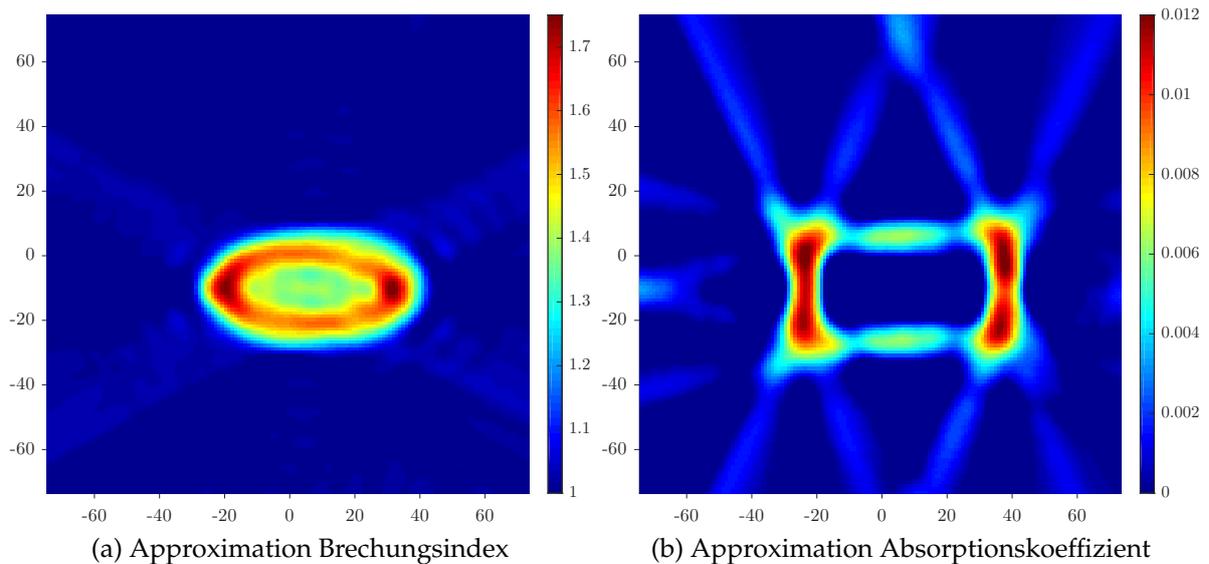


Abbildung 4.10.: FBP: Rekonstruktion von \tilde{n} vom PE-Block

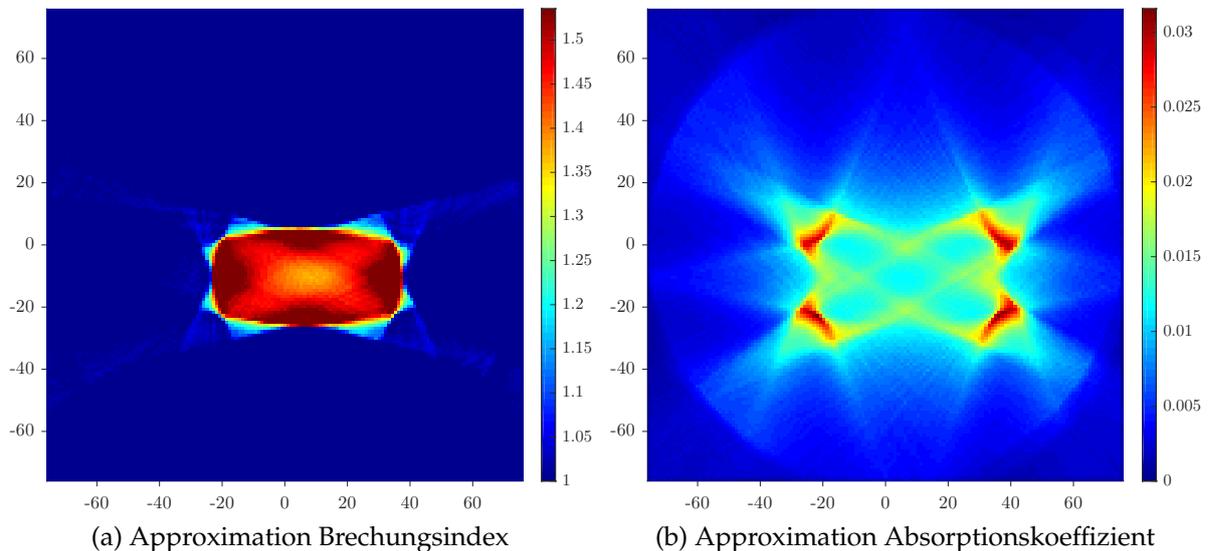


Abbildung 4.11.: ART: Rekonstruktion von \tilde{n} vom PE-Block

Auffällig ist, dass die klassische ART mit den realen Messdaten deutlich besser zurecht-

kommt: Während die gefilterte Rückprojektion das Objekt „zu rund“ rekonstruiert, sodass die eigentliche Form verloren geht und der Brechungsindex am Rand zu hoch ist (Abbildung 4.10a), kann die algebraische Rekonstruktionstechnik den Brechungsindex deutlich homogener rekonstruieren (Abbildung 4.11a). Die Kanten des Objektes sind aber auch hier noch etwas abgerundet. Als iteratives Verfahren kommt ART mit weniger Projektionen aus und führt zu einer besseren Rekonstruktion. Des Weiteren wurden bei der gefilterten Rückprojektion keine Strahlen aussortiert, was zu weiteren Artefakten führt. Der Absorptionskoeffizient wird dagegen bei beiden klassischen Verfahren schlecht rekonstruiert (Abbildungen 4.10b und 4.11b). Hier kommt es zu sehr hohen Werten an den Ecken des Blocks und zu einer starken Artefaktbildung, die u. a. auf eine fehlende Berücksichtigung der Reflexionsverluste zurückzuführen ist.

Rekonstruktion mit der modifizierten ART und Vergleich der Methoden

Die Rekonstruktion von \tilde{n} gelingt mit der modifizierten ART dagegen deutlich besser als mit den herkömmlichen Verfahren. Die folgenden Parameter wurden verwendet:

$$\begin{aligned}\zeta_1 &= 0.1, \quad u = 1.5, \quad \psi = (3, 3, 3, 4), \\ \lambda_{\text{ref}} &= (0.02, 0.005, 0.002, 0.001), \\ \lambda_{\text{abs}} &= (0.001, 0.00025, 0.000125, 0.00005).\end{aligned}$$

So werden der Brechungsindex (Abbildung 4.12a) und der Absorptionskoeffizient (Abbildung 4.13) homogener rekonstruiert und die Ecken besser detektiert.

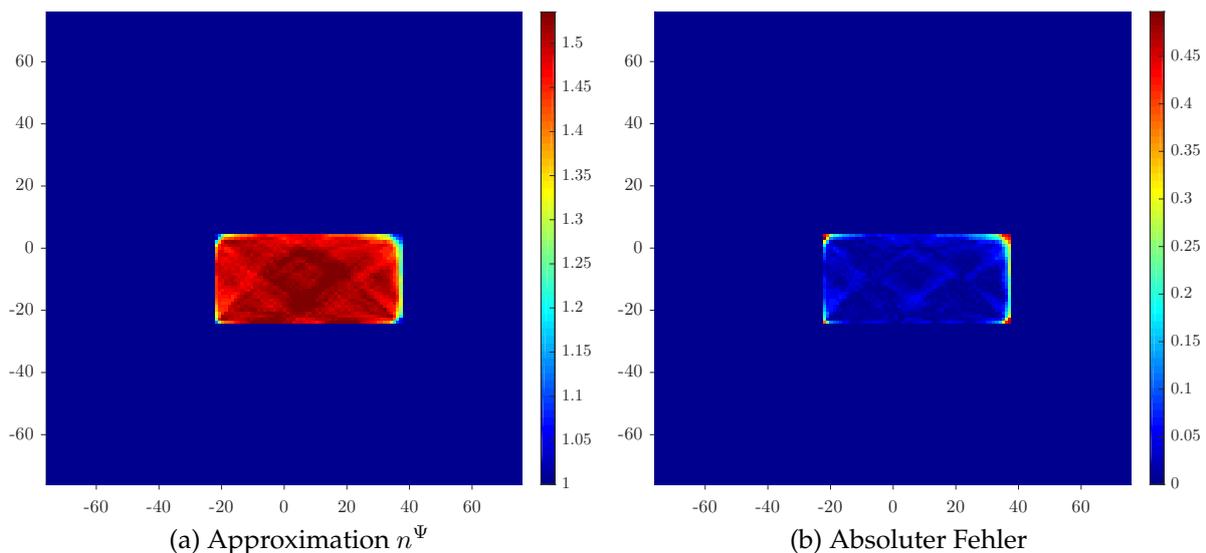


Abbildung 4.12.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von n vom PE-Block

Der absolute Fehler bei der Rekonstruktion von n ist sehr klein (siehe Abbildung 4.12b), wobei die größten Abweichungen an den Ecken des Blockes auftreten. Der Absorptionskoeffizient wird mit der modifizierten ART durchschnittlich mit $\alpha_{\text{PE}} \approx 0.023 \text{ cm}^{-1}$ rekonstruiert. Da kein Referenzwert existiert, kann keine Aussage über den Fehler dieser Rekonstruktion getroffen werden. An den Ecken des Objektes deuten sich aber auch hier zu hohe Werte für den Absorptionskoeffizienten an. Die Reflexionsverluste an den Ecken können also nicht vollständig eliminiert werden, sodass angenommen werden muss, dass der tatsächliche Absorptionskoeffizient dort kleiner sein sollte.

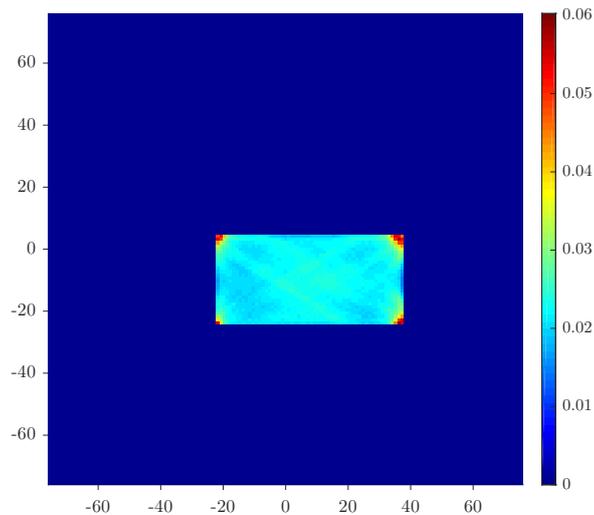


Abbildung 4.13.: Modifizierte ART: Approximation α^Ψ vom PE-Block

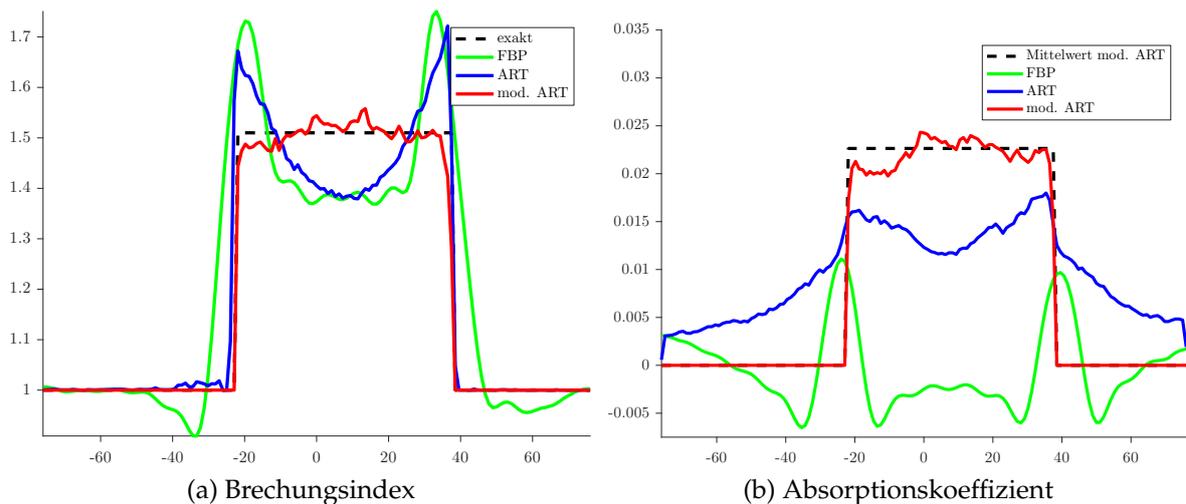


Abbildung 4.14.: PE-Block: Querschnitt der Rekonstruktionen durch die Mitte des Probekörpers parallel zur x -Achse

Noch deutlicher wird die Verbesserung gegenüber den klassischen Verfahren bei der Betrachtung von Schnittbildern. Abbildung 4.14 zeigt den Schnitt entlang der x -Achse für alle drei Verfahren. Beim Brechungsindex erreicht die Rekonstruktion mit der modifizierten ART bis auf kleinere Abweichungen den Zielwert. Die Werte der gefilterten Rückprojektion und ART weichen an den Rändern stark ab und neigen zu einer Einbuchtung des Brechungsindex in der Mitte des Objektes, wobei dies bei der gefilterten Rückprojektion stärker ausgebildet ist. Der Absorptionskoeffizient wird von den klassischen Verfahren nicht sehr gut rekonstruiert. Während das Ergebnis der gefilterten Rückprojektion gar keine Aussagekraft hat, wird das Objekt bei ART kaum detektiert und die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten ist über die gesamte Länge zwischen Sender und Empfänger „verschmiert“.

Detailliertere Betrachtung des Absorptionskoeffizienten und der Reflexionsverluste

Nun werden wir die Rekonstruktion des PA-Blocks mit der modifizierten ART für weitere Untersuchungen hinzuziehen. Die Parameter sind als

$$\begin{aligned}\zeta_1 &= 0.1, \quad u = 1.5, \quad \psi = (3, 5, 5, 6, 6), \\ \lambda_{\text{ref}} &= (0.005, 0.005, 0.003, 0.002, 0.001), \\ \lambda_{\text{abs}} &= (0.002, 0.002, 0.001, 0.0005, 0.00025),\end{aligned}$$

gewählt worden. Sowohl Brechungsindex als auch Absorptionskoeffizient können rekonstruiert werden (siehe Abbildungen 4.15 und 4.16).

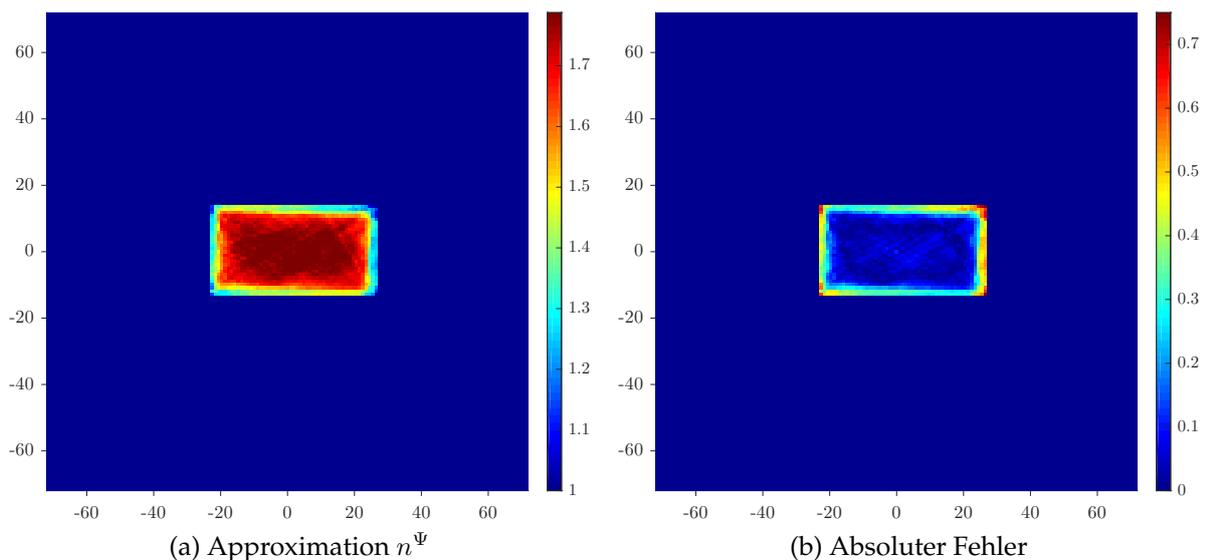


Abbildung 4.15.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von n vom PA-Block

Die modifizierte ART rekonstruiert den Absorptionskoeffizienten mit einem Wert von $\alpha_{\text{PA}} \approx 0.32 \text{ cm}^{-1}$ (siehe Abbildung 4.16). Die größeren Abweichungen vom eigentlich homogenen Block entstehen an den Grenzflächen und insbesondere an den Ecken. Zudem fällt beim Brechungsindex auf, dass der gesamte äußere Rand „zu niedrig“ rekonstruiert wurde (siehe Abbildung 4.15a). Dies führt dazu, dass die Strahlen bei der Rekonstruktion weniger stark gebrochen werden als in der Realität. Neben den dadurch entstehenden Rekonstruktionsfehlern im Brechungsindex, wird auch die Berechnung der Reflexionsverluste und damit die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten verfälscht. Die Gründe liegen in den Laufzeitmessdaten selbst, aber auch an der fehlenden Modellierung der Strahlbreite, worauf wir in Kapitel 4.2.3 detaillierter eingehen werden.

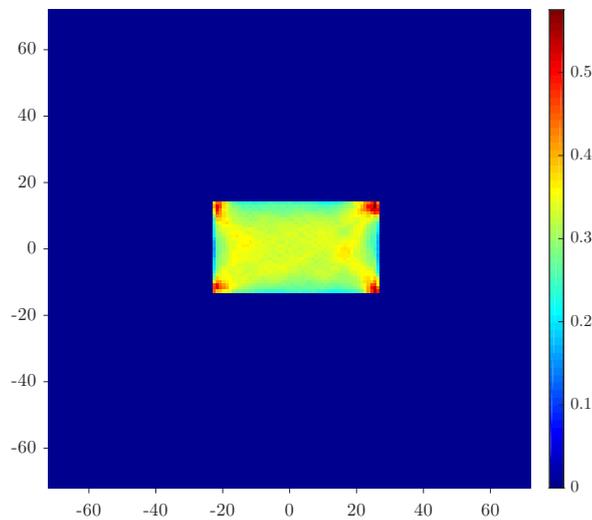


Abbildung 4.16.: Modifizierte ART: Approximation α^Ψ vom PA-Block

Wir wenden uns dem Einfluss der berechneten Reflexionsverluste zu. In Abbildung 4.17 sind die Querschnitte der Rekonstruktion von α von PE und PA einmal mit Korrektur der Messwerte (rot) und einmal ohne (blau, d. h. $\rho = 0$ für alle Grenzflächen) aufgetragen. Die durchschnittlich rekonstruierten Werte mit Messwertkorrektur für α_{PE} und α_{PA} sind zur Orientierung ebenfalls in der Abbildung eingefügt (schwarz gestrichelt). Für beide Probekörper führt die Korrektur der Messdaten zum erwarteten Ergebnis: der Absorptionskoeffizient wird insgesamt kleiner rekonstruiert. Der störende Anteil an Reflexionsverlusten in den Messdaten des Transmissionsgrades kann demnach bei der Rekonstruktion (zumindest teilweise) „herausgerechnet“ werden. Da die Absorptionskoeffizienten von den hiesigen PA- und PE-Blöcken nicht experimentell ermittelt wurden, sind Aussagen über die Richtigkeit der Rekonstruktionen schwierig. Vergleichen wir die Werte mit denen von PIESIEWICZ ET AL. ($\alpha_{\text{PE}} = 0.06 \text{ cm}^{-1}$ und $\alpha_{\text{PA}} = 0.9 \text{ cm}^{-1}$), befinden sich unsere rekonstruierten Werte in derselben Größenord-

nung, sind aber deutlich kleiner ($\alpha_{\text{PE}} \approx 0.023 \text{ cm}^{-1}$ und $\alpha_{\text{PA}} \approx 0.32 \text{ cm}^{-1}$). Ob dies am Material selbst, am verwendeten Rekonstruktionsverfahren oder an der Messmethode von PIESIEWICZ ET AL. liegt, kann soweit nicht festgestellt werden.

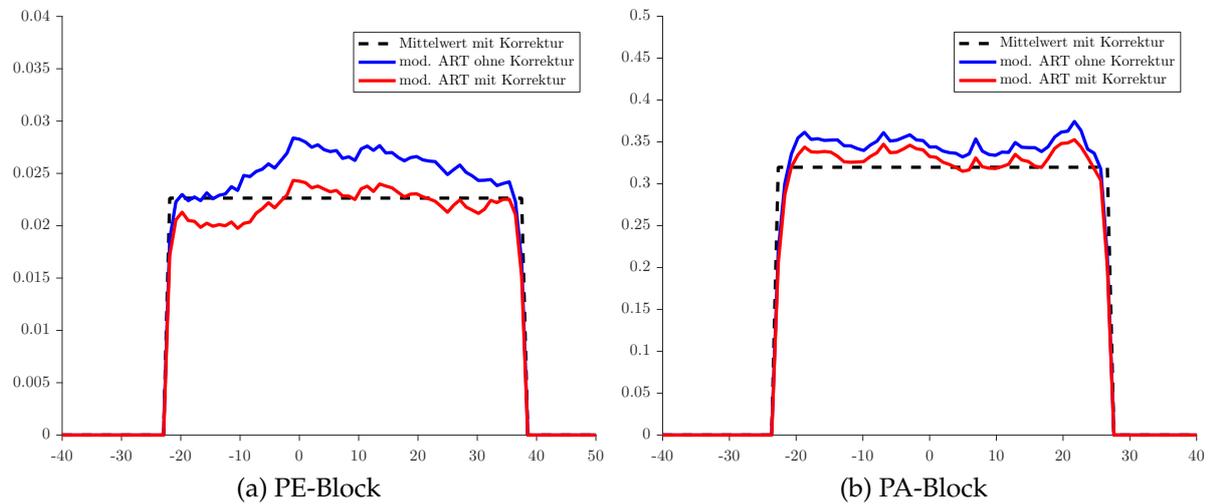


Abbildung 4.17.: Vergleich der Rekonstruktionen von α mit der modifizierten ART mit und ohne Korrektur der Messwerte, Querschnitt durch die Mitte des Probekörpers parallel zur x -Achse

4.2.2. Geklebter Block mit verschiedenen Brechungsindizes

Im nächsten Schritt soll die modifizierte ART an einem komplexeren Objekt mit realen Messdaten validiert werden. Hierzu wurden am SKZ verschiedene Kunststoffblöcke aus Polypropylen, Polyethylen, Polyamid, Polycarbonat und Polymethylmethacrylat in einem Klebverfahren gefügt. Alle Materialien weisen unterschiedliche Brechungsindizes im THz-Bereich auf. Aus der Abbildung 4.18a sind die Maße und die Brechungsindizes des Objektes zu entnehmen. Wir vergleichen wieder die Rekon-

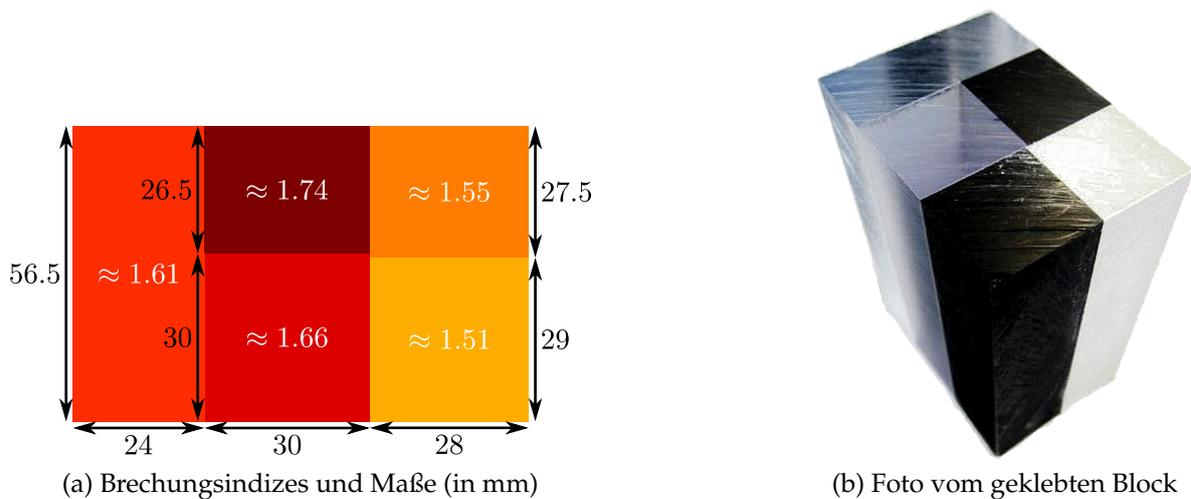


Abbildung 4.18.: Geklebter Block

struktionen der gefilterten Rückprojektion, ART und der modifizierten ART, wobei wir hier mangels Referenzwerte für α nur auf die Rekonstruktion von n eingehen. Die klassische ART erzielt mit $\lambda_{\text{ref}} = 0.005$ nach 15 Iterationen keine nennenswerten Verbesserungen mehr. Die Parameter der modifizierten ART werden als

$$\zeta_1 = 0.1, \quad u = 1.3, \quad \psi = (3, 4, 3, 3, 2),$$

$$\lambda_{\text{ref}} = (0.005, 0.01, 0.01, 0.01, 0.0075),$$

festgelegt. Für beide Verfahren werden Strahlen, die zu einer Messung von $\tau \leq 0.05$ führen, aussortiert. Des Weiteren wurde die gefilterte Rückprojektion mit dem Shepp-Logan Filter und $\varepsilon_{\text{miss}} = 0$ verwendet.

Die Anwendung der gefilterten Rückprojektion auf THz-Daten führt wieder zu sehr schlechten Rekonstruktionen (siehe Abbildung 4.19) mit sehr hohen Werten für n an den äußeren Grenzflächen. Die Kontur des Objektes geht vollständig verloren und kann nicht rekonstruiert werden. Die Rekonstruktion mit dem klassischen ART sind etwas besser (siehe Abbildung 4.20). Trotzdem wird das Objekt mit stark gekrümm-

ten Rändern und mit zu hohen Werten der Brechungsindizes an den Grenzflächen rekonstruiert.

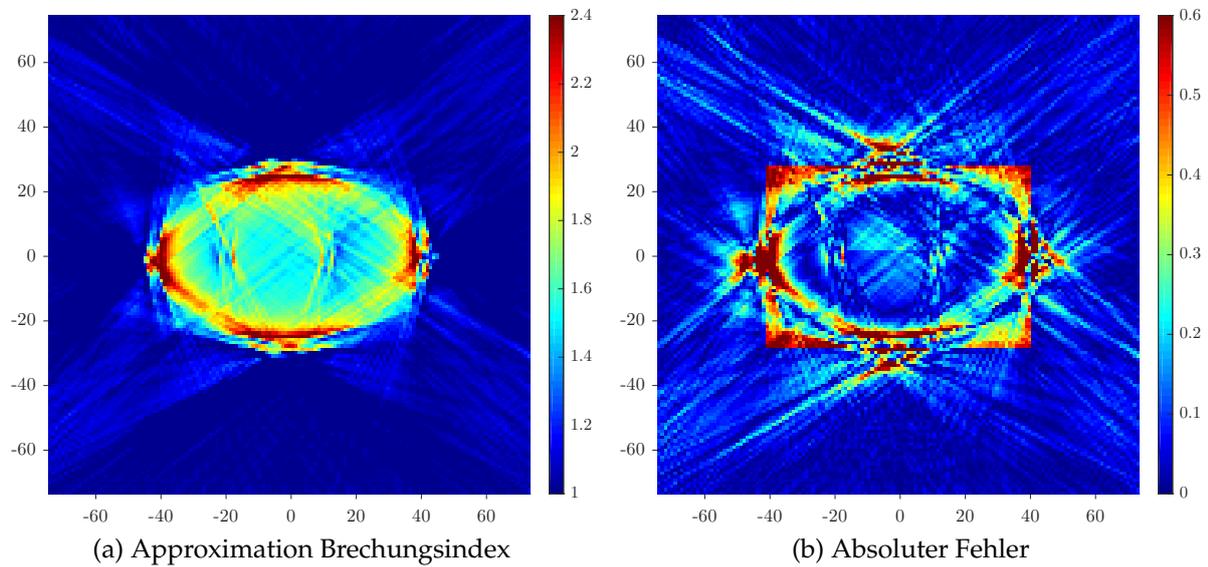


Abbildung 4.19.: FBP: Rekonstruktion von n vom geklebten Block

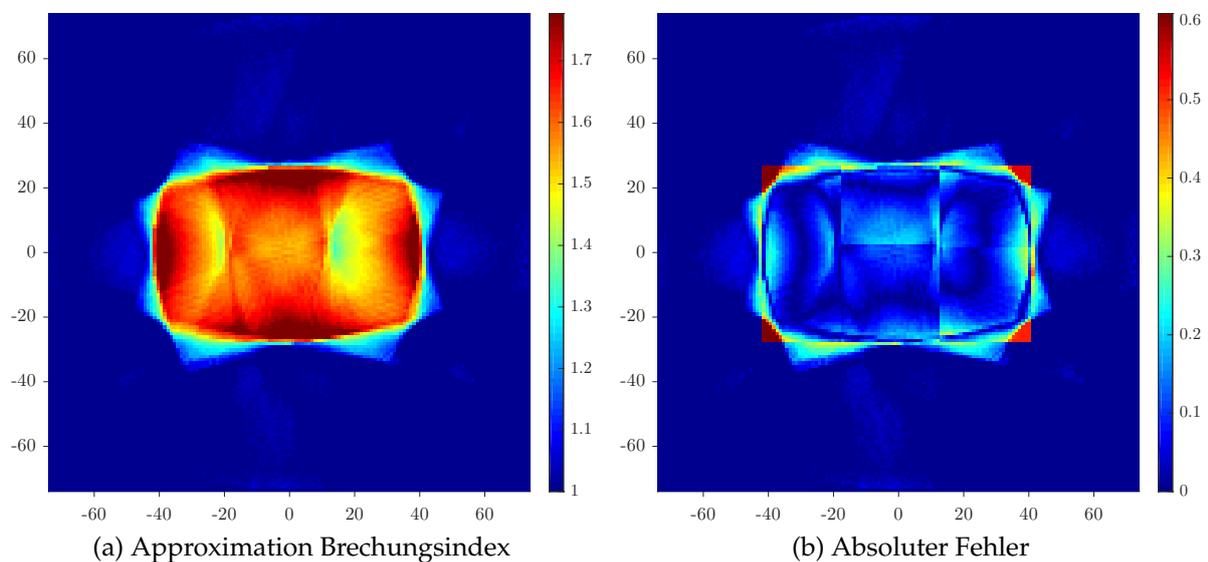


Abbildung 4.20.: ART: Rekonstruktion von n vom geklebten Block

Dagegen kann mit der modifizierten ART auch für ein komplexeres Objekt ein besseres Ergebnis erzielt werden (siehe Abbildung 4.21), welches die Rekonstruktionen mit den konventionellen Methoden FBP und ART deutlich übertrifft. So werden die Ecken

des Objektes besser detektiert und der Brechungsindex ist an den äußeren Rändern nicht zu hoch bzw. zu niedrig (innere Grenzflächen). Dies wird auch durch einen Vergleich der drei Verfahren bezüglich des absoluten Fehlers (Abbildungen 4.19b, 4.20b und 4.21b) offensichtlich. Der absolute Fehler fällt bei der modifizierten ART

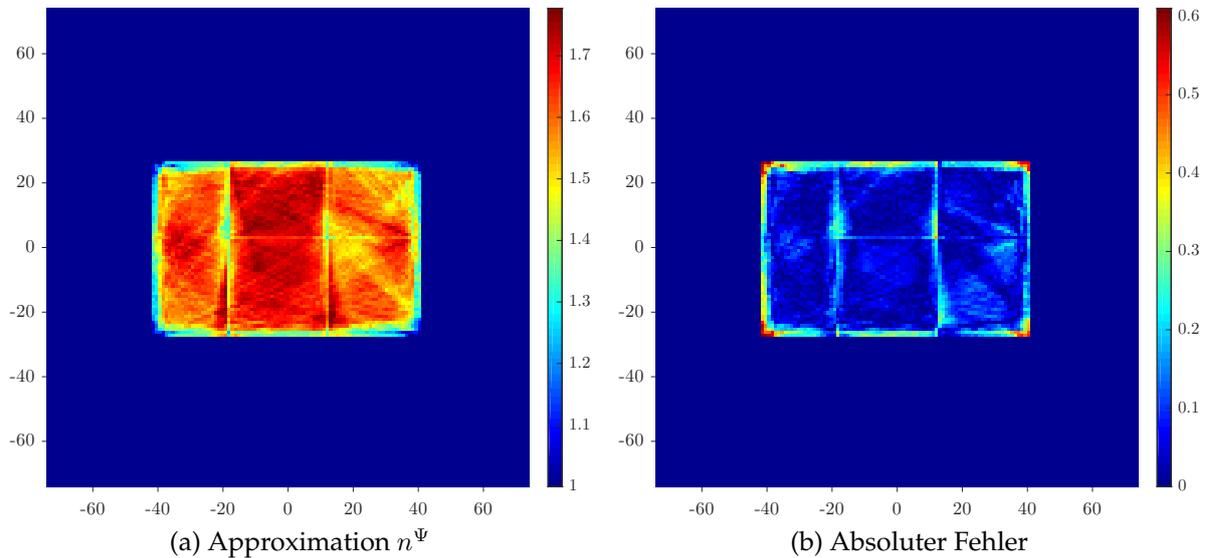


Abbildung 4.21.: Modifizierte ART: Rekonstruktion von n vom geklebten Block

nahezu überall kleiner aus. Die größten Abweichungen sind an den äußeren Kanten zu finden. Somit können auch komplexere Objekte mithilfe der modifizierten ART mit kleinem Fehler rekonstruiert werden, während die einzelnen Blöcke bei der klassischen ART kaum zu erkennen sind. Dies wird auch mit dem Schnittbild aus Abbildung 4.22 deutlich. Während die einzelnen „Stufen“ im Brechungsindex bei FBP und ART vollkommen verloren gehen, sind sie bei der Rekonstruktion mit der modifizierten ART zu erkennen. Da die Brechungsindizes relativ dicht beieinander liegen, gestaltet sich die Unterscheidung verschiedener Kunststoffe aber auch mit der modifizierten ART als schwierig. Der Unterschied zwischen z. B. PA (oben Mitte, mit dem größten Brechungsindex) und PE (unten rechts, mit dem kleinsten n) ist aber klar auszumachen.

Abschließend zeigt der Vergleich, dass die Rekonstruktionen mit der modifizierten ART denen von der gefilterten Rückprojektion und der ART klar überlegen sind, was auch darauf hinweist, dass Brechung und Reflexionsverluste eine wichtige Rolle in der THz-Tomographie einnehmen.

Interessant ist auch ein Blick auf die Bedingung (2.37) für die Konvergenzrate für

Kaczmarz-artige Regularisierungsmethoden:

$$\lambda < \frac{1}{\left\| \tilde{L} \right\|^2 + \frac{N}{2}}.$$

Wir berechnen diese Bedingung für die klassische und die modifizierte ART. Um die Rechenzeit gering zu halten, wurde die Matrix A nur für $p = 180$ Anfangswinkel und $q = 35$, d. h. 71 Verschiebungen, berechnet, womit ein Datensatz aus $N = 12780$ Messwerten besteht. Mit $M = 21609$ ist $A \in \mathbb{R}^{12780 \times 21609}$ und wir erhalten

$$\left\| \tilde{L}_{\text{ART}} \right\| = 56.655, \quad \left\| \tilde{L}_{\text{mod. ART}} \right\| = 64.012,$$

und damit

$$\lambda_{\text{ART}} < 0.00010417, \quad \lambda_{\text{mod. ART}} < 0.000095352.$$

Die Bedingung an den Relaxationsparameter ist bei der modifizierten ART also schärfer. Die gebrochenen Strahlwege führen zu einer größeren Matrixnorm, die wiederum einen kleineren maximalen Relaxationsparameter zur Folge hat. Insgesamt sind die oberen Grenzen für den Relaxationsparameter aber viel kleiner als sie in der Praxis tatsächlich gewählt werden können.

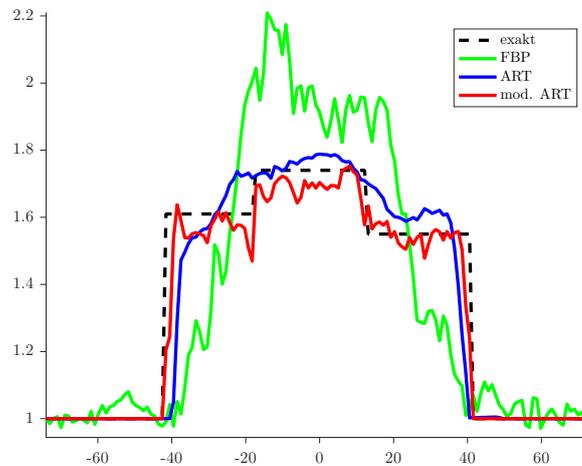


Abbildung 4.22.: Geklebter Block: Querschnitt der Rekonstruktion des Brechungsindex parallel zur x -Achse und $y = 21$

4.2.3. PE-Zylinder: Rekonstruktion mit unbekanntem Grenzflächen im Inneren

Abschließend werden wir einen Zylinder aus Polyethylen untersuchen, in den sechs Löcher gebohrt und mit Wasser aufgefüllt wurden. Die Rekonstruktion von diesem Probekörper zeigt die Grenzen des Verfahrens, aber auch der Laufzeitmessungen des THz-Tomographen auf. Des Weiteren nutzen wir den Probekörper um zu testen, ob die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten im Vergleich zu klassischen Verfahren verbessert werden kann, wenn nur die äußere Grenzfläche bekannt ist. Abbildung 4.23 zeigt die Maße des PE-Zylinders.

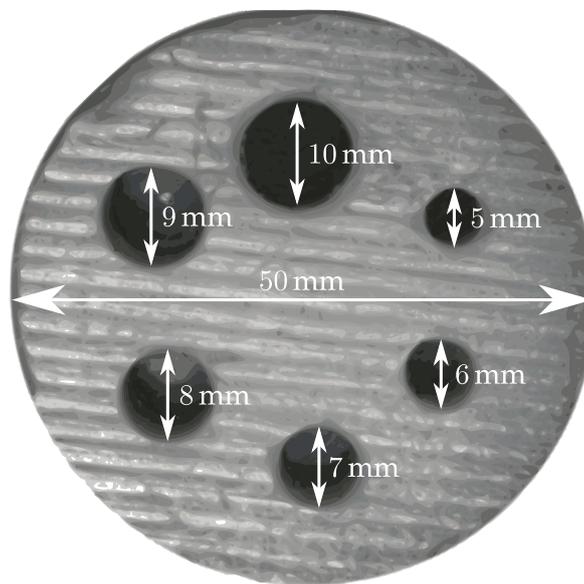


Abbildung 4.23.: Maße des PE-Zylinders

Wir betrachten zunächst nur die Rekonstruktion von n . Für die algebraische Rekonstruktionstechnik wurden 15 Iterationen mit $\lambda_{\text{ref}} = 0.01$ verwendet. Die modifizierte ART rekonstruiert das Objekt mit den Parametern

$$\zeta_1 = 0.1, \quad u = 1.8, \quad \psi = (3, 4, 4, 4, 7),$$

$$\lambda_{\text{ref}} = (0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125, 0.00125)$$

und da wir mit Wasser einen starken Absorber vorliegen haben ($\alpha_{\text{H}_2\text{O}} = 100 \text{ cm}^{-1}$), sortieren wir keine Messwerte aus, d. h. $\varepsilon_{\text{miss}} = 0$. Auffällig ist bei beiden Verfahren die sehr schwache Rekonstruktion des Brechungsindex, siehe Abbildung 4.24. Die Bohrungen sind als solche nicht zu erkennen, vielmehr wird der höhere Brechungsindex des Wassers ($n_{\text{H}_2\text{O}} = 2.5$) zu einem „Ring“ verschmiert. Außerdem wird das Objekt außerhalb der Bohrungen „abgeschnitten“, d. h. der Brechungsindex ist hier

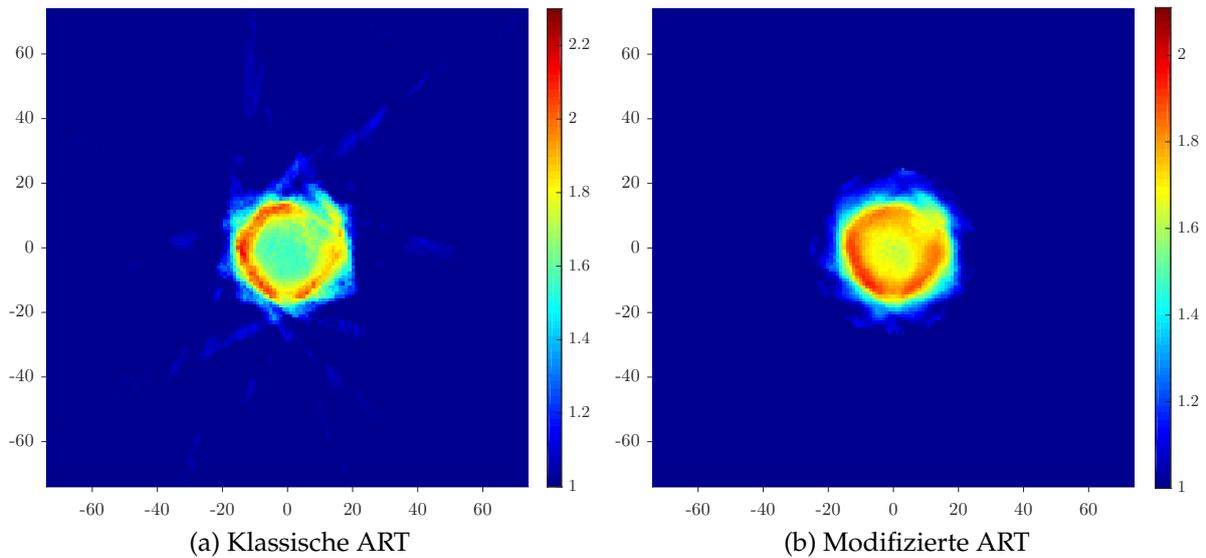


Abbildung 4.24.: Rekonstruktion von n vom PE-Zylinder

viel kleiner als er sein sollte. Dies kann an der fehlenden Modellierung der Strahlbreite und an einer Ablenkung des Strahls liegen. Trifft ein Gauß-Strahl auf den Randbereich des Zylinders, so wird durch einen Teil des Gauß-Strahls eine Laufzeitmessung durch die Luft am Empfänger erzeugt. Am Empfänger wird $d \approx 0$ detektiert (und damit $n \approx 1$ rekonstruiert), obwohl ein Teil des Strahls durch das Objekt geht und eine deutliche Verzögerung haben sollte. Dies wird auch aus der Simulation einer solchen Messsituation deutlich. Abbildung 4.25 zeigt das elektrische Feld für verschiedene Verschiebungen des Strahls bzw. des Objektes. Trifft nur ein Teil des Gauß-Strahls den

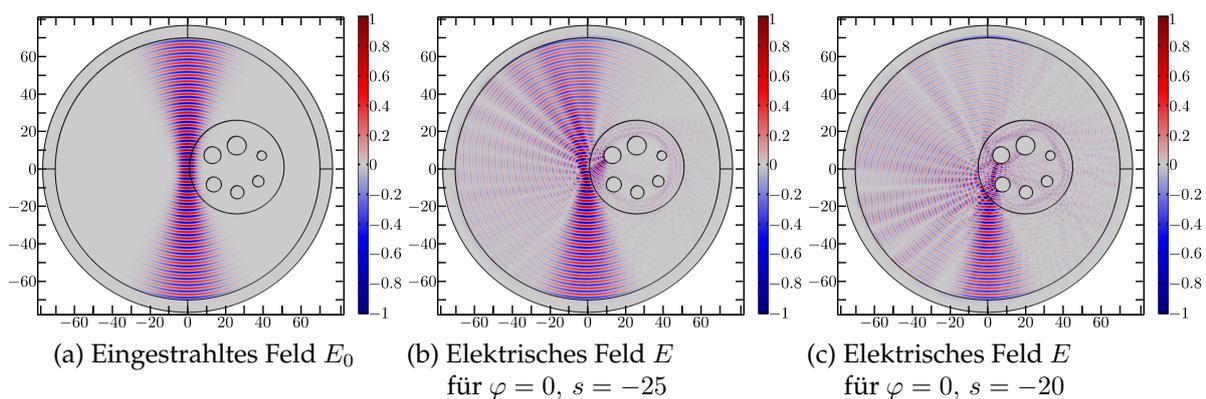


Abbildung 4.25.: Simulation der Messung vom PE-Zylinder beim Auftreffen des Gauß-Strahls auf den Randbereich des Objektes

Rand, so wird der Strahl hauptsächlich leicht abgelenkt und erreicht den Empfänger

aber vermutlich in ähnlich kurzer Zeit, wie durch Luft (Abbildung 4.25b). Dieser Rekonstruktionsfehler beim Brechungsindex tritt bei den rechteckigen Objekten in abgeschwächter Form ebenfalls auf. So ist auch bei der Rekonstruktion des PA-Blocks (vgl. Abbildung 4.15a) der Brechungsindex an den Rändern zu klein rekonstruiert worden. Dieses Problem ist aber auch schon in den Messdaten vom PE-Zylinder zu erkennen, was wir den Sinogrammen in Abbildung 4.26 entnehmen können. Während die Abschwächung der Intensität für die komplette Objektbreite zu erkennen ist (nämlich für Verschiebungen s zwischen -25 mm und 25 mm, siehe Abbildung 4.26b), entstehen Laufzeitunterschiede erst in einem Bereich von ca. -20 mm bis 20 mm, also ein deutlich schmalerer Bereich als den das Objekt tatsächlich einnimmt (Abbildung 4.26a). Dies wird auch durch die Simulation für $s = -20$ in Abbildung 4.25c bestätigt. Hier durchläuft der Hauptteil der Strahlung den Zylinder und wird durch das Wasser stark absorbiert. Eine messbare Laufzeitverzögerung ist die Folge. Die erheblichen Rekonstruktionsfehler haben sowohl in der vereinfachten Modellierung als auch in den Messdaten selbst ihren Ursprung.

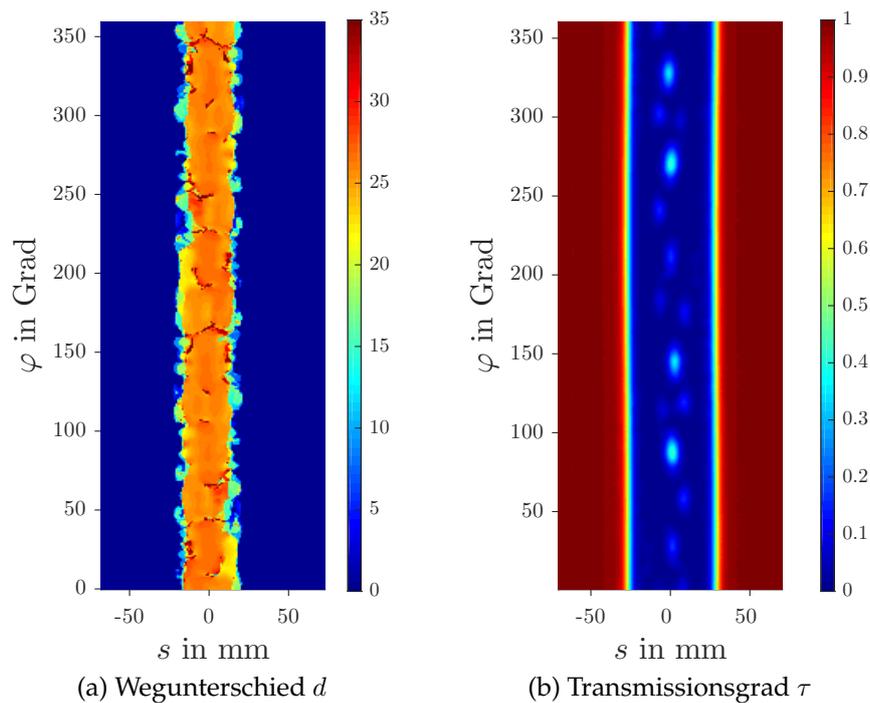


Abbildung 4.26.: PE-Zylinder: Sinogramme

Wir wenden uns nun der Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten zu. Bei der modifizierten ART geben wir nur die äußeren Grenzflächen an. Dies entspricht dem Fall, dass womöglich nur die äußere Form des Objektes bekannt ist und die Grenzflächen etwaiger, innen liegender Störungen nicht vorgegeben werden können. Zudem

sei der Brechungsindex aus der Rekonstruktion des PE-Blocks mit $n = 1.51$ bekannt und wird als a priori Information verwendet. Die Strahlwege der modifizierten ART werden also nur anhand der Brechungen an den Luft-PE Grenzflächen berechnet. Die modifizierte ART wiederholen wir mit dem vorgegebenen n mit 25 Iterationen und $\lambda_{\text{ref}} = 0.0125$. Die THz-Strahlen werden von Wasser stark absorbiert, was sich auch in der Rekonstruktion von α widerspiegelt (siehe Abbildung 4.27). Der tatsächliche Wert

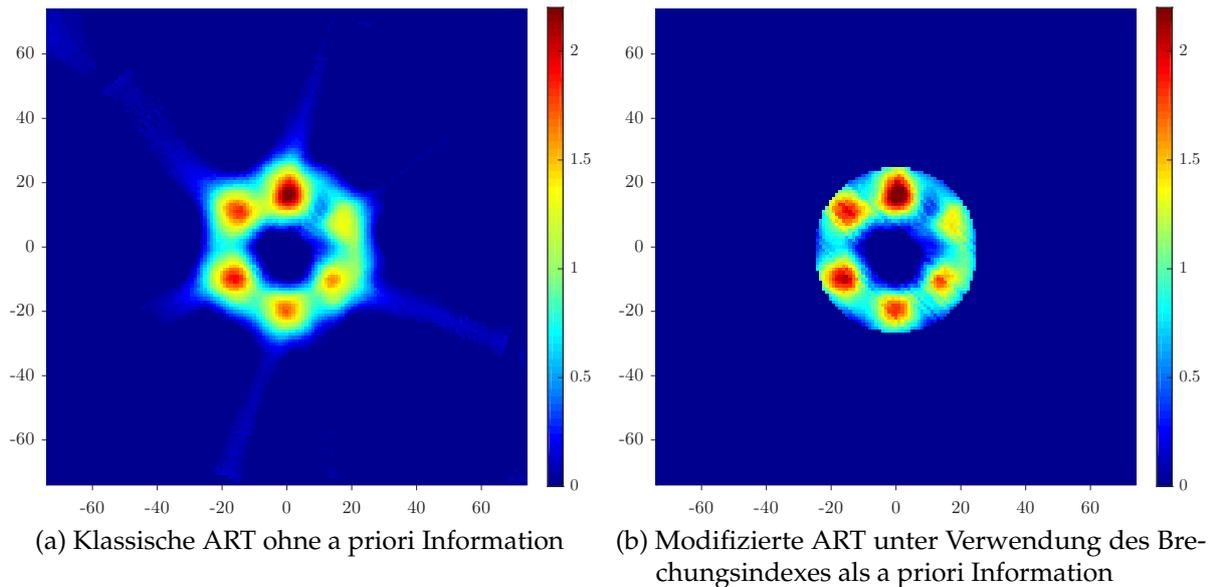


Abbildung 4.27.: Rekonstruktion von α vom PE-Zylinder

$\alpha_{\text{H}_2\text{O}} = 100 \text{ cm}^{-1}$ wird zwar nicht erreicht, aber der Absorptionskoeffizient der mit Wasser gefüllten Bohrungen wird als „sehr groß“ im Vergleich zum umliegenden Material rekonstruiert. Insgesamt fällt die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten deutlich aussagekräftiger aus als beim Brechungsindex. Die einzelnen Bohrungen sind bei der ART bereits zu erkennen, allerdings „zerlaufen“ sie stark (Abbildung 4.27a). Zudem erscheint die äußere Form eher „eckig“. Die modifizierte ART kann die Bohrungen dagegen kreisförmiger und separierter rekonstruieren (Abbildung 4.27b). Alle sechs Bohrungen können detektiert werden. Der rekonstruierte Wert des Grundmaterials PE ist in der Nähe der Bohrungen allerdings deutlich erhöht. Nur in der Mitte wird ein entsprechend kleiner Wert für α angenommen. Ein Grund hierfür kann in der Strahlbreite des Gauß-Strahls gefunden werden. Die Bohrungen liegen so dicht beieinander, dass nahezu kein Gauß-Strahl ohne eine (teilweise) Absorption durch das Wasser den PE-Zylinder durchqueren kann. Die Angabe nur der äußeren Grenzflächen reicht insgesamt aus, um die Rekonstruktion zu verbessern.

Zusätzlich dient die Rekonstruktion des PE-Zylinders auch als Maßstab für die erreichbare Auflösung mit der modifizierten ART. Grundsätzlich hängt die mögliche Auflö-

sung von der Strahltaile des Gauß-Strahls ab und wird daher vom THz-Tomographen vorgegeben. Bei einer Wellenlänge von 3 mm und einer Strahltaile von ca. 8 mm können wir dennoch Objekte mit einem Durchmesser von 6 mm klar detektieren. Das 5 mm Loch ist dagegen bereits sehr „verwischt“ und stellt die Grenze der hier möglichen Auflösung dar.

4.3. Grenzen des Verfahrens

Bei der Algorithmenentwicklung für die THz-Tomographie sollte ein Kompromiss zwischen schneller Rekonstruktion und detaillierter Modellierung gefunden werden. Am Ende von Kapitel 2.1.3 haben wir mithilfe der Simulation des Messvorgangs basierend auf der Helmholtz-Gleichung die dominierenden physikalischen Effekte identifiziert. Daher berücksichtigt die modifizierte ART die Brechung der Strahlen, Absorptions- und Reflexionsverluste. Weitere Effekte wurden vernachlässigt und aufgrund dieses Modellfehlers sind dem Verfahren folgende Grenzen gesetzt:

Da keine Beugungseffekte bei der Rekonstruktion berücksichtigt werden, können Objekte, bei denen die Beugung stark zur Geltung kommt, schlechter rekonstruiert werden. Dazu gehören z. B. Objekte mit einer nicht transmittierenden Fehlstelle, deren Größe ungefähr mit der Wellenlänge übereinstimmt. Dies gilt ebenso für Objekte, die zu einer starken Streuung der THz-Strahlung führen, also z. B. Teilchen, deren Durchmesser im Vergleich zur Wellenlänge klein ist, enthalten. Hierzu gehören geschäumte Probekörper, bei denen die Poren zu starker Streuung führen (vgl. [89]). Auch die Folge etwaiger Interferenzen, d. h. die Überlagerung von mehreren Wellen nach dem Superpositionsprinzip, die durch Reflexion, Streuung oder Beugung möglicherweise entstehen, werden nicht berücksichtigt. Des Weiteren fehlt bislang die Modellierung des Gauß-Profiles im Rekonstruktionsalgorithmus. Insbesondere auf die Rekonstruktion des Brechungsindex kann dies einen erheblichen Einfluss haben, wie die Rekonstruktion des PE-Zylinders in Kapitel 4.2.3 zeigt. Sobald nur ein Teil des Strahls durch das Objekt geht, wird am Empfänger noch ein „Luftdurchgang“ registriert (Wegunterschied $d \approx 0$) und der Brechungsindex auf den Rändern des Objektes wird zu klein rekonstruiert. Aber auch auf den Absorptionskoeffizienten kann das fehlende Strahlprofil Auswirkungen haben, da z. B. das Auftreffen nur eines Teils des Strahls am Empfänger nicht berücksichtigt wird. Die genannten Probleme treten allerdings auch bei den klassischen Rekonstruktionsverfahren auf.

Um diese physikalischen Eigenschaften abzudecken, müssten wir ein Rekonstruktionsverfahren basierend auf der Wellengleichung oder der Helmholtz-Gleichung (bei Verzicht auf die Auswertung von Laufzeitdaten) entwickeln. Die Rekonstruktion mit einem solchen Verfahren ist derzeit allerdings mit einem hohen rechnerischen

und zeitlichen Aufwand verbunden. Wir wollen den nötigen Aufwand zur Verdeutlichung kurz überschlagen: Wir benötigen für die numerische Lösung einer Helmholtz-Gleichung in Kapitel 2.1.3 ca. 20-40 Sekunden auf momentan aktueller Hardware. Für einen solchen Rekonstruktionsalgorithmus muss neben der Helmholtz-Gleichung auch der zugehörige adjungierte Operator ausgewertet werden (hierfür ist die Lösung einer weiteren Helmholtz-Gleichung nötig, siehe z. B. BAO UND LI [10]). Diese beiden Auswertungen müssen für jede verwendete Strahldrehung bzw. -verschiebung erfolgen, womit die Dauer einer derartigen Rekonstruktion, selbst bei Verwendung weniger Messdaten, schnell in den Stundenbereich geht. Dagegen dauert die Rekonstruktion mit der modifizierten ART i. d. R. nur wenige Minuten (abhängig von der Diskretisierung und der Anzahl und Lage der Grenzflächen). Auch die modifizierte ART benötigt eine längere Rechenzeit als die klassischen Verfahren aus der Computertomographie, was nicht allzu überraschend ist, da eine detailliertere Modellierung i. d. R. zu einem höheren Aufwand führt. So dauert die Berechnung einer Matrix A_i wegen der Einbeziehung der gebrochenen Strahlen ca. 3.5 mal länger als bei der ART. Dieser Wert variiert etwas, je nachdem wie viele Grenzflächen im Objekt vorliegen. Der zeitliche Aufwand für die Korrektur der Messdaten um den Faktor C_{abs} fällt dagegen kaum ins Gewicht. Die restlichen Schritte der Algorithmen sind identisch, womit das Aufstellen der Matrizen A_i der rechenintensivste Teil am neuen Algorithmus ist. Hinzu kommt, dass insgesamt mehr Kaczmarz-Iterationen benötigt werden. In den hier betrachteten Rekonstruktionen kann ART nach 7-15 Iterationen abgebrochen werden. Dagegen besteht die modifizierte ART aufsummiert aus ca. 20-25 Kaczmarz-Iterationen, zwischen denen bis zu 5 mal eine Matrix A_i berechnet wird. Die Berechnung der Systemmatrix kann nicht für ein bestimmtes Messzenario im Vorfeld erfolgen und anschließend für alle Rekonstruktionen verwendet werden, wie es für die ART mit Röntgenstrahlen möglich ist. Stattdessen müssen die Strahlwege und damit die Matrizen A_i anhand der Approximationen des Brechungsindex und der Grenzflächen des jeweiligen Probekörpers aktualisiert werden.

Die absolute Rechenzeit ist letztendlich stark abhängig von dem zugrunde liegenden Problem, d. h. wie „kompliziert“ die Strahlen aufgrund der Grenzflächen und des Brechungsindex gebrochen werden, von der Anzahl der verwendeten Messdaten, der Diskretisierung (Anzahl der Pixel) und der verwendeten Computerhardware (vgl. LITTAU, TEPE ET AL. [77]).

Kapitel 5

Fazit und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuer, effizienter Rekonstruktionsalgorithmus für die THz-Tomographie vorgestellt und an synthetischen und realen Messdaten validiert. Die modifizierte ART ermöglicht durch die Berücksichtigung von Brechung und Reflexionsverlusten die simultane Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex auf Basis von Laufzeit- und Intensitätsmessungen.

Um diese Aufgabe zu lösen, haben wir uns zunächst mit der Modellierung von THz-Strahlung und der Simulation des Messvorgangs beschäftigt. Dabei haben wir festgestellt, dass sich THz-Strahlung im Vakuum im Idealfall entsprechend eines Gauß-Strahls ausbreitet. Mithilfe der numerischen Lösung der Helmholtz-Gleichung konnten wir den Messvorgang des Transmissionsgrades simulieren. Darüber hinaus haben wir die Simulationen dazu genutzt, die wesentlichen physikalischen Effekte, die bei der Interaktion von THz-Strahlung mit einem Probekörper entstehen, zu identifizieren und festzulegen, welche physikalischen Eigenschaften wir für den Rekonstruktionsalgorithmus berücksichtigen wollen. Der hier gewählte Kompromiss zwischen schneller Rekonstruktion und detaillierter Modellierung besteht darin, die Integralgleichungen für die 2D-THz-Transmissions- und Laufzeittomographie zu betrachten und dabei die dominierenden physikalischen Effekte wie Brechung, Absorption und Reflexionsverluste zu berücksichtigen. Der Vorteil von diesem Vorgehen ist, dass auf die aufwendige Lösung einer partiellen Differentialgleichung, wie der Wellen- oder Helmholtz-Gleichung, verzichtet werden kann. Die Modellierung des gaußschen Strahlprofils wurde bislang vernachlässigt.

Die modifizierte ART benötigt als a priori Information die Positionen und Normalen der Grenzflächen des Probekörpers. Diese Forderung ist mitunter schwer zu erfüllen, insbesondere, wenn es um die Grenzflächen etwaiger (unbekannter) Störstellen im Material geht. Allerdings zeigen die Ergebnisse zum PE-Zylinders (Kapitel 4.2.3), dass bereits die Kenntnis der äußeren Grenzflächen ausreicht, um eine bessere Rekonstruktion von verborgenen Störstellen im Inneren zu erreichen. Für die Algorithmenentwicklung haben wir zunächst einen Strahlverlauf entlang gebrochener

Geradenstücke nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz hergeleitet. Die Diskretisierung der Integralgleichungen erfolgt analog zur ART und führt das Problem auf die Lösung zweier linearer Gleichungssysteme zurück. Die Systemmatrix ist für beide Gleichungssysteme identisch und spiegelt die Strahlverläufe für die verschiedenen Verschiebungen und Drehungen des Objektes wider. Dadurch hängt der Vorwärtsoperator vom gesuchten Brechungsindex ab, was sowohl die Rekonstruktion, als auch die Konvergenzbetrachtungen, erschwert. Wir können die Gleichungssysteme durch eine iterative Anwendung mehrerer Kaczmarz-Verfahren lösen, wobei zwischen den Verfahren die Matrix A und damit die Strahlwege anhand der aktuellen Approximation von n aktualisiert werden. So wird die Brechung der Strahlen schrittweise genauer berücksichtigt und wir können neben dem komplexen Brechungsindex, auch die Strahlwege rekonstruieren. An den Grenzflächen treten Reflexionsverluste auf, welche die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten stören. Die Reflexionsverluste berechnen wir mit den Fresnelschen Formeln und nutzen sie, um die Messdaten zum Transmissionsgrad zu korrigieren. Die Konvergenz der modifizierten ART konnten wir unter der Annahme zeigen, dass die Konvergenz des Vorwärtsoperators gegeben ist.

Abschließend konnte der Algorithmus anhand von synthetischen und realen Messdaten validiert werden. Ein Vergleich mit den Rekonstruktionen von klassischen Verfahren aus der Computertomographie, der gefilterten Rückprojektion und der ART, zeigt zudem, dass die Materialparameter und die Grenzflächen deutlich besser rekonstruiert werden können. Auf die Grenzen des Verfahrens sind wir in Kapitel 4.3 eingegangen. Zusammenfassend liefert die modifizierte ART:

- die Berücksichtigung der dominierenden physikalischen Effekte der THz-Strahlung,
- einen effizienten Rekonstruktionsalgorithmus für die THz-Tomographie,
- einen hybriden Algorithmus, der zwei verschiedene tomographische Prinzipien (Transmissions- und Laufzeit-tomographie) ausnutzt,
- die Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex auf der Basis von Laufzeit- und Intensitätsmessungen,
- eine bessere Rekonstruktion der Materialparameter als mit herkömmlichen Verfahren aus der Computertomographie,
- die Rekonstruktion der Strahlwege,
- ein konvergentes Verfahren bei Annahme der Konvergenz des Vorwärtsoperators.

Da die ersten Ergebnisse sehr vielversprechend sind, können folgende Ansätze zur Verbesserung der modifizierten ART für eine zukünftige Forschungsarbeit verfolgt

werden:

Eine wichtige Eigenschaft von THz-Strahlung ist ihre Ausbreitung gemäß eines Gauß-Strahls. Die Modellierung dieser physikalischen Eigenschaft wird bislang vernachlässigt. Daher ist die Berücksichtigung des Gauß-Profiles im Rekonstruktionsalgorithmus ein sinnvoller nächster Schritt. Für die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten ließe sich nun z. B. berücksichtigen, dass eine geringere Intensität am Empfänger gemessen wird, wenn nur ein Teil des Strahls auf den Empfänger trifft.

Des Weiteren sollte der Algorithmus an weiteren Probekörpern, vor allem in Hinblick auf die Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten, getestet werden. Für die verwendeten Objekte lagen für α nur Werte aus der Literatur vor, sodass eine Aussage über die Rekonstruktionsfehler schwierig ist. Rekonstruktionen anhand von Probekörpern mit bekanntem α würden Aufschluss darüber geben, ob die bisherige Modellierung bereits ausreicht, oder ob z. B. die Modellierung der Reflexionsverluste erweitert werden sollte oder die oben erwähnte Berücksichtigung des Strahlprofils für zufriedenstellende Ergebnisse unumgänglich ist. Auch ein Test von Probekörpern mit sich „stetig“ veränderndem Brechungsindex (wie es z. B. bei einer ungleichmäßigen Zugabe von Füllstoffen möglich wäre) ist von Belang. Die „glatten“ Änderungen in n führen in diesem Fall dazu, dass der Strahl nicht an einer Grenzfläche gebrochen, aber abgelenkt werden würde, da sich die THz-Strahlung nach dem Fermatschen Prinzip den kürzesten Weg durch das Objekt sucht. Hier stellt sich die Frage, wie sehr diese Ablenkung bzw. der zugehörige Modellierungsfehler im Algorithmus die Rekonstruktionsergebnisse beeinträchtigt, da wir nur an Grenzflächen brechen und ansonsten von einem geraden Strahlverlauf ausgehen.

Der verwendete THz-Tomograph nutzt Strahlung, die sich im unteren THz-Bereich befindet (70-110 GHz). Dies hat zur Folge, dass im Vergleich zu höheren THz-Frequenzen Welleneffekte stärker vertreten sind. Wir betrachten hier abgesehen von der Brechung und den Reflexionsverlusten die Ausbreitung entlang (gebrochener) Strahlen. Daher sollte die modifizierte ART mit Messdaten von einem THz-Tomographen, der höhere Frequenzen verwendet, besser funktionieren, da der Strahlcharakter deutlicher in Erscheinung tritt. Nebenbei würden höhere Frequenzen auch generell eine höhere Auflösung ermöglichen.

Die Anpassung der modifizierten ART für eine 3D-THz-Tomographie ist ebenfalls ein schlüssiger nächster Schritt. Die Grenzflächen können nun nicht mehr als parametrisierte Kurven dargestellt werden, sondern sind Flächen im dreidimensionalen Raum. Dementsprechend müssen die gebrochenen Strahlen anhand der Schnittpunkte mit diesen Flächen bestimmt werden. Dies betrifft in erster Linie die Gleichung (3.4). Auch können wir nicht mehr voraussetzen, dass die Einfallsebenen aller Grenzflächen in einer Ebene liegen (siehe Bemerkung 3.4). Damit muss ein Wechsel der Polarisation der Strahlung an den Grenzflächen zusätzlich modelliert werden.

Um die Rechenzeit bei der Rekonstruktion zu verkürzen, wäre auch der Einsatz der simultanen algebraischen Rekonstruktionstechnik (SART, [9]) oder allgemeiner von Block-algebraische iterativen Methoden (vgl. [29]) und der damit möglichen Parallelisierung (siehe z. B. [104]), bis hin zum Rechnen auf Grafikkarten (siehe [87]), denkbar. Da die Modifizierungen an der klassischen ART ausschließlich die Matrix A und die Daten g_{abs} betreffen, lässt sich die Iterationsvorschrift von z. B. SART zur Lösung der Gleichungssysteme direkt anwenden.

Eine Einschränkung der modifizierten ART ist die notwendige a priori Information über die Normalen des Probekörpers. Eine interessante und fordernde Aufgabe ist daher die Entwicklung eines Verfahrens, welches aus den gegebenen Messdaten die Grenzflächen samt Normalen extrahiert. Erste Ansätze zur Bestimmung der Grenzflächen mittels des SAFT-Algorithmus (siehe Kapitel 3.1) liefern keine zufriedenstellenden Ergebnisse. Zur Ermittlung der Sprungstellen und Konturen des Objektes bieten sich ggf. auch Verfahren der lokalen Tomographie und der Feature-Rekonstruktion an (siehe z. B. FARIDANI ET AL. [36] und LOUIS [79, 80]). Allerdings wird die Anwendung dieser Verfahren ebenfalls durch die unbekanntenen Strahlwege erschwert und zudem müssen aus der Rekonstruktion der Konturen des Objektes noch die Normalen bestimmt werden.

Derzeit wird an der Anwendung von sequentiellen Unterraum-Verfahren (engl. „Sequential Subspace Optimization“, SESOP, siehe WALD UND SCHUSTER [113]) zur Lösung des nichtlinearen inversen Problems der THz-Tomographie basierend auf der Helmholtz-Gleichung geforscht. Der Vorteil von diesem Vorgehen ist, dass der Wellencharakter der THz-Strahlung vollständig berücksichtigt werden kann, also auch die hier vernachlässigten Streu- und Beugungseffekte und der Gauß-Strahl bei der Rekonstruktion des komplexen Brechungsindex beachtet werden. Dadurch wird das Verfahren allerdings sehr aufwendig. Durch die harmonische Zeitabhängigkeit der Helmholtz-Gleichung lassen sich zudem keine Laufzeit-Messdaten nutzen und die Rekonstruktion erfolgt allein aus dem Transmissionsgrad. Ein iteratives Verfahren zur Lösung eines nichtlinearen inversen Problems muss hinreichend nahe an der gesuchten Lösung starten, um zu konvergieren. Ein guter Startwert ist unabdingbar und könnte in diesem Fall z. B. durch die modifizierte ART geliefert werden. Auch über die Verschmelzung beider Verfahren zu einem Prädiktor-Korrektor-ähnlichen Verfahren kann nachgedacht werden.

Die Konvergenz der modifizierten ART kann ebenfalls weiter untersucht werden. Zum einen könnten wir die Wahl der Abbruchindizes durch eine a posteriori-Strategie, wie dem Diskrepanzprinzip, ersetzen, um ohne zusätzliche Informationen über die Minimum-Norm-Lösung auszukommen. Zum anderen steht ein Beweis der Konvergenz der modifizierten ART, ohne der Annahme der Konvergenz des Vorwärtsoperators, noch aus. Die große Herausforderung hierbei ist, dass der Vorwärtsoperator von

der zu rekonstruierenden Größe abhängt. Da diese Schwierigkeit in ähnlicher Form auch bei der Lösung von anderen inversen Problemen, wie dem inversen kinematischen Problem der Seismik, auftritt, wäre auch eine allgemeine Untersuchung von Regularisierungsverfahren für derartige inverse Probleme sehr wertvoll.

Anhang A

Berechnung der Schnittpunkte und Normalen mit verschiedenen Grenzflächen

In Kapitel 3.2 wird der Strahlverlauf unter Berücksichtigung der Brechung beschrieben. Hierfür werden zum einen die Parameter des Schnittpunktes \tilde{t} und $\tilde{\sigma}$ nach Gleichung (3.4) und zum anderen der Schnittpunkt $\Xi(\tilde{\sigma})$ selbst sowie die zugehörige Normale $\mathbf{n} := \mathbf{n}(\tilde{\sigma})$ nach Gleichung (3.5) benötigt. Die explizite Berechnung dieser Größen soll hier anhand von Grenzflächen in Form von Geraden und Ellipsen erfolgen, aus denen die meisten relevanten Objekte zusammengesetzt werden können. Der (Teil-)Strahl, für den der nächste Schnittpunkt mit einer Grenzfläche bestimmt werden soll, sei wie in Gleichung (3.3) parametrisiert.

A.1. Gerade

Die Grenzfläche sei durch eine Gerade

$$\Xi(\sigma) := P + \sigma(Q - P), \quad \sigma \in [0, 1]$$

in der Zweipunkteform mit den Vektoren $P = [p_x, p_y]^T$ und $Q = [q_x, q_y]^T$ parametrisiert. Dann sind die gesuchten Parameter durch die Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \Gamma(t) = \Xi(\sigma) &\Leftrightarrow s\omega(\varphi) + t\omega^\perp(\varphi) = P + \sigma(Q - P) \\ &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} -\sin \varphi & p_x - q_x \\ \cos \varphi & p_y - q_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ \sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} - s \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

als

$$\tilde{t} := \frac{(p_y - q_y)(p_x - s \cos \varphi) - (p_x - q_x)(p_y - s \sin \varphi)}{-\sin \varphi (p_y - q_y) - \cos \varphi (p_x - q_x)}$$

und

$$\tilde{\sigma} := \frac{s - p_y \sin \varphi - p_x \cos \varphi}{-\sin \varphi (p_y - q_y) - \cos \varphi (p_x - q_x)}$$

gegeben. Der Nenner

$$-\sin \varphi (p_y - q_y) - \cos \varphi (p_x - q_x) = \langle \omega, Q - P \rangle$$

verschwindet falls $\omega \perp (Q - P)$ bzw. $\omega^\perp \parallel (Q - P)$ ist. In dem Fall sind die Richtungsvektoren der beiden Geraden parallel zueinander und es existiert kein Schnittpunkt mit der Grenzfläche. Ansonsten ergibt sich der Schnittpunkt als

$$\Xi(\tilde{\sigma}) = P + \tilde{\sigma}(Q - P) = s\omega + \tilde{t}\omega^\perp$$

und die zugehörige Normale direkt aus dem Vektor

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} p_y - q_y \\ q_x - p_x \end{pmatrix}$$

senkrecht zum Richtungsvektor der Grenzfläche.

A.2. Ellipse

Eine ellipsenförmige Grenzfläche sei in der Parameterform

$$\begin{aligned} \Xi(\sigma) &= b + DS\omega(\sigma) \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} b_x \\ b_y \end{pmatrix}}_{\text{Verschiebung}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}}_{\text{Drehung}} \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}}_{\text{Stauchung}} \begin{pmatrix} \cos \sigma \\ \sin \sigma \end{pmatrix}, \quad \sigma \in [0, 2\pi) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

gegeben mit dem Rotationswinkel θ bezüglich der x -Achse. Gesucht sind wieder die Parameter \tilde{t} und $\tilde{\sigma}$ als Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} s\omega(\varphi) + t\omega^\perp(\varphi) &= b + DS\omega(\sigma) \\ \Leftrightarrow \underbrace{D^{-1}(s\omega - b)}_{=: P = [p_x, p_y]^\top} + \underbrace{D^{-1}\omega^\perp}_{=: Q = [q_x, q_y]^\top} t &= \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \cos \sigma \\ \beta \sin \sigma \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Die rechte Seite lässt sich nun leicht in kartesischen Koordinaten ausdrücken. Dazu sei $x := \alpha \cos \sigma$ und $y := \beta \sin \sigma$ und mit $\cos \sigma = \frac{x}{\alpha} \Leftrightarrow \sigma = \arccos \frac{x}{\alpha} \Rightarrow y = \beta \sin \left(\arccos \frac{x}{\alpha} \right) = \beta \sqrt{1 - \left(\frac{x}{\alpha} \right)^2}$ erhalten wir die Ellipsengleichung in kartesischen Koordinaten

$$\frac{x^2}{\alpha^2} + \frac{y^2}{\beta^2} = 1.$$

Wir setzen $x = p_x + q_x t$ und $y = p_y + q_y t$ in die obige Ellipsengleichung ein, lösen nach t auf und erhalten

$$t_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{\rho^2} + \frac{\eta}{\rho^2} - \frac{\mu}{\rho}} \quad (\text{A.3})$$

mit

$$\begin{aligned} \rho &= \beta^2 q_x^2 + \alpha^2 q_y^2, \\ \mu &= \beta^2 p_x q_x + \alpha^2 p_y q_y, \\ \eta &= \alpha^2 \beta^2 - \beta^2 p_x^2 - \alpha^2 p_y^2. \end{aligned}$$

Da $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$ und $Q \neq 0$ ist auch $\rho \neq 0$ (andernfalls liegt entweder keine Ellipse vor oder der Richtungsvektor des Strahls würde verschwinden) und der Term unter der Wurzel in (A.3) wird nur dann negativ, wenn der Strahl die Ellipse nicht schneidet. Somit sind die Schnittpunkte des Strahls mit der Ellipse durch

$$\Xi(\tilde{\sigma}_{1,2}) = \begin{pmatrix} \xi_1^{1,2} \\ \xi_2^{1,2} \end{pmatrix} = D^{-1}(s\omega - b) + D^{-1}\omega^\perp \tilde{t}_{1,2}$$

gegeben. Die Parameter der Ellipse lassen sich aus dem Schnittpunkt berechnen. Nach (A.2) ist $\xi_1^{1,2} = \alpha \cos \sigma$ und $\xi_2^{1,2} = \beta \sin \sigma$ und damit ergibt sich

$$\tilde{\sigma}_{1,2} = \arctan 2(\xi_2^{1,2} \alpha, \xi_1^{1,2} \beta) := \begin{cases} \arctan \frac{y}{x} & \text{für } x > 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + \pi & \text{für } x < 0, y \geq 0 \\ \arctan \frac{y}{x} - \pi & \text{für } x < 0, y < 0 \\ \pi/2 & \text{für } x = 0, y > 0 \\ -\pi/2 & \text{für } x = 0, y < 0 \\ 0 & \text{für } x = 0, y = 0 \end{cases}$$

mit dem Arkustangens mit zwei Argumenten, um den Winkel im richtigen Quadranten bestimmen zu können. Die Normalen in den Schnittpunkten sind nach Differentiation von (A.1) gegeben durch

$$\mathbf{n}(\tilde{\sigma}_{1,2}) = \begin{pmatrix} -\xi_2' \\ \xi_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \sin \theta \sin \tilde{\sigma}_{1,2} - \beta \cos \theta \cos \tilde{\sigma}_{1,2} \\ -\alpha \cos \theta \sin \tilde{\sigma}_{1,2} - \beta \sin \theta \cos \tilde{\sigma}_{1,2} \end{pmatrix}.$$

Literaturverzeichnis

- [1] E. ABRAHAM, A. YOUNUS, C. AGUERRE, P. DESBARATS, AND P. MOUNAIX, *Refraction losses in terahertz computed tomography*, Optics Communications, 283 (2010), pp. 2050–2055.
- [2] E. ABRAHAM, A. YOUNUS, J. DELAGNES, AND P. MOUNAIX, *Non-invasive investigation of art paintings by terahertz imaging*, Applied Physics A, 100 (2010), pp. 585–590.
- [3] I. ALIG AND D. LELLINGER, *Frequency dependence of ultrasonic velocity and attenuation in two-phase composite systems with spherical scatterers*, Journal of Applied Physics, 72 (1992), pp. 5565–5570.
- [4] I. AMENABAR, F. LOPEZ, AND A. MENDIKUTE, *In Introductory Review to THz Non-Destructive Testing of Composite Mater*, Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 34 (2013), pp. 152–169.
- [5] A. H. ANDERSEN, *Tomography transform and inverse in geometrical optics*, J. Opt. Soc. Am. A, 4 (1987), pp. 1385–1395.
- [6] —, *A ray tracing approach to restoration and resolution enhancement in experimental ultrasound tomography*, Ultrasonic Imaging, 12 (1990), pp. 268–291.
- [7] —, *Ray tracing for reconstructive tomography in the presence of object discontinuity boundaries: A comparative analysis of recursive schemes*, J. Acoust. Soc. Am., 89 (1991), pp. 574–582.
- [8] A. H. ANDERSEN AND A. C. KAK, *Digital ray tracing in two dimensional refractive fields*, J. Acoust. Soc. Am., 72 (1982), pp. 1593–1606.
- [9] —, *Simultaneous algebraic reconstruction technique (SART): A superior implementation of the ART algorithm*, Ultrasonic Imaging, 6 (1984), pp. 81–94.
- [10] G. BAO AND P. LI, *Inverse medium scattering for the Helmholtz equation at fixed frequency*, Inverse Problems, 21 (2005), pp. 1622–1642.
- [11] J.-P. BERENGER, *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, Journal of Computational Physics, 2 (1994), pp. 185–200.
- [12] R. B. BERGMANN AND E. ZABLER, *Methoden der zerstörungsfreien Prüfung*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006, pp. 363–410.

- [13] Å. BJÖRCK, *Numerical methods for Least Squares Problems*, vol. 65004, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [14] M. BORN AND E. WOLF, *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, Pergamon Press, 4 ed., 1970.
- [15] D. BRAESS, *Finite Elemente*, Springer, 2013.
- [16] A. BRAHM, M. KUNZ, S. RIEHEMANN, G. NOTNI, AND A. TÜNNERMANN, *Volumetric spectral analysis of materials using terahertz-tomography techniques*, *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 100 (2010), pp. 151–158.
- [17] A. BRAHM, A. WILMS, M. TYMOSHCHUK, C. GROSSMANN, G. NOTNI, AND A. TÜNNERMANN, *Optical effects at projection measurements for terahertz tomography*, *Optics & Laser Technology*, 62 (2014), pp. 49–57.
- [18] L. BUSSE, *Three-dimensional imaging using a frequency-domain synthetic aperture focusing technique*, *Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control*, *IEEE Transactions on*, 39 (1992), pp. 174–179.
- [19] Y. CENSOR, *Row-action methods for huge and sparse systems and their applications*, *SIAM Review*, 23 (1981), pp. 444–466.
- [20] Y. CENSOR, P. P. B. EGGERMONT, AND D. GORDON, *Strong underrelaxation in Kaczmarz's method for inconsistent systems*, *Numerische Mathematik*, 41 (1983), pp. 83–92.
- [21] L. CHRZANOWSKI, J. BECKMANN, B. MARCHETTI, U. EWERT, AND U. SCHADE, *Terahertz-Strahlung - Möglichkeiten für die Zerstörungsfreie Prüfung von Flüssigkeiten*, in *DGZfP-Jahrestagung*, 2010.
- [22] D. COLTON, J. COYLE, AND P. MONK, *Recent developments in inverse acoustic scattering theory*, *SIAM Review*, 42 (2000), pp. 369–414.
- [23] D. COLTON AND R. KRESS, *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, *Applied mathematical sciences*, Springer New York, 3 ed., 2013.
- [24] J. DARMO, V. TAMOSIUNAS, G. FASCHING, J. KRÖLL, K. UNTERRAINER, M. BECK, M. GIOVANNINI, J. FAIST, C. KREMSER, AND P. DEBBAGE, *Imaging with a terahertz quantum cascade laser*, *Opt. Express*, 12 (2004), pp. 1879–1884.
- [25] C. DAVIS, *Lasers and Electro-Optics: Fundamentals and Engineering*, Cambridge University Press, 2006.
- [26] M. DEFRISE AND C. DE MOL, *A note on stopping rules for iterative regularization methods and filtered SVD*, *Inverse Problems: An Interdisciplinary Study*, P.C. Sabatier, ed., Academic Press, New York, (1987), pp. 261–268.
- [27] W. DEMTRÖDER, *Experimentalphysik, Band 2: Elektrizität und Optik*, Springer, 1999.

- [28] F. DENIS, O. BASSET, AND G. GIMENEZ, *Ultrasonic transmission tomography in refracting media: reduction of refraction artifacts by curved-ray techniques*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 14 (1995), pp. 173–188.
- [29] T. ELFVING, *Block-iterative methods for consistent and inconsistent linear equations*, Numerische Mathematik, 35 (1980), pp. 1–12.
- [30] T. ELFVING, P. C. HANSEN, AND T. NIKAZAD, *Semi-convergence properties of Kaczmarz's method*, Inverse Problems, 30, 055007 (2014).
- [31] T. ELFVING AND T. NIKAZAD, *Properties of a class of block-iterative methods*, Inverse Problems, 25, 115011 (2009).
- [32] F. ELLRICH, T. WEINLAND, J. KLIER, J. JONUSCHEIT, AND R. BEIGANG, *Terahertz-Wellen - ein neuer Spektralbereich für die industrielle Messtechnik*, tm - Technisches Messen, 77 (2010), pp. 452–461.
- [33] L. ELSNER, I. KOLTRACHT, AND P. LANCASTER, *Convergence properties of ART and SOR algorithms*, Numerische Mathematik, 59 (1991), pp. 91–106.
- [34] H. ENGL, M. HANKE, AND A. NEUBAUER, *Regularization of Inverse Problems*, Mathematics and Its Applications, Springer Netherlands, 2000.
- [35] B. EWERS, A. KUPSCH, A. LANGE, B. MÜLLER, A. HOEHL, R. MÜLLER, AND G. ULM, *Terahertz spectral computed tomography*, in IRMMW-THz 2009. 34th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, Sept 2009, pp. 1–2.
- [36] A. FARIDANI, E. L. RITMAN, AND K. T. SMITH, *Local tomography*, SIAM Journal on Applied Mathematics, 52 (1992), pp. 459–484.
- [37] C. FATTINGER AND D. GRISCHKOWSKY, *Terahertz beams*, Applied Physics Letters, 54 (1989), pp. 490–492.
- [38] J. F. FEDERICI, B. SCHULKIN, F. HUANG, D. GARY, R. BARAT, F. OLIVEIRA, AND D. ZIMDARS, *THz imaging and sensing for security applications – explosives, weapons and drugs*, Semiconductor Science and Technology, 20 (2005), p. S266.
- [39] B. FERGUSON, *Three Dimensional T-ray Inspection Systems*, PhD thesis, University of Adelaide, 2004.
- [40] B. FERGUSON, S. WANG, D. GRAY, D. ABBOT, AND X.-C. ZHANG, *T-ray computed tomography*, Optics Letters, 27 (2002), pp. 1312–1314.
- [41] T. FLIESSBACH, *Elektrodynamik: Lehrbuch Zur Theoretischen Physik II*, Springer Verlag, 2012.
- [42] D. FRATSCHER, J. BECKMANN, L. S. VON CHRANOWSKI, AND U. EWERT, *Computed THz-tomography*, in Proceedings 18th World Conference on Nondestructive Testing, Durban, South Africa, 2012.

- [43] R. GORDON, R. BENDER, AND G. T. HERMAN, *Algebraic reconstruction techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and X-ray photography*, *Journal of Theoretical Biology*, 29 (1970), pp. 471–481.
- [44] C. GROSSMANN AND H.-G. ROOS, *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*, Vieweg+Teubner Verlag, 2005.
- [45] J. GUILLET, B. RECUR, L. FREDERIQUE, B. BOUSQUET, L. CANIONI, I. MANEK-HÖNNINGER, P. DESBARATS, AND P. MOUNAIX, *Review of terahertz tomography techniques*, *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 35 (2014), pp. 382–411.
- [46] W. HACKBUSCH, *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*, Leitfäden der angewandten Mathematik und Mechanik - Teubner Studienbücher, Vieweg+Teubner Verlag, 1993.
- [47] J. HADAMARD, *Lectures on the Cauchy Problem in Linear Partial Differential Equations*, New Haven: Yale University Press, 1923.
- [48] P. C. HANSEN, *Tutorial: Row action methods*. Department of Informatics and Mathematical Modeling, Technical University of Denmark, Online: <http://www2.compute.dtu.dk/~pcha/AIRtools/Tutorial/MIRANpart1.pdf> [Zugriff am 09.02.2015], Juni 2012.
- [49] J. HAUCK, D. STICH, P. HEIDEMEYER, M. BASTIAN, AND T. HOCHREIN, *Untersuchung der Bauteileigenschaften von Kunststoffprodukten mittels zeitaufgelöster Terahertz-Spektroskopie*, in DGZfP-Jahrestagung, 2013.
- [50] H. HINTZSCHE, C. JASTROW, T. KLEINE-OSTMANN, H. STOPPER, E. SCHMID, AND T. SCHRADER, *Terahertz Radiation Induces Spindle Disturbances in Human-Hamster Hybrid Cells*, *Radiation Research*, 175 (2011), pp. 569–574.
- [51] T. HOCHREIN, *Markt, Entwicklung und Stand der Technik der Terahertz-Systeme: Vergangenheit, Gegenwart und Zukunft*, in DGZfP-Jahrestagung, 2013.
- [52] A. HOFFKNECHT, D. HOLTSMANNSPÖTTER, AND A. ZWECK, *Die Terahertz-Technologie und ihre möglichen Anwendungen*, tech. rep., VDI Technologiezentrum GmbH im Auftrag des Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), 2005.
- [53] B. HOFMANN, *Mathematik inverser Probleme*, B.G. Teubner, Leipzig, 1999.
- [54] C. JANSEN, S. WIETZKE, O. PETERS, M. SCHELLER, N. VIEWEG, M. SALHI, N. KRUMBHOLZ, C. JÖRDENS, T. HOCHREIN, AND M. KOCH, *Terahertz imaging: Applications and perspectives*, *Applied Optics*, 49 (2010), pp. E48–E57.
- [55] C. JANSEN, S. WIETZKE, M. SCHELLER, N. KRUMBHOLZ, C. JÖRDENS, K. BAASKE, T. HOCHREIN, M. KOCH, AND R. WILK, *Applications for THz Systems*. *Optik & Photonik*, December 2008.

- [56] M. JEWARIYA, E. ABRAHAM, T. KITAGUCHI, Y. OHGI, M. MINAMI, T. ARAKI, AND T. YASUI, *Fast three-dimensional terahertz computed tomography using real-time line projection of intense terahertz pulse*, *Opt. Express*, 21 (2013), pp. 2423–2433.
- [57] M. JIANG AND G. WANG, *Convergence studies on iterative algorithms for image reconstruction*, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 22 (2003), pp. 569–579.
- [58] J. JIN, *The Finite Element Method in Electromagnetics*, New York: John Wiley & Sons, 2002.
- [59] Y.-S. JIN, G.-J. KIM, AND S.-G. JEON, *Terahertz dielectric properties of polymers*, *Journal of the Korean Physical Society*, 49 (2006), pp. 513–517.
- [60] S. JOHNSON, J. GREENLEAF, W. SAMAYOA, F. DUCK, AND J. SJOSTRAND, *Reconstruction of three-dimensional velocity fields and other parameters by acoustic ray tracing*, in *Ultrasonics Symposium*, 1975, pp. 46–51.
- [61] S. KACZMARZ, *Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichungen*, *Bulletin International de l'Academie Polonaise des Sciences et des Lettres*, 35 (1937), pp. 355–357.
- [62] A. KAK, *Computerized tomography with X-ray, emission, and ultrasound sources*, *Proceedings of the IEEE*, 67 (1979), pp. 1245–1272.
- [63] A. KAK AND M. SLANEY, *Principles of computerized tomographic imaging*, *IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, 1988.
- [64] N. KARPOWICZ, H. ZHONG, J. XU, K.-I. LIN, J.-S. HWANG, AND X.-C. ZHANG, *Comparison between pulsed terahertz time-domain imaging and continuous wave terahertz imaging*, *Semiconductor Science and Technology*, 20 (2005), pp. S293–S299.
- [65] K. KAWASE, Y. OGAWA, Y. WATANABE, AND H. INOUE, *Non-destructive terahertz imaging of illicit drugs using spectral fingerprints*, *Opt. Express*, 11 (2003), pp. 2549–2554.
- [66] S. KINDERMANN AND A. LEITÃO, *Convergence rates for Kaczmarz-type regularization methods*, *Inverse Problems and Imaging*, 8 (2014), pp. 149–172.
- [67] M. KOCH, *Terahertz-Technologie: Quo Vadis?* *Photonik* 4/2005, April 2005.
- [68] J. KRAUTKRÄMER, H. KRAUTKRÄMER, W. GRABENDÖRFER, L. NIKLAS, R. FRIELINGHAUS, J. KRAUTKRÄMER, M. GREGOR, W. KAULE, H. SCHLEMM, U. SCHLENGERMANN, AND H. SEIGER, *Werkstoffprüfung mit Ultraschall*, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [69] N. KRUMBHOLZ, T. HOCHREIN, N. VIEWEG, T. HASEK, K. KRETSCHMER, M. BASTIAN, M. MIKULICS, AND M. KOCH, *Monitoring polymeric compounding processes inline with THz time-domain spectroscopy*, *Polymer Testing*, 28 (2009), pp. 30–35.

- [70] N. KRUMBHOLZ, T. HOCHREIN, N. VIEWEG, I. RADOVANOVIC, I. PUPEZA, M. SCHUBERT, K. KRETSCHMER, AND M. KOCH, *Degree of dispersion of polymeric compounds determined with terahertz time-domain spectroscopy*, *Polymer Engineering and Science*, 51 (2010), pp. 109–116.
- [71] J. W. LAMB, *Miscellaneous data on materials for millimetre and submillimetre optics*, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 17 (1996), pp. 1997–2034.
- [72] E. LANGENBACH AND F. GERNOT, *Einfluss der Gouy-Phase auf die Ergebnisse von längenmessenden Interferometern*, in *DGaO Proceedings*, 2014.
- [73] Y. LEE, *Principles of Terahertz Science and Technology*, *Lecture Notes in Physics*, Springer US, 2009.
- [74] M.-L. LI, W.-J. GUAN, AND P.-C. LI, *Improved synthetic aperture focusing technique with applications in high-frequency ultrasound imaging*, *Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control*, IEEE Transactions on, 51 (2004), pp. 63–70.
- [75] B. LITTAU, A. IEGORENKOV, S. KREMLING, T. HOCHREIN, AND P. HEIDEMEYER, *Terahertz Synthetic Aperture Radar zur Detektion von Defekten in Kunststoffprodukten*, in *DGZfP-Jahrestagung*, 2015.
- [76] B. LITTAU, J. TEPE, S. KREMLING, T. SCHUSTER, T. HOCHREIN, AND P. HEIDEMEYER, *Tomografische Bildgebung mit vollelektronischen Terahertz-Systemen zur Prüfung von Kunststoff-Bauteilen*, in *DGZfP-Jahrestagung*, 2015.
- [77] B. LITTAU, J. TEPE, G. SCHOBER, S. KREMLING, T. HOCHREIN, P. HEIDEMEYER, T. SCHUSTER, AND M. BASTIAN, *Entwicklung und Evaluierung der Potenziale von Terahertz-Tomografie-Systemen*, SKZ – Das Kunststoff-Zentrum, FSKZ e. V., Würzburg, Shaker Verlag, 2016.
- [78] A. K. LOUIS, *Inverse und schlecht gestellte Probleme*, Teubner Studienbücher Mathematik, Vieweg+Teubner Verlag, 1989.
- [79] A. K. LOUIS, *Combining Image Reconstruction and Image Analysis with an Application to Two-Dimensional Tomography*, *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 1 (2008), pp. 188–208.
- [80] —, *Feature reconstruction in inverse problems*, *Inverse Problems*, 27, 065010 (2011).
- [81] D. MESCHEDE, *Optik, Licht und Laser*, Teubner Studienbücher, Vieweg+Teubner Verlag, 2008.
- [82] F. MINOLTS, S. KREMLING, D. STICH, P. HEIDEMEYER, M. BASTIAN, AND T. HOCHREIN, *3D-Prüfung von Faserverbundwerkstoffen mittels vollelektronischer Terahertz-Systeme*, in *DGZfP-Jahrestagung*, 2014.

- [83] S. MUKHERJEE, J. FEDERICI, P. LOPES, AND M. CABRAL, *Elimination of Fresnel reflection boundary effects and beam steering in pulsed terahertz computed tomography*, *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 34 (2013), pp. 539–555.
- [84] F. NATTERER, *The Mathematics of Computerized Tomography*, *Classics in Applied Mathematics*, John Wiley & Sons Ltd and B. G. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [85] F. NATTERER AND F. WÜBBELING, *Mathematical methods in image reconstruction*, SIAM, Philadelphia, 2001.
- [86] K. L. NGUYEN, M. L. JOHNS, L. GLADDEN, C. H. WORRALL, P. ALEXANDER, H. E. BEERE, M. PEPPER, D. A. RITCHIE, J. ALTON, S. BARBIERI, AND E. H. LINFIELD, *Three-dimensional imaging with a terahertz quantum cascade laser*, *Opt. Express*, 14 (2006), pp. 2123–2129.
- [87] K. K. NIELSEN, *Block Algebraic Methods for 3D Image Reconstructions on GPUs*, Master's thesis, Technical University of Denmark, 2014.
- [88] J. PEARCE, H. CHOI, D. MITTLEMAN, J. WHITE, AND D. ZIMDARS, *Terahertz wide aperture reflection tomography*, *Optics Letters*, 30 (2005), pp. 1653–1655.
- [89] K.-E. PEIPONEN, A. ZEITLER, AND M. KUWATA-GONOKAMI, *Terahertz Spectroscopy and Imaging*, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [90] T. PFITZENREITER AND T. SCHUSTER, *Tomographic Reconstruction of the Curl and Divergence of 2D Vector Fields Taking Refractions into Account*, *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 4 (2011), pp. 40–56.
- [91] E. PICKWELL, B. E. COLE, A. J. FITZGERALD, M. PEPPER, AND V. P. WALLACE, *In vivo study of human skin using pulsed terahertz radiation*, *Physics in Medicine and Biology*, 49 (2004), p. 1595.
- [92] R. PIESIEWICZ, C. JANSEN, S. WIETZKE, D. MITTLEMAN, M. KOCH, AND T. KÜRNER, *Properties of building and plastic materials in the THz range*, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 28 (2007), pp. 363–371.
- [93] R. PIESIEWICZ, T. KLEINE-OSTMANN, N. KRUMBHOLZ, D. MITTLEMAN, M. KOCH, J. SCHOEBEL, AND T. KURNER, *Short-range ultra-broadband terahertz communications: Concepts and perspectives*, *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 49 (2007), pp. 24–39.
- [94] B. RECUR, J. P. GUILLET, I. MANEK-HÖNNINGER, J. C. DELAGNES, W. BENHARBONE, P. DESBARATS, J. P. DOMENGER, L. CANIONI, AND P. MOUNAIX, *Propagation beam consideration for 3D THz computed tomography*, *Opt. Express*, 20 (2012), pp. 5817–5829.
- [95] A. REDO-SANCHEZ, B. HESHMAT, A. AGHASI, S. NAQVI, M. ZHANG, J. ROMBERG, AND R. RASKAR, *Terahertz time-gated spectral imaging for content extraction through layered structures*, *Nat Commun*, (2016).

- [96] A. RIEDER, *Keine Probleme mit Inversen Problemen*, Vieweg+Teubner, 2003.
- [97] A. ROSTAMI, H. RASOOLI, AND H. BAGHBAN, *Terahertz Technology*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [98] H. SCHOMBERG, *An improved approach to reconstructive ultrasound tomography*, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 11 (1978), pp. L181–L185.
- [99] S. SCHOT, *Eighty Years of Sommerfeld’s Radiation Condition*, *Historia Mathematica*, 4 (1992), pp. 385–401.
- [100] U. SCHRÖDER AND T. SCHUSTER, *An iterative method to reconstruct the refractive index of a medium from time-of-flight measurements*, *Inverse Problems*, 32, 085009 (2016).
- [101] K. J. SIEBERT, T. LÖFFLER, H. QUAST, M. THOMSON, T. BAUER, R. LEONHARDT, S. CZASCH, AND H. G. ROSKOS, *All-optoelectronic continuous wave THz imaging for biomedical applications*, *Physics in Medicine and Biology*, 47 (2002), pp. 3743–3748.
- [102] P. H. SIEGEL, *Terahertz technology in biology and medicine*, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 52 (2004), pp. 2438–2447.
- [103] A. SMITH, M. GOLDBERG, AND E. LIU, *Numerical ray tracing in media involving continuous and discrete refractive boundaries*, *Ultrasonic Imaging*, 2 (1980), pp. 291–301.
- [104] H. H. B. SØRENSEN AND P. C. HANSEN, *Multicore performance of block algebraic iterative reconstruction methods*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 36 (2014), pp. C524–C546.
- [105] G. STEWART, *Introduction to matrix computations*, *Computer science and applied mathematics*, Academic Press, 1973.
- [106] G. STEWART AND J.-G. SUN, *Matrix Perturbation Theory*, *Computer science and scientific computing*, Academic Press, 1990.
- [107] K. TANABE, *Projection method for solving a singular system of linear equations and its applications*, *Numerische Mathematik*, 17 (1971), pp. 203–214.
- [108] J. TEPE, T. SCHUSTER, AND B. LITTAU, *A modified algebraic reconstruction technique taking refraction into account with an application in terahertz tomography*, *Inverse Problems in Science and Engineering*, (in press).
- [109] M. THEUER, D. MOLTER, M. RAHM, AND R. BEIGANG, *Zwischen Mikrowellen und Infrarot. Terahertz-Wellen*, *Physik in unserer Zeit*, 40 (2009), pp. 296–302.
- [110] W. R. TRIBE, D. A. NEWNHAM, P. F. TADAY, AND M. C. KEMP, *Hidden object detection: security applications of terahertz technology*, 2004.

-
- [111] G. C. TRICHOPOULOS AND K. SERTEL, *Broadband Terahertz Computed Tomography Using a 5k-pixel Real-time THz Camera*, *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 36 (2015), pp. 675–686.
- [112] S. R. TRIPATHI, Y. SUGIYAMA, K. MURATE, K. IMAYAMA, AND K. KAWASE, *Terahertz wave three-dimensional computed tomography based on injection-seeded terahertz wave parametric emitter and detector*, *Opt. Express*, 24 (2016), pp. 6433–6440.
- [113] A. WALD AND T. SCHUSTER, *Sequential subspace optimization for nonlinear inverse problems*, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, (2016).
- [114] V. WALLACE, A. FITZGERALD, S. SHANKAR, N. FLANAGAN, R. PYE, J. CLUFF, AND D. ARNONE, *Terahertz pulsed imaging of basal cell carcinoma ex vivo and in vivo*, *British Journal of Dermatology*, 151 (2004), pp. 424–432.
- [115] S. WANG AND X.-C. ZHANG, *Pulsed terahertz tomography*, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 37 (2004), pp. R1–R36.
- [116] P.-Å. WEDIN, *Perturbation theory for pseudo-inverses*, *BIT Numerical Mathematics*, 13 (1973), pp. 217–232.
- [117] S. WIETZKE, C. JANSEN, M. SCHELLER, N. KRUMBHOLZ, O. PETERS, C. JÖRDENS, T. HOCHREIN, T. JUNG, S. CHATTERJEE, AND M. KOCH, *Anwendungen für Terahertz-Systeme: Märkte und Perspektiven einer innovativen Technik*, *Chemie-Ingenieur-Technik*, 82 (2010), pp. 467–476.
- [118] S. WIETZKE, F. RUTZ, AND M. KOCH, *Der Terahertz-Blick*, *Kunststoffe International*, 97 (2007), pp. 31–34.
- [119] C. YU, S. FAN, Y. SUN, AND E. PICKWELL-MACPHERSON, *The potential of terahertz imaging for cancer diagnosis: A review of investigations to date*, *Quantitative Imaging in Medicine and Surgery*, 2 (2012).
- [120] X.-C. ZHANG AND J. XU, *Introduction to THz Wave Photonics*, Springer US, 2010.
- [121] Z. ZHANG AND T. BUMA, *Adaptive terahertz imaging using a virtual transceiver and coherence weighting*, *Opt. Express*, 17 (2009), pp. 17812–17817.