

Inverse Probleme mit Poisson Daten: Verallgemeinerte Tikhonov-Regularisierung und iterativ regularisierte Newton-Methoden

(Inverse problems with Poisson data: Tikhonov-type regularization and iteratively regularized Newton methods)

Frank Werner

Disputationsvortrag



Übersicht

- ① Einleitung
- ② Ergebnisse
- ③ Hilfsresultate
- ④ Numerische Simulationen
- ⑤ Fazit

Übersicht

- 1 Einleitung
- 2 Ergebnisse
- 3 Hilfsresultate
- 4 Numerische Simulationen
- 5 Fazit

Problemstellung

Gegeben: Anzahl N und Positionen $x_i \in \Omega$ beobachteter Photonen, die gemäß einer unbekannten Photonendichte $g^\dagger$ verteilt sind.

Gesucht: Ursache $u^\dagger$ für die Photonendichte $g^\dagger$.

Die Anzahl N der beobachteten Photonen hängt von der Intensität von $g^\dagger$ sowie einem Parameter t ab, welcher oft als **Belichtungszeit** interpretiert werden kann.

Poisson Prozesse

Mathematische Beschreibung:

Poisson Prozess, d.h.

$$G_t = \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$$

mit folgenden Eigenschaften:

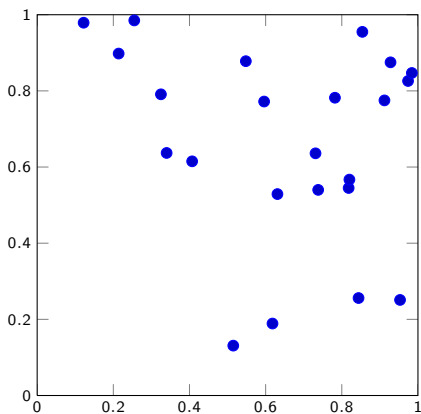


Abbildung: Simulierter Poisson Prozess

Poisson Prozesse - Definierende Eigenschaften I

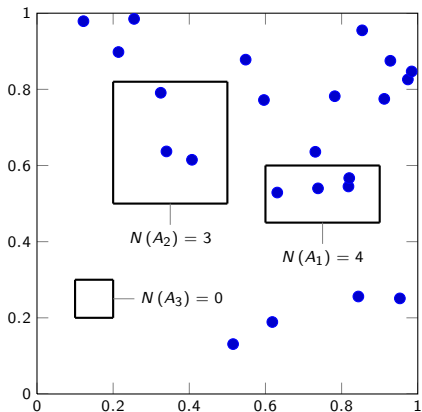
$$N(A) := \# \{i \in \{1, \dots, N\} \mid x_i \in A\}$$

Unabhängigkeit:

Für $A_1, \dots, A_n \subset \Omega$ disjunkt,
messbar sind

$$N(A_1), \dots, N(A_n)$$

unabhängig.



Poisson Prozesse - Definierende Eigenschaften II

$$N(A) := \# \{i \in \{1, \dots, N\} \mid x_i \in A\}$$

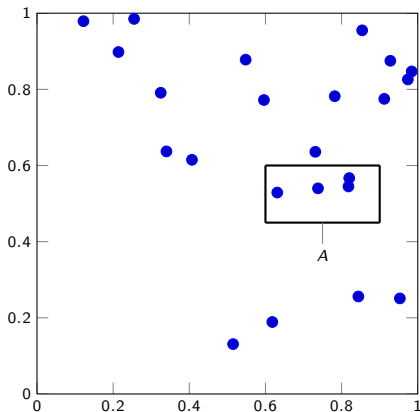
Poisson Verteilung:

Für $A \subset \Omega$ messbar ist

$$N(A)$$

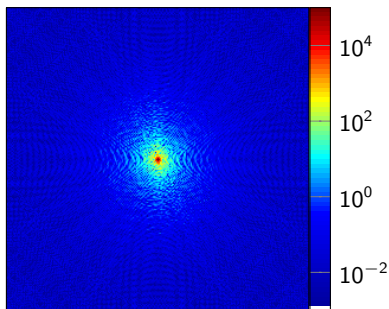
Poisson verteilt mit Parameter

$$t \int_A g^\dagger dx.$$



Rolle des Parameters t

Logarithmische Plots simulierter und exakter Daten:



(a) Simulierte Daten; in jedem Zeitschritt sind 10^4 Photonen zu erwarten.

(b) Exakte Daten; Gesamtintensität 10^6

Auftretende Probleme I

Viele Anwendungen liefern nur Daten für kleines t , z.B.

- Positronen-Emissions-Tomographie (Strahlenexposition des Patienten)
- astronomische Bildgebung (endliche Beobachtungszeit)
- Fluoreszenzmikroskopie (Photobleaching)

⇒ negativer log-likelihood Ansatz um die Information über die Poisson-Verteilung der Daten zu nutzen!

Minimiere

$$u \mapsto \mathcal{S}(F(u); G_t) := -\ln(\mathcal{P}(G_t \mid \text{die exakte Photonendichte ist } F(u)))$$

über alle zulässigen u .

Auftretende Probleme II

Modellannahme: Die Interaktion der Photonen mit $u^\dagger$ kann als Operatorgleichung beschrieben werden, d.h.

$$F(u^\dagger) = g^\dagger$$

mit i.A. nicht-linearem $F : \mathfrak{B} \subset \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ und Banachräumen $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$.

Die exakte rechte Seite $g^\dagger$ ist unbekannt und in den meisten Anwendungen ist F^{-1} unstetig.

$\Rightarrow$ keine direkte Rekonstruktion möglich, Regularisierung notwendig!

Problemstellung

Bestimme Approximation $u_* \in \mathfrak{B}$ von $u^\dagger$ so, dass

$$F(u_*) \approx G_t.$$

Es handelt sich um ein evtl. nicht-lineares,
schlecht gestelltes inverses Problem mit Poisson Daten.



A. ANTONIADIS AND J. BIGOT.

Poisson inverse problems.

Ann. Statist., 34(5):2132–2158, 2006.



J. M. BARDSLEY.

A Theoretical Framework for the Regularization of Poisson Likelihood Estimation Problems.

Inverse Probl. Imag., 4:11–17, 2010.

Kombinierte Lösungsansätze

- Verallgemeinerte Tikhonov-Regularisierung:

Direktes Vergleichen mit den Daten, d.h.

$$u_\alpha \in \operatorname{argmin}_{u \in \mathfrak{B}} [\mathcal{S}(F(u); G_t) + \alpha \mathcal{R}(u)]$$

mit Strafterm $\mathcal{R}$ und Regularisierungsparameter $\alpha > 0$.

- iterativ regularisierte Newton-Methode:

Zunächst Linearisieren, dann Vergleichen, d.h.

$$u_{n+1} \in \operatorname{argmin}_{u \in \mathfrak{B}} [\mathcal{S}(F(u_n) + F'[u_n](u - u_n); G_t) + \alpha_n \mathcal{R}(u)]$$

mit Strafterm $\mathcal{R}$ und Regularisierungsparametern $\alpha_n \searrow 0$ für $n \rightarrow \infty$.

Literatur

- Verallgemeinerte Tikhonov-Regularisierung mit linearem Operator (deterministisch):



M. BENNING AND M. BURGER.

Error estimates for general fidelities.

Electronic Transactions on Numerical Analysis, 38:44–68, 2011.

- Verallgemeinerte Tikhonov-Regularisierung mit nicht-linearem Operator (deterministisch):



J. FLEMMING.

Theory and examples of variational regularisation with non-metric fitting functionals.

J. Inverse Ill-Posed. P., 18(6):677–699, 2010.

- Iterativ regularisierte Gauss-Newton-Methode mit **additivem** stochastischem Datenfehler:



F. BAUER, T. HOHAGE AND A. MUNK.

Iteratively regularized Gauss-Newton method for nonlinear inverse problems with random noise.

SIAM J. Numer. Anal., 47(3):1827–1846, 2009.

Übersicht

- 1 Einleitung
- 2 Ergebnisse**
- 3 Hilfsresultate
- 4 Numerische Simulationen
- 5 Fazit

Datenfehlerfunktional

Daten $G_t = \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$, Poisson verteilt. Negatives log-likelihood Funktional:

$$g \mapsto \int_{\Omega} g \, dx - \frac{1}{t} \int_{\Omega} \ln(g) \, dG_t, \quad g \geq 0 \text{ fast überall}$$

Wir verschieben das negative log-likelihood Funktional um $e > 0$, d.h.

$$\mathcal{S}_{e,t}(g; G_t) = \int_{\Omega} g \, dx - \int_{\Omega} \ln(g + e) \, d\left(\frac{1}{t} G_t + e\right)$$

für $g \geq -\frac{e}{2}$ fast überall und ∞ sonst.

$\rightsquigarrow$ keine Schwierigkeiten mit der Singularität bei 0!

Datenfehlerterm für exakte Daten:

$$\mathbb{KL}_e(g; g^\dagger) = \int_{\Omega} \left[g - g^\dagger - (g^\dagger + e) \ln \left(\frac{g + e}{g^\dagger + e} \right) \right] dx$$

Gütemaß und Quellbedingung

- Wir verwenden die **Bregman Distanz**

$$\mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u^*}(u, u^\dagger) := \mathcal{R}(u) - \mathcal{R}(u^\dagger) - \langle u^*, u - u^\dagger \rangle$$

mit $u^* \in \partial \mathcal{R}(u^\dagger) \subset \mathcal{X}'$ als Fehlermaß.

- Als Quellbedingung nutzen wir eine **Variationsungleichung**

$$\langle u^*, u^\dagger - u \rangle \leq \beta \mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u^*}(u, u^\dagger) + \varphi_{\text{add}} \left(\mathbb{KL}_e(F(u); g^\dagger) \right)$$

für alle $u \in \mathfrak{B}$ mit einer Indexfunktion φ_{add} (d.h. $\varphi_{\text{add}}(0) = 0$, $\varphi_{\text{add}} \nearrow$, φ_{add} stetig) s.d. φ_{add}^2 konkav, $\beta \in [0, 1]$.

Variationsungleichungen

$$\langle u^*, u^\dagger - u \rangle \leq \beta \mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u^*} (u, u^\dagger) + \varphi_{\text{add}} \left(\mathbb{KL}_e \left(F(u); g^\dagger \right) \right)$$



B. HOFMANN, B. KALTENBACHER, C. PÖSCHL, AND O. SCHERZER.

A convergence rates result for Tikhonov regularization in Banach spaces with non-smooth operators.
Inverse Problems, 23(3):987–1010, 2007.

- unabhängig von der Raumstruktur von $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$
- für nicht-lineares F : Kombination aus Quell- und NL-Bedingung

Für $\mathcal{R}(u) = \|u - u_0\|_{\mathcal{X}}^2$ mit Hilberträumen $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$:

- spektrale Quellbedingung + NL-Bedingung impliziert Variationsungl.
- die implizierten Konvergenzraten sind für jedes $u^\dagger$ scharf!



J. FLEMMING, B. HOFMANN AND P. MATHÉ.

Sharp converse results for the regularization error using distance functions.
Inverse Probl., 27(2):025006, 2011.

Konvergenzraten bei bekanntem φ_{add}

Konvergenzraten I

- Annahmen:**
- $\mathfrak{B} \subset \mathcal{X}$ beschränkt, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ beschränkt mit Lipschitzrand, $F : \mathfrak{B} \rightarrow H^s(\Omega)$ beschränkt mit $s > \frac{d}{2}$,
 - Variationsungleichung wie oben, $F(u) \geq 0$ fast überall für alle $u \in \mathfrak{B}$
 - Newton-Methode: F erfüllt eine geeignete Nichtlinearitätsbedingung

Dann erhalten wir mit geeignet gewählten Parametern $\alpha > 0$ und n_* (in Abhängigkeit von t und φ_{add}) für $u_* \in \{u_\alpha, u_{n_*}\}$

$$\mathbf{E} \left(\mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u_*} \left(u_*, u^\dagger \right) \right) = \mathcal{O} \left(\varphi_{\text{add}} \left(\frac{1}{\sqrt{t}} \right) \right), \quad t \rightarrow \infty.$$

Konvergenzraten bei unbekanntem φ_{add}

$\mathcal{X}$ Hilbertraum, $\mathcal{R}(u) = \|u - u_0\|_{\mathcal{X}}^2$.

$$\Phi_{\text{noi}}^{\text{det}}(n) := c_1 \frac{\ln(t)}{\sqrt{t} \sqrt{\alpha_n}},$$

$$N_{\text{max}} := \min \left\{ n \in \mathbb{N} \mid \Phi_{\text{noi}}^{\text{det}}(n) \geq 1 \right\},$$

$$n_{\text{bal}} := \min \left\{ n \in \{1, \dots, N_{\text{max}}\} \mid \forall m \geq n \quad \|u_n - u_m\| \leq c_2 \Phi_{\text{noi}}^{\text{det}}(m) \right\}.$$

Konvergenzraten II

Dann erhalten wir mit geeignetem $c_1 > 0, c_2 > 0$ für $u_* \in \left\{ u_{\alpha_{n_{\text{bal}}}}, u_{n_{\text{bal}}} \right\}$

$$\mathbf{E} \left(\left\| u_* - u^\dagger \right\|_{\mathcal{X}}^2 \right) = \mathcal{O} \left(\ln(t) \varphi_{\text{add}} \left(\frac{1}{\sqrt{t}} \right) \right), \quad t \rightarrow \infty.$$

Übersicht

- 1 Einleitung
- 2 Ergebnisse
- 3 Hilfsresultate**
- 4 Numerische Simulationen
- 5 Fazit

Datenfehler I

Falls $\mathcal{S}$ die r -te Potenz einer Norm ist, so wird üblicherweise

$\|g^{\text{obs}} - g^\dagger\| \leq \delta$ angenommen. Dies impliziert mittels Dreiecksungleichung

$$2^{1-r} \left\| g - g^\dagger \right\|^r - \delta^r \leq \left\| g - g^{\text{obs}} \right\|^r \leq 2^{r-1} \left\| g - g^\dagger \right\|^r + 2^{r-1} \delta^r$$

für alle $g \in \mathcal{Y}$.

Probleme bei Poisson Daten:

- Das negative log-likelihood Funktional erfüllt **keine Dreiecksungleichung**.
- $\mathcal{S}(g; g^{\text{obs}})$ kann ∞ sein, selbst wenn $\mathcal{S}(g; g^\dagger)$ endlich ist und umgekehrt.

Datenfehler II

Falls $\mathcal{S}$ die r -te Potenz einer Norm ist, so wird üblicherweise

$\|g^{\text{obs}} - g^\dagger\| \leq \delta$ angenommen. Dies impliziert mittels Dreiecksungleichung

$$2^{1-r} \left\| g - g^\dagger \right\|^r - \delta^r \leq \left\| g - g^{\text{obs}} \right\|^r \leq 2^{r-1} \left\| g - g^\dagger \right\|^r + 2^{r-1} \delta^r$$

für alle $g \in \mathcal{Y}$.

Verallgemeinerung:

Datenfehler

Es gibt eine Konstante $C_{\text{err}} \geq 1$ und ein Funktional $\text{err} : \mathcal{Y} \rightarrow [0, \infty]$ s.d.

$$\frac{1}{C_{\text{err}}} \mathcal{S}(g; g^\dagger) - \text{err}(g) \leq \mathcal{S}(g; g^{\text{obs}}) \leq C_{\text{err}} \mathcal{S}(g; g^\dagger) + C_{\text{err}} \text{err}(g)$$

für alle $g \in \mathcal{Y}$.

Konvergenzraten und Fehlerzerlegung

Deterministische Konvergenzraten

- Annahmen:
- Variationsungleichung wie oben, $\beta \in [0, \frac{1}{2}]$
 - $\overline{\mathbf{err}} := \sup_{u \in \mathfrak{B}} \mathbf{err}(F(u)) < \infty$

Dann gilt

$$\mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u^*}(u_\alpha, u^\dagger) \leq \Phi_{\text{app}}(\alpha) + \Phi_{\text{noi}}(\alpha)$$

für alle $\alpha > 0$ mit $\Phi_{\text{app}} \searrow 0$, $\Phi_{\text{noi}} \nearrow \infty$ für $\alpha \searrow 0$. Insbesondere für $\alpha \sim 1/\varphi'_{\text{add}}(\overline{\mathbf{err}})$:

$$\mathcal{D}_{\mathcal{R}}^{u^*}(u_\alpha, u^\dagger) = \mathcal{O}(\varphi_{\text{add}}(\overline{\mathbf{err}})), \quad \overline{\mathbf{err}} \searrow 0.$$

Der Datenfehler **err** für Poisson Daten

$$\mathbb{KL}_e(g; g^\dagger) - \mathbf{err}(g) \leq \mathcal{S}_{e,t}(g; G_t) - c \leq \mathbb{KL}_e(g; g^\dagger) + \mathbf{err}(g)$$

Die Fehlerannahme ($C_{\text{err}} = 1$) ist für geeignetes c erfüllt mit

$$\begin{aligned} \mathbf{err}(g) &= \left| \mathcal{S}_{e,t}(g; G_t) - c - \mathbb{KL}_{e,t}(g; g^\dagger) \right| \\ &= \left| \int_{\Omega} \ln(g + e) \left(d\frac{1}{t} G_t - g^\dagger dx \right) \right| \end{aligned}$$

falls $g \geq -\frac{e}{2}$ fast überall.

Konzentrationsungleichung I

Für festes $t > 0$ (Reynaud-Bouret '03)

Für eine abzählbare Familie von Funktionen $\{f_a\}_{a \in A}$ mit Werten in $[-b, b]$ definiere

$$Z := \sup_{a \in A} \left| \int_{\Omega} f_a(x) (dG_t - t g^{\dagger} dx) \right| \quad \text{und} \quad v_0 := t \sup_{a \in A} \int_{\Omega} f_a^2(x) g^{\dagger} dx.$$

Dann gilt für alle $\rho, \varepsilon > 0$:

$$\mathcal{P} \left(Z \geq (1 + \varepsilon) \mathbf{E}(Z) + \sqrt{12 v_0 \rho} + \left(\frac{5}{4} + \frac{32}{\varepsilon} \right) b \rho \right) \leq \exp(-\rho)$$



P. REYNAUD-BOURET.

Adaptive estimation of the intensity of inhomogeneous Poisson processes via concentration inequalities.
Probab. Theory Rel., 126(1):103–153, 2003.

Konzentrationsungleichung II

In Abhängigkeit von $t \geq 1$

- Annahmen:
- $\mathfrak{B} \subset \mathcal{X}$ beschränkt,
 - $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ beschränkt mit Lipschitzrand,
 - $F : \mathfrak{B} \rightarrow H^s(\Omega)$ beschränkt mit $s > \frac{d}{2}$,
 - $F(u) \geq 0$ fast überall für alle $u \in \mathfrak{B}$.

Dann: Es existieren Konstanten $C_\rho, C_{\text{conc}} \geq 1$ s.d.

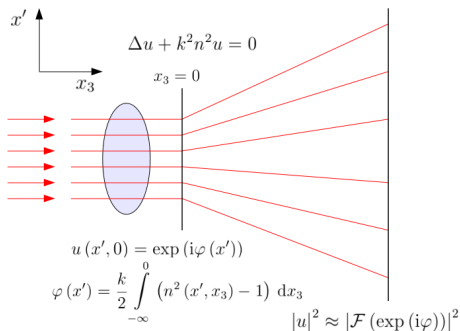
$$\mathcal{P} \left(\sup_{u \in \mathfrak{B}} \text{err}(F(u)) \leq \frac{\rho}{\sqrt{t}} \right) \geq 1 - \exp \left(-\frac{\rho}{C_{\text{conc}}} \right)$$

für alle $t \geq 1, \rho \geq C_\rho$.

Übersicht

- 1 Einleitung
- 2 Ergebnisse
- 3 Hilfsresultate
- 4 Numerische Simulationen**
- 5 Fazit

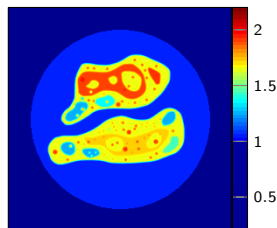
Phasenrekonstruktionsproblem - Formulierung



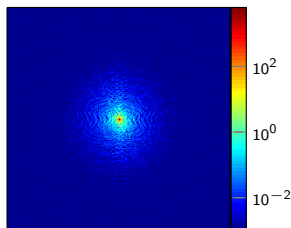
$$F : H^s(B_\rho) \longrightarrow L^\infty([- \kappa, \kappa]^2),$$

$$F(\varphi)(\xi) = \left| \int_{B_\rho} \exp(-i\xi \cdot x') \exp(i\varphi(x')) dx' \right|^2 = |\mathcal{F}_2(\exp(i\varphi))(\xi)|^2.$$

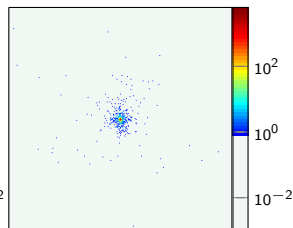
Ergebnisse für $t = 10^4$ erwartete Photonen



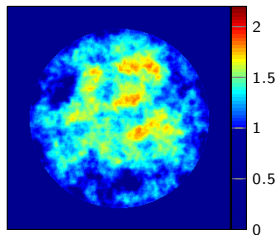
(a) Exakte Lösung



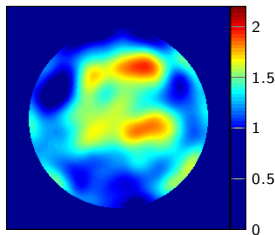
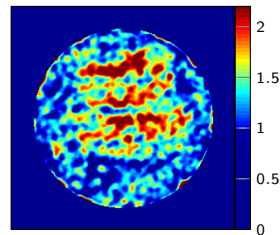
(b) Exakte Daten



(c) Poisson Daten

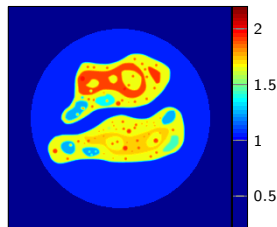


(d) KL-Newton

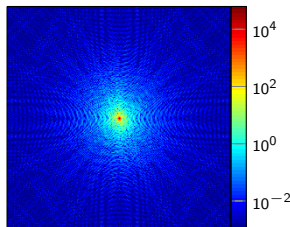
(e) L^2 -IRGNM(f) Gewichtete L^2 -IRGNM

K. GIEWEKEMEYER ET AL, *Phys. Rev. A*, 83:023804, 2011.

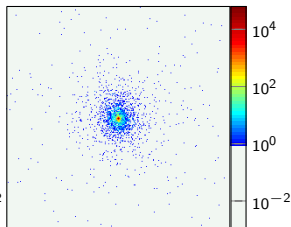
Ergebnisse für $t = 10^5$ erwartete Photonen



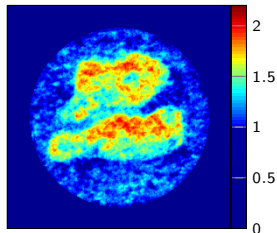
(a) Exakte Lösung



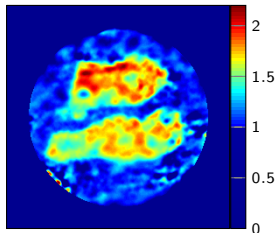
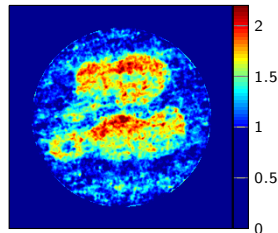
(b) Exakte Daten



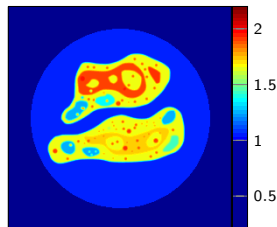
(c) Poisson Daten



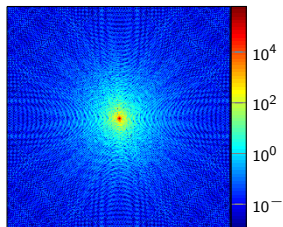
(d) KL-Newton

(e) L^2 -IRGNM(f) Gewichtete L^2 -IRGNM

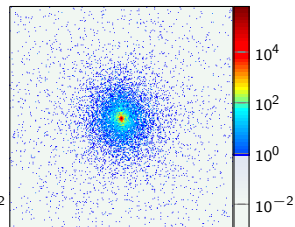
Ergebnisse für $t = 10^6$ erwartete Photonen



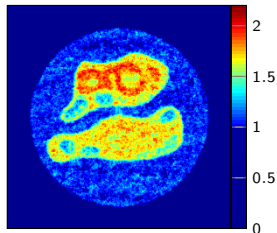
(a) Exakte Lösung



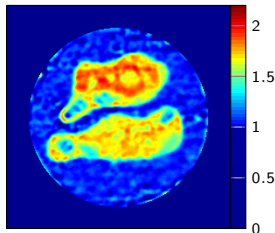
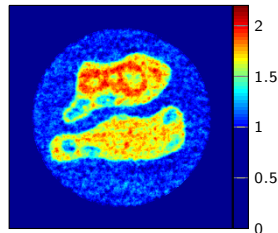
(b) Exakte Daten



(c) Poisson Daten



(d) KL-Newton

(e) L^2 -IRGNM(f) Gewichtete L^2 -IRGNM

Inverses Streuproblem - Formulierung

- Ziel: Rekonstruktion eines Gebietsrandes ∂D
- Parametrisierung:

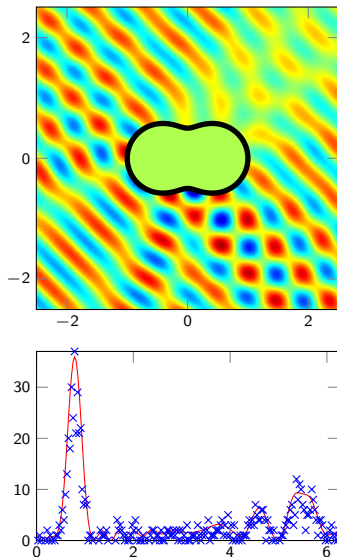
$$\partial D = \{q(x)x \mid x \in S^1\}$$

- Daten: Betragsquadrat $|u_\infty|^2$ des Fernfeldes

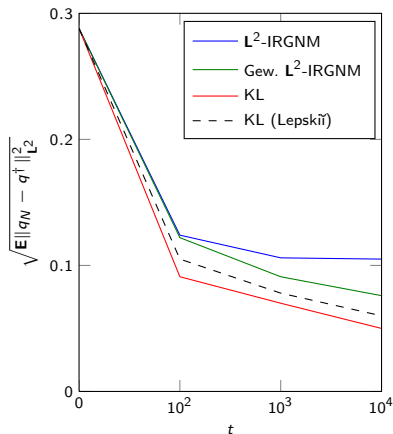
Betrachte den Operator

$$F : H^s(S^1) \rightarrow \mathbf{L}^\infty([0, 2\pi]),$$

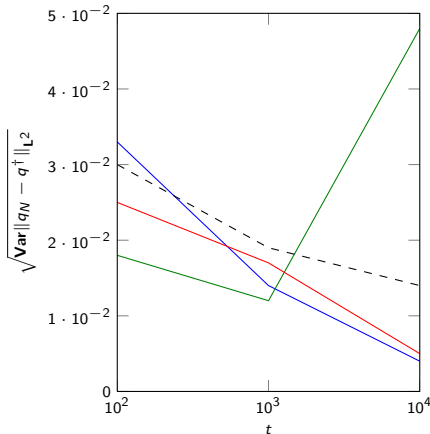
$$q \mapsto |u_\infty|^2.$$



Empirische Erwartungswerte und Varianzen



(a) empirische Erwartungswerte



(b) empirische Varianzen

Durchgängige Linien: $N = \operatorname{argmin}_n \mathbf{E} \|q_n - q^\dagger\|_{L^2}^2$.

Übersicht

- 1 Einleitung
- 2 Ergebnisse
- 3 Hilfsresultate
- 4 Numerische Simulationen
- 5 Fazit**

Fazit

- Weiterentwicklung der Theorie für inverse Probleme mit Poisson Daten:
 - Konvergenz und Konvergenzraten
 - Allgemeine Quellbedingungen
 - A priori und a posteriori Parameterwahl
- Theorie für Regularisierung mit allgemeinem Datenfehlerterm
- Vorteile der Likelihood-Methode bei numerischen Simulationen