

Level-Set Methoden für Inverse Probleme

Seminar Level-Set Methoden, SS 2007 bei Prof. Dr. Martin Burger

Thomas Pelster

Andree Große

12. Juli 2007



Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
1.1	Level-Set Methoden	2
1.2	Inverse Probleme	2
1.3	Beispiele	2
2	Level-Set Methoden und Formberechnung	4
2.1	Formableitung	4
3	Formoptimierung	7
3.1	Level-Set-basierte Formoptimierung	7
3.2	Gradientenverfahren	7
3.3	Newton-ähnliche Verfahren	13
3.4	Gauß-Newton Verfahren für kleinste-Quadrate-Methode	14
4	Erweiterungen für spezielle Eigenschaften	15
A	Anhang	17
A.1	Literaturverzeichnis	17

1 Einführung

1.1 Level-Set Methoden

Level-Set Methoden

- Level-Set Methoden stellen einen generellen Rahmen zur Berechnung von sich entwickelnden Formen dar
- Die Idee ist, eine Folge von Formen $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}^+$ durch

$$\Omega(t) = \{x \in \mathbb{R}^d | \phi(x, t) < 0\}$$

zu beschreiben

- Diese Darstellung eignet sich besonders, um topologische Veränderungen zu handhaben

1.2 Inverse Probleme

Inverse Probleme

- **Ziel:** Ziehe aus gemessenen Daten Rückschlüsse auf die Ursache dieser Daten
- Es ist nicht die Lösung einer Gleichung gesucht, sondern man will mit Hilfe der bekannten Lösung Informationen über eine andere Unbekannte bekommen.
- Beispiele (siehe Abb. 1):
 - **Radar, Seismologie:** Erkennung eines unbekanntes Objektes aus Daten über reflektierte Schall- oder Radarwellen
 - **Computertomographie:** Versuche, die Struktur im Inneren eines Körpers zu bestimmen, indem Strahlen durch den Körper gesendet und an der Oberfläche gemessen werden.
 - **Designoptimierung:** Versuche eine Struktur zu finden, sodass ein gewünschter Effekt auftritt (d.h. bestimmte Daten, zum Beispiel am Rand eines Gebietes, werden nicht gemessen sondern vorgegeben).

1.3 Beispiele

Beispielproblem 1: Erkennung von Einschlüssen

- **Problem:** Finde Einschlüsse oder Hohlräume in elastischen Materialien, d.h. finde ein Gebiet $\Omega \subset D$ (vgl. Abb. 2).
- Dazu werden Messungen $f_k = u_k|_M, M \subset \partial D$ für verschiedene Belastungen g_k durchgeführt ($k = 1, \dots, N$), wobei u_k Lösung ist von:

$$(1) \quad \begin{aligned} \Delta u_k &= 0 && \text{in } D \setminus \Omega \\ u_k &= 0 && \text{auf } \Gamma \subset \partial D \\ \frac{\partial u_k}{\partial n} &= g_k && \text{auf } \partial D \setminus \Gamma \\ \frac{\partial u_k}{\partial n} &= 0 && \text{auf } \partial \Omega \end{aligned}$$

- Das Inverse Problem entspricht Minimierung von

$$J(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_M |u_k - f_k|^2 d\mathcal{H}^{d-1}$$

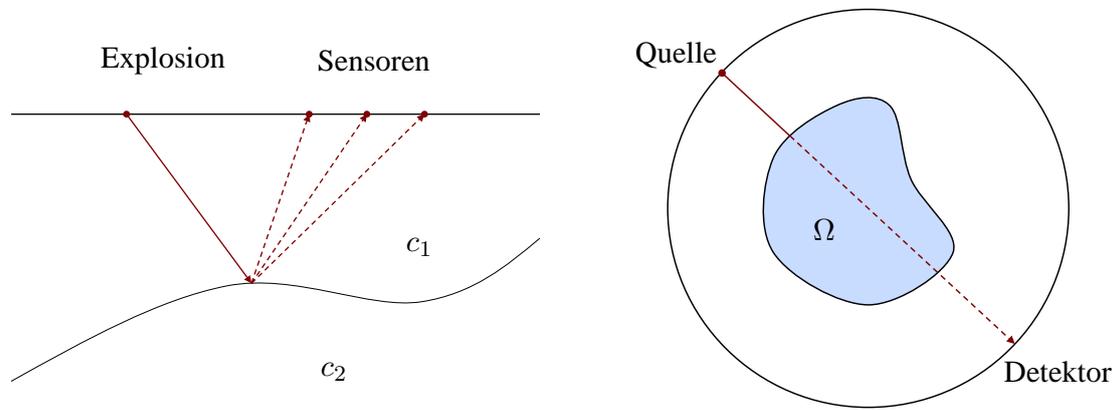


Abbildung 1: links: Seismologie, rechts: Computertomographie

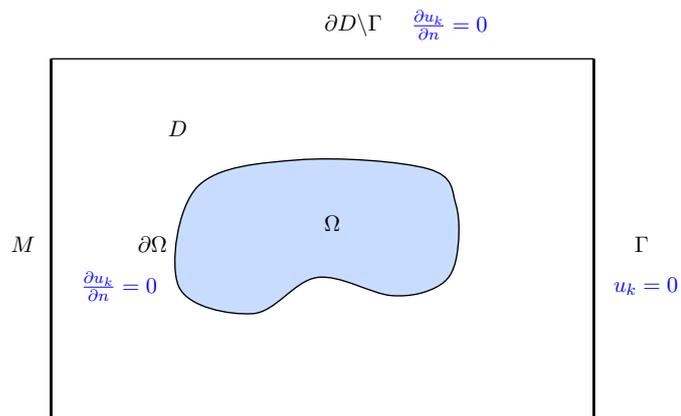


Abbildung 2: Beispielproblem 1: Erkennung von Einschlüssen

Beispielproblem 2: Bandstruktur-Design

- Eine wichtige Klasse von Problemen ist die Minimierung von Eigenwerten:

$$J(\Omega) = \hat{J}(\Lambda(\Omega))$$

wobei $\Lambda(\Omega) = (\lambda_j(\Omega))_{j \in \mathbb{N}}$ die absteigend geordneten Eigenwerte bezüglich der Helmholtz-Gleichung

$$(2) \quad \begin{aligned} -\Delta u &= \lambda(q_0 + q_1 \chi_\Omega)u && \text{in } D \\ u &= 0 && \text{auf } \partial D \end{aligned}$$

sind.

- Anwendung zum Beispiel: Design von photonischen Kristallen. Bandlücken in photonischen Kristallen sind Strukturen, in denen sich elektromagnetische Wellen gewisser Frequenz nicht ausbreiten. Die Größe der Bandlücke entscheidet im Wesentlichen über die Leitfähigkeit der Kristallstruktur. Ein typisches Ziel ist, für einen gewissen Frequenzbereich eine maximale Bandlücke zu erreichen.
- Mögliche Aufgaben sind die Minimierung oder Maximierung des ersten Eigenwertes ($\hat{J}(\Lambda) = \pm \lambda_1$) oder die Maximierung einer Bandlücke ($\hat{J}(\Lambda) = \lambda_k - \lambda_{k+1}$).

Beispielproblem 3: Rekonstruktion

- **Ziel:** Rekonstruktion eines stückweise konstanten Quellterms in einer partiellen Differentialgleichung, die an der Schnittstelle zweier Gebiete unstetig ist
- Einfachstes Problem: Finde $\Omega \subset D$ mit Messungen $z = u|_M$ für $M \subset D$ oder $M \subset \partial D$, wobei

$$(3) \quad \begin{aligned} -\Delta u - \chi_\Omega &= 0 && \text{in } D \\ u &= 0 && \text{auf } \partial D \end{aligned}$$

- Das Formfunktional sei

$$J(\Omega) = \frac{1}{2} \int_M |u - z|^2 d\mu$$

2 Level-Set Methoden und Formberechnung

2.1 Formableitung

Entwicklung einer Formschar

Für eine gegebene Menge Ω können wir die zeitliche Entwicklung der Mengen $\Omega(t)$ in einem Geschwindigkeitsfeld \mathbf{V} definieren:

$$(4) \quad \Omega(t) = \left\{ y(t) \mid y(0) \in \Omega, \frac{dy}{dt}(\tau) = \mathbf{V}(y(\tau)) \text{ in } (0, t) \right\}$$

Die Formableitung eines Funktionals J in Richtung $\mathbf{V} \in C^{0,1}(\mathbb{R}^d)$ ist dann:

$$dJ(\Omega; \mathbf{V}) = \frac{d}{dt} J(\Omega(t))|_{t=0}$$

Formableitung

Hadamard-Zolésio: Unter gewissen Stetigkeitsvoraussetzungen existiert ein $\nabla J \in C^\infty$, sodass

$$dJ(\Omega; \mathbf{V}) = \langle \nabla J, \mathbf{V}|_{\partial\Omega \cdot n} \rangle$$

d.h. die Formableitung ist ein lineares Funktional von $V_n|_{\partial\Omega}$. Wir schreiben mit $V_n := \mathbf{V} \cdot n$:

$$dJ(\Omega; \mathbf{V}) = J'(\Omega)V_n$$

Es gilt also

$$(5) \quad J'(\phi(\cdot, 0) < 0)V_n = \frac{d}{dt} J(\phi(\cdot, t) < 0)|_{t=0}$$

- Es gibt zwei Grundformen von Formfunktionalen:

- *Gebietsfunktionale* der Form

$$J_{dom}(\Omega) = \int_{\Omega} g \, dx$$

- *Randfunktionale* der Form

$$J_{bd}(\Omega) = \int_{\partial\Omega} g \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

für eine hinreichend glatte Funktion g

Formableitung von Gebietsfunktionalen

Für $g \in W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^d)$ und ein beschränktes messbares Gebiet Ω existiert die Formableitung von J_{dom} und ist gegeben durch

$$dJ_{dom}(\Omega; \mathbf{V}) = \int_{\Omega} \operatorname{div}(g\mathbf{V}) \, dx$$

Falls Ω ein offenes Gebiet mit Lipschitz-Rand ist, dann gilt nach dem Gauß'schen Integralsatz:

$$J'_{dom}(\Omega)V_n = \int_{\partial\Omega} gV_n \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

Formableitung über Level-Set Methoden

Aus (5) können wir die Formableitung direkt aus der Level-Set Methode berechnen. Erinnerung:

$$\Omega(t) = \{x \in \mathbb{R}^d | \phi(x, t) < 0\}$$

und ϕ löst die Level-Set Gleichung

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + V_n |\nabla\phi| = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$$

Sei J z.B. ein Volumenfunktional der Form (H Heaviside-Funktion)

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} g(x) \, dx = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) H(-\phi(x, 0)) \, dx$$

Dann folgt

$$J'(\Omega)V_n = \frac{d}{dt}J(\Omega(t))\Big|_{t=0} = \int_{\{\phi(\cdot,0)=0\}} gV_n d\mathcal{H}^{d-1}$$

Denn mit Hilfe der co-area-Formel

$$(6) \quad \int_{\mathbb{R}^d} A(\phi(x)) B(x) |\nabla\phi(x)| dx = \int_{\mathbb{R}} A(p) \int_{\{\phi=p\}} B(x) ds(x) dp$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}J(\Omega(t)) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^d} g(x) H(-\phi(x,t)) dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}^d} g(x) \delta(-\phi(x,t)) \frac{\partial\phi}{\partial t}(x,t) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} g(x) \delta(-\phi(x,t)) V_n(x) |\nabla\phi(x,t)| dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \delta(p) \int_{\{\phi(\cdot,t)=p\}} g(x) V_n(x) ds(x) dp \\ &= \int_{\{\phi(\cdot,t)=0\}} gV_n d\mathcal{H}^{d-1} \end{aligned}$$

Formableitung von Randfunktionalen

Für $g \in W_{loc}^{2,2}(\mathbb{R}^d)$ und ein beschränktes messbares Gebiet Ω mit $\partial\Omega \in C^2$ existiert die Formableitung von J_{bd} für alle $\mathbf{V} \in C_{loc}^1(\mathbb{R}^d)$ und ist gegeben durch

$$\begin{aligned} dJ_{bd}(\Omega; \mathbf{V}) &= \int_{\partial\Omega} \operatorname{div}(g\mathbf{n}) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\mathcal{H}^{d-1} \\ &= \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + g\kappa \right) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\mathcal{H}^{d-1} \end{aligned}$$

wobei \mathbf{n} die äußere Normale und κ die Krümmung ist. Hier gilt:

$$J'_{bd}(\Omega)V_n = \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + g\kappa \right) V_n d\mathcal{H}^{d-1}$$

Dies erhalten wir ähnlich wie im vorigen Fall (siehe [2]):

$$\begin{aligned} J(\Omega(t)) &= \int_{\{\phi(\cdot,t)=0\}} g(x) ds(x) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \delta(p) \int_{\{\phi(\cdot,t)=p\}} g(x) ds(x) dp \\ &= - \int_{\mathbb{R}^d} g(x) \delta(\phi(x,t)) |\nabla\phi(x,t)| dx \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} J(\Omega(t)) &= \int_{\mathbb{R}^d} g \left(\delta'(\phi) |\nabla\phi| \phi_t + \delta(\phi) \frac{\nabla\phi \nabla\phi_t}{|\nabla\phi|} \right) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} g \left(\frac{\nabla\delta(\phi) \nabla\phi}{|\nabla\phi|} \phi_t + \delta(\phi) \frac{\nabla\phi \nabla\phi_t}{|\nabla\phi|} \right) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \delta(\phi) \left(-\operatorname{div} \left(g \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \phi_t \right) + g \frac{\nabla\phi \nabla\phi_t}{|\nabla\phi|} \right) dx \\
&= - \int_{\mathbb{R}^d} \delta(\phi) \left(\frac{\nabla g \nabla\phi}{|\nabla\phi|} \phi_t + g \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \right) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \delta(\phi) |\nabla\phi| V_n \left(\nabla g \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} + g \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \right) dx \\
&= \int_{\{\phi(\cdot, t)=0\}} V_n \left(\nabla g \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} + g \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \right) ds \\
&= \int_{\partial\Omega(t)} V_n \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + g \kappa \right) ds
\end{aligned}$$

wobei n die äußere Normale und $\kappa = \operatorname{div}(n)$ die Krümmung ist. Also haben wir

$$J'_{bd}(\Omega) V_n = \left. \frac{d}{dt} J(\Omega(t)) \right|_{t=0} = \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + g \kappa \right) V_n d\mathcal{H}^{d-1}$$

3 Formoptimierung

3.1 Level-Set-basierte Formoptimierung

Level-Set-basierte Formoptimierung

1. Die zu optimierende Form wird als Nullstellenmenge einer stetigen Funktion ϕ repräsentiert.
2. Wähle ein Formfunktional $J(\Omega(t))$ und berechne $dJ(\Omega(t); \mathbf{V})$
3. Berechne hieraus eine Geschwindigkeit V_n , sodass $dJ(\Omega(t); \mathbf{V}) < 0$
4. Führe mit diesem V_n einen Iterationsschritt aus, d.h. überführe Ω_k nach Ω_{k+1} (Diskretisierung von (4)).
5. Durch Iteration der letzten beiden Punkte wird $J(\Omega(t))$ minimiert, d.h. die Form $\Omega(t)$ entwickelt sich zur optimalen Form. V_n entspricht also etwa der Suchrichtung bei klassischen Optimierungsproblemen in Vektorräumen.

Für Beispiele siehe z.B. [1].

3.2 Gradientenverfahren

Gradientenverfahren

- Gradientenabstiegsverfahren (vgl. [5]) für Level-Set Methoden funktionieren analog zu Gradientenverfahren in klassischen Optimierungsproblemen.

- **Problem:** Verhältnis von Schrittweite zum Gradienten (d.h. der Formableitung), da es keine zugrundeliegende Vektorraumstruktur gibt
- Als ersten Ansatz betrachten wir Probleme der Form

$$(7) \quad J'(\Omega)V_n = \int_{\partial\Omega} V_n \rho_\Omega \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

für eine Dichtefunktion ρ_Ω

- Hier können wir

$$V_n(\cdot, t) = -\rho_{\Omega(t)} \quad \text{auf } \partial\Omega$$

wählen und erhalten

$$\frac{d}{dt} J(\Omega(t)) = J'(\Omega(t))V_n(\cdot, t) = - \int_{\partial\Omega} |\rho_{\Omega(t)}|^2 \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

Verallgemeinerung des Gradientenverfahren

- Da $J'(\Omega)$ ein lineares Funktional von V_n ist, ist die Darstellung (7) nach dem Riesz'schen Darstellungssatz möglich, falls $J'(\Omega)$ ein lineares stetiges Funktional auf $L^2(\partial\Omega)$ ist.
- Ist dies nicht der Fall, so wähle einen Hilbertraum $\mathcal{V}(\Omega)$, auf dem $J'(\Omega)$ ein lineares stetiges Funktional ist
- Anstelle von (7) benutzen wir nun die schwache Form

$$(8) \quad -J'(\Omega(t))W_n = \langle V_n(\cdot, t), W_n \rangle_{\mathcal{V}(\Omega(t))} \quad \forall W_n \in \mathcal{V}(\Omega(t))$$

Beispielproblem 1 - Fortsetzung

Beispielproblem 1 - Erkennung von Einschlüssen

Das Formfunktional für Beispielproblem 1 lautete

$$(9) \quad J(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_M |u_k - f_k|^2 \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

Dafür definieren wir die Lösung w_k des adjungierten Problems

$$\begin{aligned} \Delta w_k &= 0 && \text{in } D \setminus \Omega \\ w_k &= 0 && \text{auf } \Gamma \subset \partial D \\ \frac{\partial w_k}{\partial n} - \chi_M(u_k - f_k) &= 0 && \text{auf } \partial D \setminus \Gamma \\ \frac{\partial w_k}{\partial n} &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

mit der Indikatorfunktion χ_M .

Nun können wir die Formableitung von (9) berechnen:

$$\begin{aligned}
dJ(\Omega; \mathbf{V}) &= \left. \frac{d}{dt} J(\Omega(t)) \right|_{t=0} \\
&= \left. \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_M |u_{\Omega(t)} - f_k|^2 d\mathcal{H}^{d-1} \right) \right|_{t=0} \\
&= \sum_{k=1}^N \int_M (u_{\Omega(t)} - f_k) u'_{\Omega(t)} d\mathcal{H}^{d-1} \Big|_{t=0} \\
&= \sum_{k=1}^N \int_M \frac{\partial w_k}{\partial n} u'_{\Omega(t)} d\mathcal{H}^{d-1} \Big|_{t=0} \\
&\stackrel{(\frac{\partial w_k}{\partial n} = 0 \text{ auf } \partial D \setminus (\Gamma \cup M))}{=} \sum_{k=1}^N \int_{\partial D \setminus \Gamma} \frac{\partial w_k}{\partial n} u'_{\Omega(0)} d\mathcal{H}^{d-1} \\
&\stackrel{(u=0 \text{ auf } \Gamma \Rightarrow u'=0 \text{ auf } \Gamma)}{=} \sum_{k=1}^N \int_{\partial D} \frac{\partial w_k}{\partial n} u'_{\Omega(0)} d\mathcal{H}^{d-1} \\
&\stackrel{(\text{Gau\ss})}{=} \sum_{k=1}^N \int_D \nabla \cdot (\nabla w_k u'_{\Omega(0)}) dx \\
&= \sum_{k=1}^N \int_{D \setminus \Omega} (\nabla \cdot \nabla w_k u'_{\Omega(0)} + \nabla w_k \nabla u'_{\Omega(0)}) dx \\
&\stackrel{(\Delta w_k = 0)}{=} \sum_{k=1}^N \int_{D \setminus \Omega} (\nabla w_k \nabla u'_{\Omega(0)}) dx \\
&\stackrel{(*)}{=} - \sum_{k=1}^N \int_{\partial \Omega} (\nabla u_k \nabla w_k V_n) d\mathcal{H}^{d-1}
\end{aligned}$$

Für (*) betrachten wir die schwache Lösung von (1):

$$\begin{aligned}
&\stackrel{(\text{Green})}{\Leftrightarrow} \int_{D \setminus \Omega} \Delta u_k \varphi dx = \int_{D \setminus \Omega} 0 \cdot \varphi dx \\
&\stackrel{(1)}{\Leftrightarrow} \int_{D \setminus \Omega} \nabla u_k \nabla \varphi dx - \int_{\partial(D \setminus \Omega)} \frac{\partial u_k}{\partial n} \varphi d\mathcal{H}^{d-1} = 0 \\
&\stackrel{\text{Differentiation nach } \Omega}{\Leftrightarrow} \int_{D \setminus \Omega} \nabla u'_k \nabla \varphi dx + \int_{\partial(D \setminus \Omega)} (\nabla u_k \nabla \varphi) V_n d\mathcal{H}^{d-1} = 0 \\
&\stackrel{(\text{Setze } \varphi := w_k)}{\Leftrightarrow} \int_{D \setminus \Omega} \nabla u'_k \nabla w_k dx = - \int_{\partial \Omega} \nabla u_k \nabla w_k V_n d\mathcal{H}^{d-1}
\end{aligned}$$

• Als Formableitung erhalten wir

$$J'(\Omega) V_n = - \sum_{k=1}^N \int_{\partial \Omega} \nabla u_k \cdot \nabla w_k V_n d\mathcal{H}^{d-1}$$

- Aufgrund der homogenen Neumann-Randbedingungen für u_k und w_k auf $\partial\Omega$ vereinfacht sich dies für $d = 2$ zu

$$J'(\Omega)V_n = - \sum_{k=1}^N \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_k}{\partial \tau} \cdot \frac{\partial w_k}{\partial \tau} V_n d\mathcal{H}^1$$

Aus (8) ergibt sich die Gleichung

$$\langle V_n, W_n \rangle_{H^1(D)} = \sum_{k=1}^N \int_{\partial\Omega} \nabla u_k \cdot \nabla w_k W_n d\mathcal{H}^{d-1} \quad \forall W_n \in H_0^1(\Omega)$$

Dies ist die schwache Formulierung von

$$\begin{aligned} -\Delta V_n + V_n &= 0 && \text{in } D \\ V_n &= 0 && \text{auf } \partial D \\ \left[\frac{\partial V_n}{\partial n} \right] - \sum_{k=1}^N \nabla u_k \cdot \nabla w_k &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

wobei $[\cdot]$ der Sprung bei $\partial\Omega$ ist.

Die Geschwindigkeit V_n erhalten wir also, indem wir diese Neumann-Randbedingung zu einer Dirichlet-Bedingung umformen.

Projizierte Gradientenverfahren

Projizierte Gradientenverfahren

- Wir betrachten Bedingungen der Form

$$C(\Omega) = 0$$

für einen Operator C , der in einen Banachraum \mathcal{U} abbildet

- Hierfür können wir ebenfalls eine Formableitung definieren und erhalten daraus ein Projiziertes Gradienten-Verfahren

Optimierung mit Lagrange-Multiplikatoren

Wir wollen

$$(10) \quad \min_x j(x) \quad \text{mit} \quad c(x) = 0$$

lösen. Suche dazu Punkte x , sodass ∇j ein Vielfaches von ∇c für die implizit definierte Funktion $c(x) = 0$ ist (vgl. Abb. 3). Für ein vorerst unbekanntes p definieren wir:

$$\mathcal{L}(x, p) = j(x) + p \cdot c(x)$$

p heißt *Lagrange-Multiplikator* oder auch *duale Variable*. Dann gilt

$$\begin{aligned} \nabla_x \mathcal{L}(x, p) = 0 &\Leftrightarrow \nabla_x j(x) = -p \nabla_x c(x) \\ \nabla_p \mathcal{L}(x, p) = 0 &\Leftrightarrow c(x) = 0 \end{aligned}$$

Um (10) zu lösen suchen wir also Punkte mit

$$\nabla \mathcal{L}(x, p) = 0$$

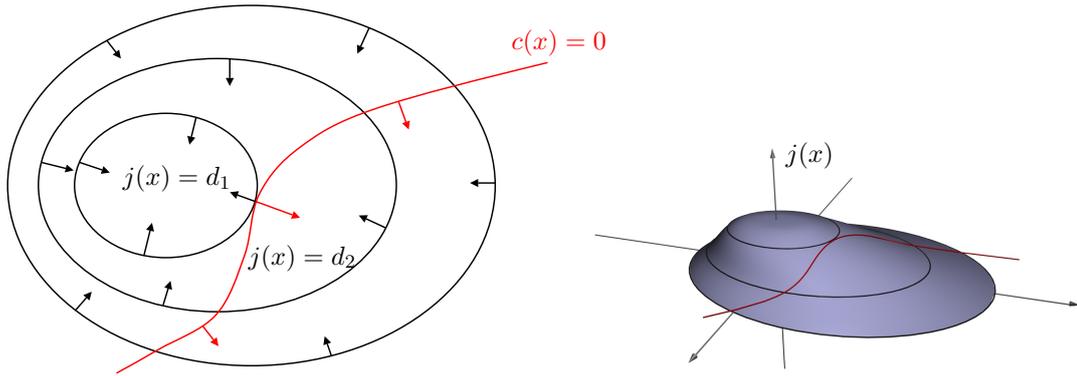


Abbildung 3: Optimierung über die Lagrange-Funktion: Suche Maximum von $j(x)$, indem Punkte auf der Mannigfaltigkeit $c(x) = 0$ gesucht werden, die eine Isokontur $j(x) = d_i$ berühren

Lagrange-Multiplikatoren für Formfunktionale

- Für den Operator $C(D \subset \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{U}$ betrachten wir also

$$\mathcal{L}(\Omega; p) = J(\Omega) + \langle p, C(\Omega) \rangle$$

für die duale Variable $p \in \mathcal{U}^*$

- Die Formableitung der Lagrange-Funktion ist

$$\mathcal{L}'(\Omega; p)V_n = J'(\Omega)V_n + \langle p, C'(\Omega)V_n \rangle$$

und für die Ableitung nach p erhalten wir einfach die Bedingung $C(\Omega) = 0$

- Lösung des Optimierungsproblem ist Sattelpunkt der Lagrange-Funktion \rightarrow führe Gradientenabstieg durch
- Ersetze (8) durch

$$(11) \quad \langle V_n(\cdot, t), W_n \rangle_{\mathcal{V}(\Omega(t))} = -\mathcal{L}'(\Omega(t); p(t)) W_n \quad \forall W_n \in \mathcal{V}(\Omega(t))$$

- Durch diese Gleichung sind V_n und p noch nicht eindeutig bestimmt, daher füge 2. Gleichung hinzu:

$$(12) \quad C'(\Omega(t)) V_n(\cdot, t) = \frac{d}{dt} C(\Omega(t)) = 0$$

- Aus (11) und (12) können wir nun $V_n(\cdot, t)$ und die duale Variable $p(t)$ bestimmen

Wir betrachten als wichtigen Spezialfall die Bedingung, dass die Fläche konstant bleibt, d.h.

$$C(\Omega) = \int_{\Omega} dx - c$$

Hier erhalten wir

$$C'(\Omega)V_n = \int_{\partial\Omega} V_n d\mathcal{H}^{d-1}$$

Sei V_n^0 die Geschwindigkeit, die wir aus (8) (d.h. ohne Beachtung der Volumenbedingung) erhalten würden. Damit $C(\Omega) = 0$ erfüllt bleibt, errechnen wir

$$(13) \quad V_n = V_n^0 - \frac{1}{\mathcal{H}^{d-1}(\partial\Omega)} \int_{\partial\Omega} V_n^0 d\mathcal{H}^{d-1}$$

Beispielproblem 2 - Fortsetzung

Beispielproblem 2 - Bandstruktur-Design

- Betrachte $\hat{J}(\Lambda) = -\lambda_1$, d.h. Maximierung des ersten Eigenvektors
- Die schwache Form der Helmholtzgleichung (2) lautet:

$$(14) \quad \int_D \nabla u_1 \cdot \nabla v dx = \lambda_1 \int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1 v dx$$

- Daraus ergibt sich (für $v = u_1$)

$$\lambda_1 = \frac{\int_D |\nabla u_1|^2 dx}{\int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1^2 dx}$$

u_1 ist hierbei der erste Eigenvektor mit Normierung

$$(15) \quad \int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1^2 dx = 1$$

Daraus können wir die Formableitung berechnen:

$$\begin{aligned} J'(\Omega)V_n &= -\lambda_1'(\Omega)V_n \\ &= -\frac{2 \int_D \nabla u_1 \cdot \nabla u_1' dx}{\int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1^2 dx} \\ &\quad + 2 \frac{\int_D |\nabla u_1|^2 dx}{\left(\int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1^2 dx\right)^2} \int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1 u_1' dx \\ &\quad + q_1 \frac{\int_D |\nabla u_1|^2 dx}{\left(\int_D (q_0 + q_1 \chi_\Omega) u_1^2 dx\right)^2} \int_{\partial\Omega} V_n u_1^2 d\mathcal{H}^{d-1} \end{aligned}$$

wobei u_1' die Ableitung von u_1 nach der Form ist. Mit (14) und (15) sowie $\int_D |\nabla u_1|^2 dx = \lambda_1$ folgt

$$J'(\Omega)V_n = q_1 \int_{\partial\Omega} V_n u_1^2 d\mathcal{H}^{d-1} \int_D |\nabla u_1|^2 dx$$

Für einen L^2 -Gradientenfluss erhalten wir

$$V_n^0 = -q_1 u_1^2 \int_D |\nabla|^2 dx$$

und daraus schließlich mit (13)

$$V_n = -q_1 \int_D |\nabla u_1|^2 dx \left(u_1^2 - \frac{1}{\mathcal{H}^{d-1}(\partial\Omega)} \int_{\partial\Omega} u_1^2 d\mathcal{H}^{d-1} \right)$$

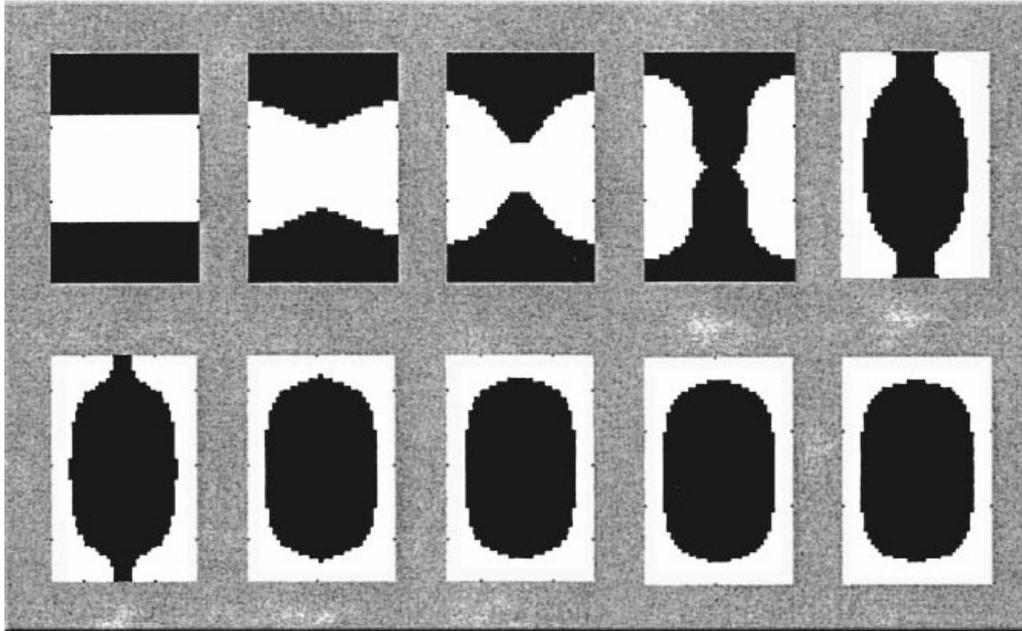


Abbildung 4: Maximierung von λ_1 : Die Dichtefunktion nach verschiedenen Iterationsschritten (aus Os-her & Santosa [4])

3.3 Newton-ähnliche Verfahren

Newton-ähnliche Verfahren

- Für eine Funktion $f(x)$ lautet die Taylor-Entwicklung vom Grad 2:

$$f(x + \epsilon) = f(x) + f'(x)\epsilon + \frac{1}{2}f''(x)\epsilon^2$$

- Analog ist die quadratische Approximation von $J(\Omega)$ bzgl. der Schrittweite, also V_n :

$$J(\Omega) + J'(\Omega)V_n + \frac{1}{2}J''(\Omega)(V_n, V_n)$$

- Dieser Term wird minimal, wenn die Newton Gleichung

$$(16) \quad J''(\Omega)(V_n, W_n) = -J'(\Omega)W_n \quad \forall W_n \in \mathcal{V}(\Omega)$$

erfüllt ist.

- Falls die bilineare Form J'' positiv definit ist erhalten wir hieraus ein V_n , das das Formfunktional J minimiert, da es dann ein $\beta < 0$ gibt, sodass

$$\frac{d}{dt}J(\Omega(t)) V_n = -J''(\Omega)(V_n, V_n) \leq \beta \|V_n\|^2$$

Im Allgemeinen ist $J''(\Omega)$ global nicht positiv definit. In diesem Fall benutzt man als Näherung nur den positiv definiten Teil von $J''(\Omega)$ in Gleichung (16) zur Wahl der Geschwindigkeit V_n .

3.4 Gauß-Newton Verfahren für kleinste-Quadrate-Methode

Gauß-Newton Verfahren für kl.-Quadrate-Methode

- Für Funktionale der Form

$$J(\Omega) = \frac{1}{2} \|\mathcal{F}(\Omega) - z\|^2, \quad \mathcal{F} : \mathcal{K}_{ad} \rightarrow \mathcal{L}$$

(\mathcal{F} nichtlinearer Operator, \mathcal{L} Hilbert-Raum) kann man Gauß-Newton-ähnliche Verfahren wie das Levenberg-Marquardt Verfahren verwenden.

- Die Hauptidee der Gauß-Newton Technik ist eine spezielle sequentielle quadratische Approximation des Funktionals durch Weglassen der zweiten Ableitungen von \mathcal{F} . Somit können Gauß-Newton Verfahren als verkürzte Newton Verfahren interpretiert werden.

- Hierzu bilden wir die ersten beiden Formableitungen von J :

$$\begin{aligned} J'(\Omega)V_n &= \langle \mathcal{F}'(\Omega)V_n, \mathcal{F}(\Omega) - z \rangle \\ J''(\Omega)(V_n, W_n) &= \langle \mathcal{F}'(\Omega)V_n, \mathcal{F}'(\Omega)W_n \rangle \\ &\quad + \langle \mathcal{F}''(\Omega)(V_n, W_n), \mathcal{F}(\Omega) - z \rangle \end{aligned}$$

- Durch Weglassen der 2. Ableitungen von \mathcal{F} in der Newton-Gleichung erhalten wir:

$$(17) \quad \langle \mathcal{F}'(\Omega)V_n, \mathcal{F}'(\Omega)W_n \rangle = - \langle \mathcal{F}'(\Omega)W_n, \mathcal{F}(\Omega) - z \rangle \quad \forall W_n \in \mathcal{V}(\Omega(t))$$

- Um die Iteration zu stabilisieren und um eine schlechte Konditionierung des linearen Systems zu vermeiden fügt man einen zusätzlichen quadratischen Term der Form $\alpha \|V_n\|_{\mathcal{V}(\Omega)}^2$ hinzu. (Levenberg-Marquardt Strategie)

- Dies führt zu dem linearen System

$$(18) \quad \langle \mathcal{F}'(\Omega)V_n, \mathcal{F}'(\Omega)W_n \rangle + \alpha \langle V_n, W_n \rangle_{\mathcal{V}(\Omega)} = - \langle \mathcal{F}'(\Omega)W_n, \mathcal{F}(\Omega) - z \rangle$$

- Für $\alpha > 0$ ist dieses System automatisch gut gestellt und man kann eine absteigende Eigenschaft nachweisen.

Im Allgemeinen können wir davon ausgehen, dass ein Gauß-Newton Verfahren die notwendige Anzahl an Iterationen deutlich reduziert. Allerdings heißt das nicht, dass der gesamte benötigte Rechenaufwand auch reduziert wird, da das Lösen von (17) bzw. (18) aufwendig sein kann. Für spezielle Probleme können z.T. aber effiziente Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems entwickelt werden, mit denen das Gauß-Newton Verfahren deutlich schneller berechnet wird als ein Gradientenverfahren.

Beispielproblem 3 - Fortsetzung

Beispielproblem 3 - Rekonstruktion

- Wir wenden das Levenberg-Marquardt Verfahren nun auf Beispielproblem 3 an.
- Die Ableitung von $\mathcal{F}(\Omega) = u|_M$ bzgl. der Form ist:

$$(19) \quad \mathcal{F}'(\Omega)V_n = u'|_M$$

wobei $u' \in H_0^1(D)$ die schwache Lösung von

$$\int_D \nabla u' \nabla v dx = \int_{\partial\Omega} V_n d\mathcal{H}^{d-1}, \quad \forall v \in H_0^1(D)$$

ist.

Rekonstruktion

- Weiter gilt:

$$(20) \quad \mathcal{F}^{t*}(\Omega)(\mathcal{F}(\Omega) + \mathcal{F}'(\Omega)V_n - z) = w|_{\partial\Omega} \text{ in } L^2(\partial\Omega)$$

wobei w die Lösung des adjungierten Problems ist:

$$\int_D \nabla w \nabla v \, dx = \int_M (u + u' - z)v \, dx \quad \forall v \in H_0^1(D)$$

- So erhalten wir zur Bestimmung der Geschwindigkeit folgende Gleichung:

$$(21) \quad \alpha V_n + w = 0$$

- Aus (19), (20) und (21) kann man nun u' , w und schließlich V_n bestimmen.

4 Erweiterungen für spezielle Eigenschaften

Erhalten der Topologie

Erhalten der Topologie

- In manchen Anwendungen soll die Topologie einer Form erhalten bleiben (z.B. Designoptimierung).
- Dies ist bei Level-Set-Verfahren nicht garantiert.
- Dazu verwenden wir eine variierte Version des Formfunctionals, und zwar für kleine $\epsilon > 0$:

$$J_\epsilon(\Omega) := J(\Omega) + \epsilon H(\Omega)$$

mit

$$H(\Omega) = - \int_{\partial\Omega} (\log [d_\Omega(x + \sigma \nabla d_\Omega(x))] + \log [-d_\Omega(x - \sigma \nabla d_\Omega(x))]) \, d\mathcal{H}^{d-1}$$

Dabei ist d_Ω die *signed distance function* zu $\partial\Omega$, d.h. es ist

$$\begin{aligned} d_\Omega(x) &> 0 && \text{für } x \in \mathbb{R}^d \setminus \Omega \\ d_\Omega(x) &< 0 && \text{für } x \in \Omega \end{aligned}$$

(siehe Abb. 5 und 6)

Bildung von Löchern

Bildung von Löchern

- Z.T. erzeugen Level-Set Methoden nicht genug topologische Änderungen. Z.B. können die vorgestellten Methoden keine ringartigen Strukturen rekonstruieren.
- Zur Erzeugung innerer Löcher können wir topologische Ableitungen verwenden. Diese messen die Änderung des Formfunctionals bzgl. der Bildung von Löchern bzw. Punkten in Ω bzw. $\Omega \setminus D$, im Gegensatz zur Formableitung, welche die Änderung des Formfunctionals bzgl. einer Verschiebung von $\partial\Omega$.

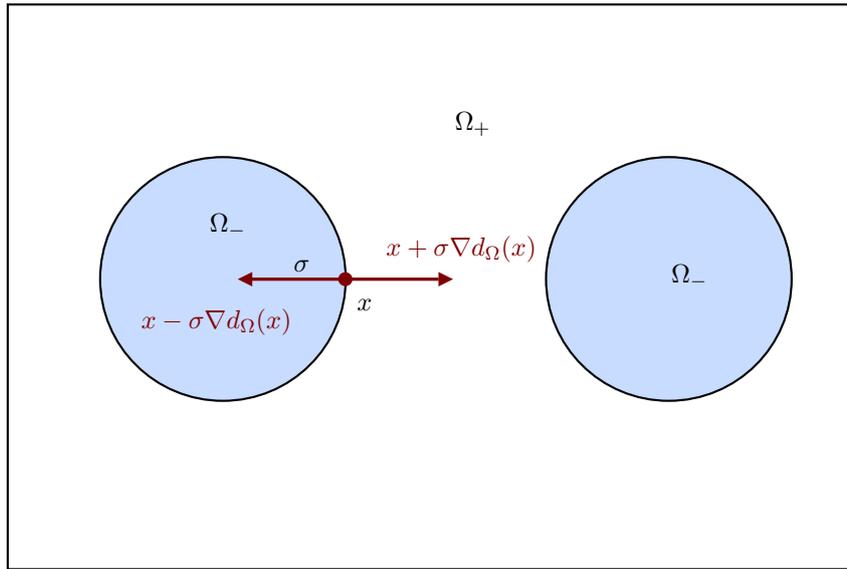


Abbildung 5: $d_\Omega(x + \sigma \nabla d_\Omega(x)) > 0$ und $-d_\Omega(x - \sigma \nabla d_\Omega(x)) > 0$

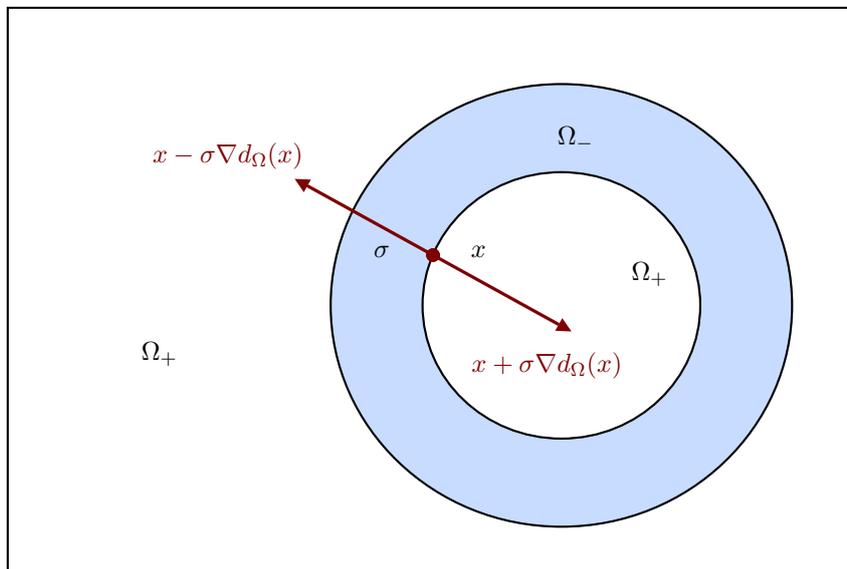


Abbildung 6: $d_\Omega(x + \sigma \nabla d_\Omega(x)) > 0$, aber $-d_\Omega(x - \sigma \nabla d_\Omega(x)) < 0$

- Die topologische Ableitung bzgl. einer Änderung im Punkt $\bar{x} \in D$ sei

$$d_{\mathcal{T}}J(\Omega; \bar{x}) = \begin{cases} \lim_{R \downarrow 0} \frac{J(\Omega \setminus B_R(\bar{x})) - J(\Omega)}{|B_R(\bar{x}) \cap D|} & \text{für } \bar{x} \in \Omega \\ \lim_{R \downarrow 0} \frac{J(\Omega \cup B_R(\bar{x})) - J(\Omega)}{|B_R(\bar{x}) \cap D|} & \text{für } \bar{x} \in D \setminus \Omega \end{cases}$$

falls der Limes existiert. $B_R(x)$ ist die Kugel um x vom Radius R .

- Wir setzen $g(x) := d_{\mathcal{T}}J(\Omega; \bar{x})$. Ist $g(x) < 0$, so wird die Erzeugung eines Lochs das Formfunktional J reduzieren.

Bildung von Löchern

- Nun kann die topologische Ableitung g entweder zur Formableitung J' oder direkt zur Level-Set Gleichung hinzugefügt werden als zusätzliche Bedingung um neue Löcher entstehen zu lassen:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + V_n |\nabla \phi| = -g$$

- In Ω_- gilt:
 - Ist $g(x) < 0$, so sollte an dieser Stelle ein Loch entstehen, d.h. ϕ sollte ansteigen.
 - Ist $g(x) > 0$, so sollte hier kein Loch entstehen.
- In Ω_+ gilt:
 - Ist $g(x) < 0$, so sollte an dieser Stelle ein zusätzliches Gebiet Ω_- entstehen, d.h. ϕ sollte fallen.
 - Ist $g(x) > 0$, so sollte ϕ hier nicht fallen.

A Anhang

A.1 Literaturverzeichnis

Literatur

- [1] ALLAIRE, GRÉGOIRE: *Persönliche Homepage*. <http://www.cmap.polytechnique.fr>, 14. Juni 2007.
- [2] BURGER, MARTIN: *Vorlesungsskript Inverse Probleme*, 2005.
- [3] BURGER, MARTIN UND OSHER, STANLEY J.: *A survey on level set methods for inverse problems and optimal design*. European Jnl of Applied Mathematics, 16:263–301, 2005.
- [4] OSHER, STANLEY J. UND SANTOSA, FADIL: *Level set methods for optimization problems involving geometry and constraints I. Frequencies of a two-density inhomogeneous drum*. Journal of Computational Physics, 171:272–288, 2001.
- [5] SANTOSA, FADIL: *A level-set approach for inverse problems involving obstacles*. ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations, 1:17–33, 1996.