G-CSC Goethe-Center for Scientific Computing der Universität Frankfurt

6. Übung zur Vorlesung
Modellierung und Simulation 3
(WS 2013/14)
Prof. Dr. G. Queisser
Markus Breit, Martin Stepniewski

Abgabe: Dienstag, 14.01.2014, 12:00 Uhr

Aufgaben

Aufgabe 6.1 (3+3+1+1 Punkte) (*Einfache Filter*)
Wir betrachten Filter für diskrete eindimensionale Signale. Eine große Klasse von Filtern lässt sich in Form einer sog. *Konvolution* darstellen:
Das diskrete Signal s der Länge $2N+1$ sei gegeben als $(2N+1)$-dimensionaler Vektor $s = (s_k)_{k=-N\dots N}$. Dann wirkt das Filter f (ebenfalls gegeben als Vektor $f = (f_k)_{k=-N\dots N}$) auf das Signal s derart, dass für das gefilterte Signal $\tilde{s}$ gilt:

$$\tilde{s}_k = (s * f)_k = \sum_{l=-N}^{N} s_{k-l} f_l \quad \forall k \in \{-N, \dots, N\}\,.$$

Man setzt dabei $s_{k-l} := s_{k-l+2N+1}$, falls $l-k < -N$, und $s_{k-l} := s_{k-l-(2N+1)}$, falls $l-k > N$, d.h. man setzt das Signal am Rand periodisch fort.
Man kann sich die Berechnung der diskreten Konvolution vorstellen als ein »Entlangschieben« des umgedrehten Filter-Vektors am (periodisch verlängerten) Signal-Vektor, wobei sich die Werte des gefilterten Signals dann jeweils als Skalarprodukt der beiden Vektoren im Überlappungsbereich ergeben.

Notation: Da üblicherweise die meisten Einträge im Filtervektor Null sind, schreibt man zur Darstellung des Filters oft nur $[f_{-a}\; f_{-a+1}\; \dots\; f_{-1}\; \mathbf{f_0}\; f_1\; \dots\; f_{b-1}\; f_b]$, alle äußeren Nullwerte werden weggelassen. Um den Eintrag am Index 0 zu kennzeichnen, schreiben wir ihn fett.

Beispiel: Das in der Vorlesung vorgestelle Mittelwert-Filter, das jedes gefilterte Pixel als Mittelwert über alle Rohbild-Pixel in einer $(2m+1)$-Umgebung berechnet, lässt sich äquivalent darstellen:

$$\tilde{s}_k = \frac{1}{2m+1} \cdot \sum_{l=-m}^{m} s_{k-l} \cdot 1 \quad \leftrightsquigarrow \quad \frac{1}{2m+1} \left[\underbrace{1\;1\;\dots\;1\;\mathbf{1}\;1\;\dots\;1\;1}_{(2m+1)\text{ mal}} \right].$$

Für eine 3-Umgebung schriebe man $\frac{1}{3}[1\;\mathbf{1}\;1]$, für eine 5-Umgebung $\frac{1}{5}[1\;1\;\mathbf{1}\;1\;1]$ usf.

(i) Sei nun folgendes Signal s gegeben (maximale diskret darstellbare Frequenz):

$$s = [-1 \quad 1 \ -1 \quad 1 \ -1 \quad 1 \ -1 \quad 1 \ -1 \quad 1 \ -1].$$

Filtern Sie dieses Signal mit dem Mittelwert-Filter zu Umgebungen der Größe 3, 5 und 7, also mit $\frac{1}{3}[1\ \mathbf{1}\ 1]$, $\frac{1}{5}[1\ 1\ \mathbf{1}\ 1\ 1]$ und $\frac{1}{7}[1\ 1\ 1\ \mathbf{1}\ 1\ 1\ 1]$.
Vergleichen Sie die Resultate. Was fällt Ihnen auf?

(ii) Filtern Sie das Signal aus (i) mit den Filtern $\frac{1}{4}[1\ \ \mathbf{2}\ \ 1]$, $\frac{1}{16}[1\ \ 4\ \ \mathbf{6}\ \ 4\ \ 1]$ und $\frac{1}{64}[1\ 6\ 15\ \mathbf{20}\ 15\ 6\ 1]$. Vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus (i).

(iii) Bei verrauschten Signalen möchte man in erster Linie hochfrequente Störungen ausfiltern. Welches der Filter aus (i) und (ii) eignet sich dafür am besten?

(iv) Warum ergeben die Einträge in Glättungsfiltern in Summe immer Eins?

Aufgabe 6.2 (2+2 Punkte) (*Diffusion*stensor)
Die allgemeine Diffusionsgleichung $\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}(D \nabla c)$ für die Konzentration c enthält den Diffusions*tensor* D, das ist im dreidimensionalen Fall eine (3x3)-Matrix. Die Matrix beschreibt Eigenschaften des diffundierenden Stoffes und des umgebenden Mediums. Durch die Multiplikation des Gradientenvektors ∇c mit der Matrix können zum Beispiel bestimmte Komponenten des Gradienten unterdrückt werden, wenn die Diffusion entlang dieser Komponenten nicht stattfinden kann/soll. Ist die Diffusion isotrop (in alle Richtungen gleich), hat D Diagonalgestalt:

$$D = \begin{pmatrix} D_c & & \\ & D_c & \\ & & D_c \end{pmatrix}.$$

(i) Wie muss der Tensor aussehen, wenn die Diffusion nur in der xy-Ebene, darin aber gleichmäßig in alle Richtungen stattfindet (z.B. in schieferartigem Gestein)?

(ii) Der Diffusionstensor

$$D = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 1 & 3 \\ 6 & 3 & 9 \end{pmatrix}$$

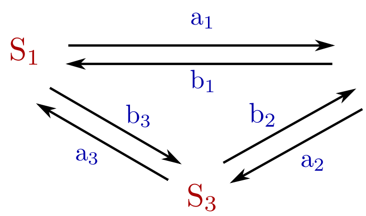
lässt nur Diffusion in eine Richtung v zu (z.B. in einem Faserbündel). In welche?

Erinnerung:

Für $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ und $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ ist $Ax = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 \end{pmatrix}$.

Bonus- und Wiederholungsaufgaben

Aufgabe 6.3 (1+3+4 Bonus-Punkte) (*Markov-Modell*)
Gegeben sei das abgebildete Modell für eine Kanaldynamik.



(i) Stellen Sie die drei Differentialgleichungen für die zeitliche Entwicklung der Zustandsanteile s_1, s_2, und s_3 auf.

(ii) Finden Sie die Verteilung der Zustände im Gleichgewichtszustand.
Hinweis: In diesem geschlossenen Reaktionskreis gilt die thermodynamische Bedingung $a_1 a_2 a_3 = b_1 b_2 b_3$. Verwenden Sie diese Identität, um ihr Ergebnis erheblich zu vereinfachen.

(iii) Leiten Sie die Iterationsvorschrift für ein explizites und ein implizites Euler-Verfahren zur Bestimmung des zeitlichen Verlaufs der Zustandsverteilung her.

Aufgabe 6.4 (1+2+3 Bonus-Punkte) (*Diffusionsgleichung*)
Betrachten Sie die orts- und zeitabhängige Konzentration $c(x, y, z, t)$ eines beliebigen Stoffes in einem beschränkten und abgeschlossenen Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$. Nehmen Sie an, dass es in V keine zusätzlichen Quellen und Senken dieses Stoffes gibt.
Aus der *Massenerhaltung* folgt, dass die zeitliche Änderung der Konzentration c nur vom Gesamtfluss $\vec{j}(x, y, z, t)$ über den Rand abhängt, d.h. es gilt:

$$\int\limits_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = \int\limits_{\partial V} \vec{j} \cdot \vec{n}\; dS$$

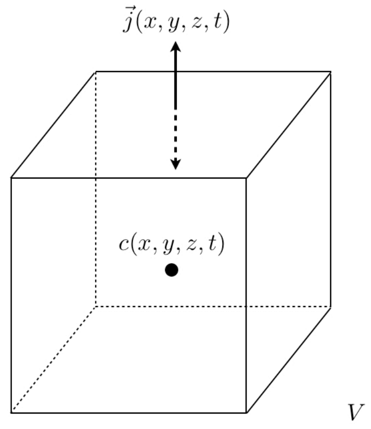
Das *1. Ficksche Gesetz* stellt nun folgende Beziehung zwischen Konzentration c und Gesamtfluss $\vec{j}$ her: Der Gesamtfluss $\vec{j}$ hängt proportional vom Konzentrationsgradienten

$$\nabla c := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} c = \begin{pmatrix} \frac{\partial c}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial y} \\ \frac{\partial c}{\partial z} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$$

ab, d.h. es gilt:

$$\vec{j}(x, y, z, t) = -D \nabla c(x, y, z, t)$$

mit einer Proportionalitätskonstanten $D \in \mathbb{R}^{3\times3}$.



(i) Nehmen Sie nun an, dass $D \in \mathbb{R}$. Leiten Sie mit diesen Informationen und unter Ausnutzung des *Gaußschen Integralsatzes* (s. Blatt 1) die *Diffusionsgleichung* (auch *Wärmeleitungsgleichung* genannt) her, die den Zusammenhang zwischen zeitlicher und örtlicher Entwicklung der Konzentration $c(x,y,z,t)$ beschreibt:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,y,z,t) = D\,\Delta c(x,y,z,t)$$

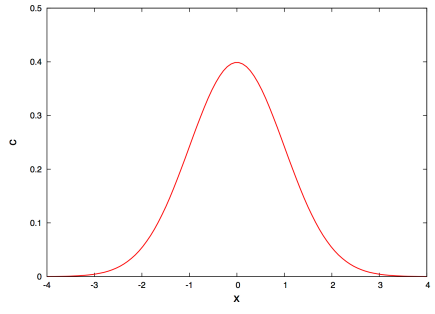
mit dem *Laplace-Operator* $\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

(ii) Betrachten Sie nun die eindimensionale Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = D\,\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x,t),$$

die die zeitliche Entwicklung der Konzentration eines Stoffes in einer Raumdimension beschreibt. Gegeben sei darüber hinaus die Anfangskonzentration zum Zeitpunkt $t_0 = 0$:

$$c(x, t_0 = 0) := c_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$



Erklären Sie kurz mit eigenen Worten, welche prinzipielle zeitliche Entwicklung die Diffusionsgleichung für die betrachtete Konzentration vorschreibt.

(iii) Berechnen und skizzieren Sie sowohl die erste als auch zweite Ableitung von $c_0(x)$ nach x. Erläutern Sie anhand der durch die Diffusionsgleichung gegebenen Vorschrift, wie sich die Konzentration $c(x,t)$ konkret zeitlich im Raum entwickeln wird. Geben Sie hierfür zunächst exemplarisch jeweils einen Punkt an, in dem die Konzentration im weiteren Verlauf der Zeit ansteigen bzw. abnehmen wird. Bestimmen Sie anschließend das gesamte Ortsintervall, in dem die Konzentration im weiteren Verlauf der Zeit abnehmen wird.

Aufgabe 6.5 (2+4 Bonus-Punkte) (*Anfangswertprobleme*)
(i) Bestimmen Sie zu der Anfangswertaufgabe

$$u'(t) = -tu(t), \quad u(0) = 1$$

die analytische Lösung. Benutzen Sie hierfür die Methode der *Trennung der Variablen*, wie sie bei der Bestimmung der analytischen Lösung des *Leaky-integrate-and-fire Modells* zum Einsatz gekommen ist.

(ii) Falls überhaupt eine analytische Lösung existiert, lässt sie sich für beliebige Anfangswertprobleme im Allgemeinen nur schwer bestimmen. Hier schaffen numerische Verfahren Abhilfe, die eine hinreichend genaue Näherung der Lösungsfunktion liefern.

Gegeben sei das Anfangswertproblem

$$u'(t) = -2tu(t)^2, \quad u(0) = 1$$

mit der analytischen Lösung $u(t) = \frac{1}{x^2+1}$. Formulieren Sie für das Problem sowohl das explizite als auch implizite Eulerverfahren. Beachten Sie im impliziten Fall die Nichtlinearität des Problems. Wenden Sie beide Verfahren mit den Schrittweiten $h_1 = 0.1$ und $h_2 = 0.01$ an und vergleichen Sie die Ergebnisse mit der analytischen Lösung.

Aufgabe 6.6 (12 Bonus-Punkte) (*Programmieraufgabe: Marching Squares*)
Für ein gegebenes zweidimensionales Feld mit Grauwerten (Java-Datentyp: *float[]*) und einen vorgegebenen Isowert (*float*):
Implementieren Sie den *Marching Squares* Algorithmus zur Berechnung von Isolinien in der Programmiersprache Java.

Gewünschtes Ergebnis:
Datenstruktur mit Pfadinformation. Eine GUI-unabhängige Implementierung ist erwünscht. Es ist jedoch erlaubt, die Pfadklasse aus JavaFX zu verwenden:
http://docs.oracle.com/javafx/2/api/javafx/scene/shape/Path.html

Achtung, Pfade müssen geschlossen werden!

Referenz: http://de.wikipedia.org/wiki/Marching_Squares
Für besonders Ambitionierte: http://de.wikipedia.org/wiki/Marching_Cubes

Dieses Verfahren kann benutzt werden, um aus Mikroskopiedaten Rechengitter zu erzeugen!

Wir wünschen ein frohes Weihnachtsfest
und einen gelingenden Start ins neue Jahr!