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

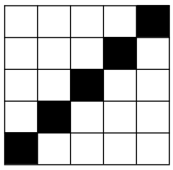
7. Übung zur Vorlesung
Modellierung und Simulation 3
(WS 2013/14)

Prof. Dr. G. Queisser
Markus Breit, Martin Stepniewski

Abgabe: Dienstag, 21.01.2014, 12:00 Uhr

Aufgaben

Aufgabe 7.1 (4+4+2 Punkte) (*Trägheitsbasiertes, anisotropes Diffusionsfilter*)
Gegeben seien Rohdaten in Form eines 5x5-Grauwertbildes:



$$\rightsquigarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Auf der rechten Seite der Abbildung befindet sich die Repräsentation des Bildes durch Zahlenwerte.

(i) Berechnen Sie für das Pixel in der Mitte (Koordinaten (3, 3)) und das darunter liegende Pixel (Koordinaten (3, 4)) jeweils den Trägheitstensor. Beachten Sie dazu eine 3x3-Umgebung des jeweiligen Pixels.

Erinnerung: Der (hier) 2x2-Trägheitstensor Θ berechnet sich nach der Formel: $\Theta_{lm} = \sum\limits_i m_i(r_i^2\delta_{lm} - r_{il}r_{im}), \quad l, m \in \{1, 2\}$; wobei m_i der Grauwert des i-ten Pixels der betrachteten Umgebung ist und r_i der Abstand dieses Pixels (in Pixeln) vom Zentralpixel als Vektor, entsprechend sind r_{il} und r_{im} die l-te bzw. m-te Komponente dieses Vektors, δ_{lm} ist das Kronecker-Delta, s. Skript. Beide Tensoren müssen symmetrisch sein!

(ii) Finden Sie die Eigenwerte und je einen zugehörigen Eigenvektor der beiden Trägheitstensoren.

Tipp: Die beiden EV sind orthogonal zueinander und lassen sich jeweils sehr leicht erraten! Sollte das nicht gelingen, lassen sich die beiden EW des Tensors $\Theta = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$ durch $\lambda_{1/2} = \frac{a+d\pm\sqrt{(a-d)^2+4b^2}}{2}$ bestimmen. Mit der Definition eines EV lassen sich dann die beiden EV dazu finden: $\Theta v_i = \lambda_i v_i \;\Leftrightarrow\; (\Theta - \lambda_i I)\, v_i = 0$.

(iii) Entscheiden Sie für beide Pixel anhand der Eigenwerte, ob es sich um eine lineare Umgebung handelt oder nicht, und geben Sie den daraus resultierenden Diffusionstensor für das trägheitsbasierte, anisotrope Diffusionsfilter an.

Aufgabe 7.2 (2+2 Bonus-Punkte) (*Probleme des Diffusionsfilters*)
(i) Berechnen Sie für die Rohdaten aus 7.1 den Trägheitstensor in einer 3x3-Umgebung für das Pixel diagonal rechts unter dem Zentralpixel (Koordinaten (4, 4)) und finden Sie dessen Eigenvektoren und -werte. Welches Problem sehen Sie im Ergebnis?

(ii) Wie könnte man hier Abhilfe schaffen?

Aufgabe 7.3 (4+2 Punkte) (*Beziehung von Diffusion und Random Walk*)
In Aufgabe 6.4 wurde die *Diffusionsgleichung* mithilfe des 1. Fick'schen Gesetzes und der Massenerhaltung unter Ausnutzung des Gauß'schen Integralsatzes hergeleitet. Dabei beschreibt die Diffusionsgleichung den Zusammenhang zwischen zeitlicher und örtlicher Entwicklung z.B. von einer gelösten Teilchenkonzentration $c(x, y, z, t)$ in einem beschränkten und abgeschlossenen Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$.
Dieser *makroskopische* Transport der gesamten Teilchenkonzentration lässt sich alternativ durch statistische Überlegungen mit Hilfe der *mikroskopischen*, zufälligen Bewegung einzelner Teilchen herleiten, dem *Random Walk*. Dabei bewegt sich ein Teilchen auf einem n-dimensionalen Quadratgitter der Maschenweite $a \in \mathbb{R}$ aus einem Gitterpunkt $x \in \mathbb{R}^n$ nach folgendem Prinzip: Mit gleicher Wahrscheinlichkeit springt das Teilchen in **eine** der $2n$ möglichen Richtungen und zwar mit einer vorgegebenen (mittleren) *Sprungrate* Γ (Kehrwert der mittleren Zeit, die vergeht, bis das Teilchen in eine beliebige Richtung springt). Die mittlere Sprungrate in eine bestimmte Richtung ist also gerade $\omega = \frac{\Gamma}{2n}$.

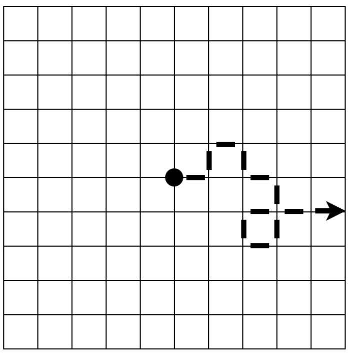


Abbildung 1: Random-Walk eines Teilchen auf einem 2D Quadratgitter der Maschenweite $a \in \mathbb{R}$.

(i) Leiten Sie mit Hilfe der unten stehenden Anleitung für den eindimensionalen Fall die Diffusionsgleichung mit dem Random-Walk-Ansatz her.

Anleitung:

(a) Nehmen Sie an, dass die mittlere Sprungrate Γ bekannt ist und behandeln Sie sie wie eine konstante Rate (ein Teilchen springe also gewissermaßen zu jedem Zeitpunkt mit seiner mittleren Sprungrate). Bemerkung: Dies ist zwar formal keine ganz korrekte Vorgehensweise, führt aber zum selben Ergebnis wie eine solche und ist sicherlich anschaulicher.

(b) Betrachten Sie nun, wie sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(x,t)$ des Teilchens in einem Gitterpunkt x zur Zeit t zeitlich entwickelt. Überlegen Sie sich hierfür, mit welchen absoluten Raten sich das Teilchen jeweils von x zu beiden Nachbargitterpunkten *fort-* und aus den Nachbargitterpunkten zu x *hin*bewegt – vergessen Sie nicht, dass ein Teilchen notwendig erst in einem Punkt sein muss, bevor es von dort wegspringen kann (orientieren Sie sich ggf. an den Gleichungen bei Markov-Modellen):

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \dots$$

(c) Mithilfe der *Taylorentwicklung* (vgl. Blatt 2) lassen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $P(x \pm a, t)$ unter der Annahme genügender Regularität wie folgt darstellen:

$$P(x+a,t) = P(x,t) + a\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} + \frac{a^3}{6}\frac{\partial^3 P(x,t)}{\partial x^3} + O(a^4)$$

bzw.

$$P(x-a,t) = P(x,t) - a\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - \frac{a^3}{6}\frac{\partial^3 P(x,t)}{\partial x^3} + O(a^4)$$

Das Einsetzen dieser Identitäten in die Differentialgleichung aus (b) liefert Ihnen unter Vernachlässigung der Größen vierter Ordnung ($O(a^4)$) die Diffusionsgleichung, wenn Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(x,t)$ durch Multiplikation mit der Anzahl der beteiligten Teilchen mit dem Erwartungswert der Konzentration $c(x,t)$ identifizieren.

(ii) Geben Sie die Beziehung an, in der die mikroskopische Sprungrate Γ und der makroskopische Diffusionskoeffizient D stehen (ungefähr die sogenannte *Einstein-Relation*). Von welchen physikalischen Parametern hängt die Sprungrate Γ eines Teilchens und somit auch der Diffusionskoeffizient im Allgemeinen ab?