

Masterarbeit

# Schematische 2D Visualisierung von RNA-Protein Interaktionen

Niklas Teichmann

2. April 2018

**Zusammenfassung:** Die Visualisierung von Tensorfeldern ist trotz vielen Jahrzehnten aktiver Forschung noch immer ein aktives Thema. Komplexe Strukturen innerhalb von Tensorfeldern stellen hohe Anforderungen an Visualisierungssoftware, um die Interpretation durch Benutzer zu erleichtern. Innerhalb dieser Arbeit wurde eine Erweiterung für die Visualisierungssoftware 'FAnToM' entwickelt, die Techniken aus dem Direct Volume Rendering und dem Continuous Scatterplotting verwendet, um Invarianten von symmetrischen Tensoren 2. Grades und ihre Verteilung innerhalb eines Datensatzes darzustellen. Dabei wurde besonderer Wert auf Interaktivität gelegt, um Nutzern die explorative Analyse der Daten zu ermöglichen.

Hiermit erkläre ich, die vorliegende wissenschaftliche Arbeit selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe angefertigt zu haben. Ich habe keine anderen als die angeführten Quellen und Hilfsmittel benutzt und sämtliche Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten oder unveröffentlichten Schriften entnommen wurden, und alle Angaben, die auf mündlichen Auskünften beruhen, als solche kenntlich gemacht. Ebenfalls sind alle von anderen Personen bereitgestellten Materialien oder erbrachten Dienstleistungen als solche gekennzeichnet.

Leipzig, d. \_\_\_\_\_  
Ort, Datum

Matrikelnummer: 2878372

\_\_\_\_\_  
Unterschrift

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Verwandte Arbeiten</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
3.1	Mathematische Grundlagen . . . . .	3
3.1.1	Urbild und Bild einer Funktion . . . . .	3
3.1.2	Einschränkung einer Funktion . . . . .	4
3.1.3	Volumen einer Teilmenge von $\mathbb{R}^n$ . . . . .	4
3.1.4	Jacobi Matrix . . . . .	4
3.1.5	Lineare Abbildungen . . . . .	5
3.1.6	Dualraum . . . . .	5
3.1.7	Multilineare Funktionen . . . . .	5
3.1.8	Tensor . . . . .	6
3.1.9	Spur von Matrizen . . . . .	6
3.1.10	Norm von Matrizen . . . . .	7
3.1.11	Deviator von Matrizen . . . . .	7
3.1.12	Modus von Matrizen . . . . .	8
3.1.13	Gradient . . . . .	9
3.1.14	Orthogonalität von Matrizen . . . . .	9
3.1.15	Matrixinvarianten . . . . .	9
3.1.16	Invariantensätze . . . . .	10
3.2	Mechanische Grundlagen . . . . .	13
3.2.1	Physikalisches Feld . . . . .	13
3.2.2	Mechanische Spannung . . . . .	14
3.2.3	Mechanische Verformung . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Verwendete Verfahren und Technologien</b>	<b>14</b>
4.1	FAnToM . . . . .	14
4.2	OpenGL . . . . .	15
4.3	Direct Volume Rendering . . . . .	17
4.3.1	Raycasting . . . . .	18
4.4	Continuous Scatterplotting . . . . .	20
4.4.1	Scatterplotting . . . . .	20
4.4.2	Erläuterung des Continuous Scatterplottings . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Umsetzung</b>	<b>22</b>
5.1	Datenaufbereitung . . . . .	22
5.2	Die Rasterisierung . . . . .	22
5.3	Funktionen . . . . .	22
5.4	Handbuch . . . . .	22
5.5	Muss noch überarbeitet werden . . . . .	22

<b>6 Ergebnisse</b>	<b>22</b>
6.1 title . . . . .	22
<b>7 Ausblick</b>	<b>22</b>
<b>Bücher</b>	<b>I</b>
<b>Artikel</b>	<b>I</b>
<b>Internetressourcen</b>	<b>II</b>

# 1 Einleitung

Tensorfelder sind eine sowohl in der Forschung als auch in der Praxis häufig vorkommende Art von Datensätzen. Beispiele dafür sind die Diffusions-Tensor-Bildgebung[3], welche die Diffusion von Wasser in Gewebe wie z.B. dem Hirn untersucht, oder Verformungs-[11, S. 122] und Spannungstensoren[11, S. 154] in der Mechanik. Ein häufig gewählter Ansatz, um die Interpretation von Tensordaten zu erleichtern, ist die Tensorfeldvisualisierung, ein Teilgebiet der wissenschaftlichen Visualisierung, das sich mit der Erzeugung von für Menschen verständlichen visuellen Repräsentationen von Tensorfeldern beschäftigt. Auch diese muss sich jedoch den genannten Herausforderungen stellen. Dabei treten jedoch eine Reihe von Problemen auf, von denen einige im Folgenden genannt werden[12][10]:

**Menge an Daten pro Tensor** Ein einzelner Tensor kann, abhängig von Grad und Dimension, beliebig viele Datenwerte umfassen. Aber selbst ein Tensor 2. Grades und 3. Dimension besteht bereits aus 9 Werten, für die eine passende Darstellung gefunden werden muss.

**Menge an Daten pro Datensatz** Häufig enthalten Datensätze Tausende oder Millionen von Tensoren, was gut skalierende Werkzeuge zur Analyse notwendig macht. Zudem bestehen relevante Merkmale der Datensätze oft nur aus wenigen Datenpunkten, weshalb effektives Filtern wichtig wird.

**Fehlende Intuition** Tensoren beschreiben im Allgemeinen lineare Abhängigkeiten zwischen Skalaren, Vektoren und anderen Tensoren. Während bei niedrigen Rängen (Skalare/Vektoren) noch intuitive Interpretation existieren (Zahlenwert/Punkt im dreidimensionalen Raum), fällt es Menschen erheblich schwieriger, Matrizen oder Tensoren höheren Grades zu interpretieren. Die Repräsentation eines Tensors muss daher sehr gut durchdacht sein, und relevante Eigenschaften interpretierbar darstellen.

**Domänenspezifische Informationen** Abhängig von der jeweiligen Domäne können unterschiedliche Informationen über die vorliegenden Tensoren von Interesse sein. Zum Beispiel kann isotropen oder degenerierten Punkten (Punkte, in denen die Eigenvektoren nicht eindeutig definiert sind) in manchen Anwendungsfällen besondere Bedeutung zugemessen werden, während sie in anderen Kontexten nur Punkte hoher Symmetrie ohne besondere Bedeutung sind [12, S. 4]. Eine Anwendung zu entwickeln, die über Domänen hinweg verwendbar ist, ist daher schwer.

Im Zuge der vorliegenden Arbeit wurde ein neues Verfahren zur Visualisierung von symmetrischen Tensoren 2. Grades im dreidimensionalen Raum entwickelt und als Erweiterung der Visualisierungssoftware ‘FAnToM’ implementiert. Im Speziellen wurden Invariantenfelder aus den Matrixdarstellungen der Tensoren berechnet und mithilfe von Techniken

aus dem Continuous Scatterplotting und dem Direct Volume Rendering dargestellt. Durch Mausinteraktionen ist es möglich, Bereiche von Invarianten auszuwählen und im ursprünglichen Feld darzustellen. Das Ziel der Anwendung ist es, Kontinuumsmechanische Untersuchungen von Materialien und Werkstücken zu erleichtern.

Der Rest dieser Arbeit ist wie folgt gegliedert: Zunächst werden im Kapitel 2 [Verwandte Arbeiten](#) bekannte Verfahren zur Tensorfeldvisualisierung mit Vor- und Nachteilen erläutert. Danach werden im Kapitel 3 [Grundlagen](#) Definitionen und Grundlagen aus der Mathematik und Kontinuumsmechanik vorgestellt, die in dieser Arbeit verwendet wurden. Als nächstes werden in 4 [Verwendete Verfahren und Technologien](#) Programmschnittstellen und Visualisierungstechniken erläutert, die innerhalb dieser Arbeit verwendet wurden. Insbesondere wird dort auch auf FAnToM als Softwaregrundlage eingegangen. Kapitel 5 [Umsetzung](#) beschreibt die konkrete Umsetzung der FAnToM-Erweiterung mit allen implementierten Funktionen. Nachfolgend werden in Kapitel 6 Ergebnisse die entwickelte Erweiterung exemplarisch auf einige Datensätze angewendet, und die Ergebnisse diskutiert. Zum Abschluss werden in Kapitel 7 [Ausblick](#) im Verlauf dieser Arbeit neu aufgetretene Problemstellungen sowie weitere Verbesserungsmöglichkeiten erörtert.

## 2 Verwandte Arbeiten

Es existiert bereits eine große Anzahl von Verfahren, die Visualisierungen von Tensorfeldern erzeugen. Nachfolgend werden, ohne Anspruch auf Vollständigkeit, einige der wichtigsten genannt und kurz beschrieben.

Eine relative einfache Darstellung eines Vektorfelds besteht darin, die einzelnen Komponenten eines Tensor 2. Grades als Skalarfelder aufzufassen und als Grauwertbild zu zeichnen. Dabei ist der Grauwert an einem Datenpunkt abhängig vom Verhältniss des Wertes der Komponente des Vektors zu dem höchsten Wert dieser Komponente im Datensatz. Die früheste gefundene Erwähnung dieses Verfahrens ist in einem Paper von Kindlmann und Weinstein aus dem Jahre 1999 [15], in dem es jedoch als weder neu noch besonders intuitiv beschrieben wird.

Die wohl verbreitetste Art von Tensorvisualisierungen sind die glyphenbasierten Verfahren. Diese Verfahren beschränkt sich auf Tensoren zweiten Grades im dreidimensionalen Raum, die als Matrizen dargestellt werden können und einen großen Teil der Daten aus Mechanik und Medizin ausmachen. Eine Glyphe ist hierbei ein kleines Bild eines grafischen Primitivs, zum Beispiel eines Ellipsoiden, Kuboiden oder Superquadrics[14], das einen Tensor darstellt. Die Form der Primitive ist dabei abhängig von den Eigenwerten des jeweiligen, als Matrix dargestellten Tensors an dieser Stelle. Indem an jedem Datenpunkt eine solche Glyphe gezeichnet wird, erhält der Benutzer ein Bild von der Verteilung und Struktur der Tensoren im Datensatz. Glyphenbasierte Verfahren sind

besonders in der Medizin beliebt, da sie leicht Rückschlüsse auf die Richtung von Nerven- und Muskelfasern zulassen.

Hyperstreamlines[6] bilden ein Analogon zu den Stromlinien bei Vektorfeldern. Als Eingabedaten sind nur Felder von reellen, symmetrischen, dreidimensionalen Tensoren 2. Grades mit nichtnegativen Eigenwerten zugelassen, da so sichergestellt wird, dass die Eigenwerte ganzzahlig und größer 0 sind sowie die Eigenvektoren paarweise orthogonal zueinander. Das Verfahren zeichnet ausgehend von festgelegten Punkten Schläuche durch das Vektorfeld. Die Mittellinien dieser Schläuche entsprechen dabei Stromlinien, deren Richtung vom Eigenvektor mit dem höchsten Eigenwert abhängt. Der Durchschnitt durch den Schlauch, orthogonal zur Mitellinie ist stets eine Ellipse, deren Halbachsen den zwei kleineren Eigenwerten entsprechen. Da so aber Informationen über den Wert des größten Eigenwertes verloren geht, werden einzelne Stücken des Schlauchs abhängig von diesem Wert eingefärbt.

Weiterhin muss die Diplomarbeit von Clemens Fritzsche, ‘Visuelle Analyse kontinuumsmechanischer Simulationen durch kontinuierliche Streudiagramme’[10], erwähnt werden, auf der die vorliegende Arbeit direkt aufbaut. Fritzsche verwendet Methoden des Continuous Scatterplottings, um Invarianten von zweidimensionalen, symmetrischen Tensoren 2. Grades darzustellen. Dabei beschränkt er sich jedoch auf zwei der drei Invarianten in jedem Invariantensatz, um einen zweidimensionalen Scatterplot zu erzeugen. Die vorliegende Arbeit erweitert diesen Ansatz auf vollständige Invariantensätze indem eine dreidimensionale Darstellung erzeugt wird.

## 3 Grundlagen

### 3.1 Mathematische Grundlagen

In diesem Teil der Arbeit werden mathematische Grundlagen zu Tensoren, Feldern und Invarianten erläutert. Insbesondere für die Definition von Tensoren sind Vorkenntnisse nötig, die ebenfalls erklärt werden.

Eine erheblicher Teil der verwendeten Formeln und Definitionen stammen aus dem Buch ‘Introduction to vectors and tensors’ von R. M. Bowen und C. C. Wang [4].

#### 3.1.1 Urbild und Bild einer Funktion

Zu jeder Funktion  $f : A \rightarrow B$ , die Objekten aus der Menge  $A$  Objekte aus  $B$  zuordnet, lässt sich das Bild einer Menge  $A' \subset A$  als

$$f(A') : \{b \in B | \exists a \in A' : f(a) = b\} \quad (1)$$

und das Urbild einer Menge  $B' \subset B$  als

$$f^{-1}(B') : \{a \in A | \exists b \in B' : f(a) = b\} \quad (2)$$

bestimmen.  $f(A)$  wird hierbei die Bildfunktion,  $f^{-1}(B)$  die Urbildfunktion genannt.

### 3.1.2 Einschränkung einer Funktion

Gegeben sei eine Funktion  $f : A \rightarrow B$ . Dann ist  $f|_{A'} : A' \rightarrow B$ , die Einschränkung von  $f$  auf die Menge  $A' \subset A$ , definiert als

$$f|_{A'}(a) = f(a) \text{ für alle } a \in A' \quad (3)$$

und auf allen  $a \in A, a \notin A'$  nicht definiert.

### 3.1.3 Volumen einer Teilmenge von $\mathbb{R}^n$

Das  $n$ -dimensionale Volumen einer Menge  $Vol(A), A \subset \mathbb{R}^n$  wird über das Lebesgue-Stieltjes Maß definiert[16]. Intuitiv entspricht es in  $\mathbb{R}$  der Länge, in  $\mathbb{R}^2$  dem Flächeninhalt und in  $\mathbb{R}^3$  dem Volumen.

Falls für eine Menge  $A$  gilt  $Vol(A) = 0$ , so bezeichnet man diese als Nullmenge.

### 3.1.4 Jacobi Matrix

Die Jacobi Matrix  $J_f$  einer differenzierbaren Abbildung  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  ist eine  $m \times n$  Matrix, deren Komponenten die partiellen ersten Ableitungen von  $f$  sind. Formal geschrieben gilt also für die Koordinaten des Urbilds  $x_1, \dots, x_n$  und Abbildungen  $f_1, \dots, f_m$  der einzelnen Komponenten

$$J_f(a) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(a) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(a) \end{pmatrix} \quad (4)$$

Sie entspricht damit der ersten Ableitung in der mehrdimensionalen Analysis. Die Determinante der Jacobi-Matrix  $\det(J_f)$  wird auch als Funktionaldeterminante bezeichnet, und beschreibt einige Eigenschaften der Funktion  $f$ . Die für diese Arbeit wichtigste Rolle spielt der absolute Wert  $|\det(J_f)|$  an einem Punkt  $p$ , die die Expansion bzw. das Schrumpfen der Funktion in der Nähe von  $p$  beschreibt. Für eine lineare Funktion

$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ , deren Funktionaldeterminante in jedem Punkt  $p_n \in \mathbb{R}$  gleich ist, bedeutet das mit dem  $n$ -dimensionalen euklidischen Abstand  $\|p_1, p_2\|_n$

$$\|f(p_1), f(p_2)\|_n = \det(J_f) \cdot \|p_1, p_2\|_n \quad (5)$$

Indem man das Lebesgue-Stieltjes Maß in  $\mathbb{R}^n$  mittels des euklidischen Abstands definiert, lassen sich so auch Volumenänderungen ausdrücken.

### 3.1.5 Lineare Abbildungen

Seien  $V, U$  zwei Vektorräume über demselben Körper  $K$ . Eine lineare Abbildung  $\varphi : V \rightarrow U$  ist eine Funktion, so dass für alle  $\lambda \in K$ ,  $v \in V$  und  $u \in U$  gilt[4, S. 85]:

$$\begin{aligned} \varphi(u + v) &= \varphi(u) + \varphi(v) \\ \varphi(\lambda v) &= \lambda \cdot \varphi(v) \end{aligned} \quad (6)$$

also  $\phi$  ein homogener Homomorphismus ist.

Die Menge aller linearen Abbildungen von  $V$  nach  $U$  wird mit  $L(V, U)$  bezeichnet. [4, S. 97].

### 3.1.6 Dualraum

Sei  $V$  ein Vektorraum und  $K$  sein zugrundeliegender Körper. Dann bildet die Menge der linearen Abbildungen der Form  $\varphi : V \rightarrow K$  wiederum einen Vektorraum  $V^*$ . Dieser wird **Dualraum** genannt[4, S. 203].

Vektoren aus  $V$  werden als **kovariant** bezeichnet, Vektoren aus  $V^*$  als **kontravariant**[4, S. 205].

### 3.1.7 Multilineare Funktionen

Multilineare Funktionen über Vektorräumen sind Funktionen der Form  $\varphi : V_1 \times \dots \times V_n \rightarrow K$ , wobei jedes  $V_i$  ein Vektorraum über  $K$  ist, und zusätzlich

$$\varphi(\lambda \cdot v_1 + \mu \cdot v'_1, \dots, v_n) = \lambda \cdot \varphi(v_1, \dots, v_n) + \mu \cdot \varphi(v'_1, v_2, \dots, v_n) \quad (7)$$

mit  $\lambda, \mu \in K$ ,  $v_i, v'_i \in V_i$  gilt (für jede weitere Variable analog). Intuitiv bedeutet das, dass  $\varphi$  linear in jeder Variable ist[4, S. 204, 218].



### 3.1.8 Tensor

Multilineare Funktionen der Form  $T : V^* \times \dots \times V^* \times V \times \dots \times V \rightarrow K$ , wobei  $V$  ein Vektorraum über  $K$  und  $V^*$  sein Dualraum ist, werden als Tensoren bezeichnet [4, S. 218]. Der Grad des Tensors ist definiert als die Anzahl an Variablen der Funktion. Die Tensoren über  $V$  bildet wiederum einen Vektorraum [4, S. 220]. Durch diese Definition ist ein Tensor immer invariant zur Basis des Vektorraums seiner Variablen. Egal in welche Basis er umgerechnet wird, er drückt dasselbe aus.

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich Tensoren 2. Grades verwendet, die in kartesischen, dreidimensionalen Koordinatensystemen erzeugt wurden. Dabei ist zu beachten, dass in kartesischen Koordinaten die Basis eines Vektorraumes  $V$  und seines Dualraumes  $V^*$  die gleiche Darstellung hat, also  $V$  und  $V^*$  austauschbar sind. Wenn in einen Tensor 2. Grades  $T$  die Basisvektoren  $e_{1,\dots,d}$  des zugrundeliegenden Vektorraumes  $V$  bzw  $V^*$  der Dimension  $d$  in jeder möglichen Kombination eingesetzt werden, ergeben sich für  $1 \leq i, j \leq d$  folgende Komponenten:

$$c_{i,j} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d T(e_i, e_j), \quad (8)$$

Diese basisabhängige Darstellung des Tensors bildet eine  $d \times d$  Matrix. Alle in der vorliegenden Arbeit verwendeten Tensoren liegen in dieser Form vor. Da durch das Matrix-Vektor-Produkt einer Matrix  $m$  mit einem Vektor  $v$

$$m \cdot v = u \quad (9)$$

eine Abbildung auf einen Vektor  $u$  desselben Vektorraumes wie  $v$  ausgedrückt werden kann, lassen sich mithilfe von Tensoren Abbildungen auf Vektorräumen unabhängig von der Basis des Raumes formulieren.

### 3.1.9 Spur von Matrizen

Die Spur ('trace') einer  $n \times n$  Matrix  $A$  mit Komponenten  $a_{ij}$  mit  $1 \leq i, j \leq n$  ist definiert als

$$tr(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii} \quad (10)$$

also die Summe aller Elemente in der Hauptdiagonale. Eine wichtige Eigenschaft der Spur ist, dass bei der Überführung einer Matrix in eine andere Basis gleich bleibt (siehe auch 3.1.15).

### 3.1.10 Norm von Matrizen

Eine Norm ist eine Abbildung  $f : V \rightarrow \mathbb{R}$  eines Vektorraumes  $V$  über dem Körper  $K$  auf die reellen Zahlen, die folgende Bedingungen erfüllt:

1.  $f(kv) = |k|f(v)$  (Absolute Homogenität)
2.  $f(u + v) \leq f(u) + f(v)$  (Erfüllung der Dreiecksungleichung)
3.  $f(v) = 0 \iff v = 0$  ist der Nullvektor (Definitheit)

mit  $k \in K, u, v \in V$ .

Eine in kartesischen Koordinaten häufig eingesetzte Norm ist die euklidische Norm. Diese ist auf dem Vektorraum aller  $m \times n$  Matrizen  $K^{m \times n}$  mit  $A \in K^{m \times n}$  definiert als

$$\text{norm}(A) = \sqrt{\text{tr}(AA^T)} \quad (11)$$

Die euklidische Norm wird auch als ‘Frobenius Norm’ bezeichnet.

### 3.1.11 Deviator von Matrizen

Eine Matrix  $A$  kann in ihren isotropen Anteil  $\bar{A}$  und ihren anisotropen Anteil  $\tilde{A}$  wie folgt zerlegt werde:

$$\tilde{A} = A - \bar{A} \quad (12)$$

$\tilde{A}$  wird auch als Deviator von  $A$  bezeichnet. Bei einer  $3 \times 3$  Matrix ergibt sich  $\bar{A}$  als

$$\bar{A} = \frac{1}{3} \text{tr}(A) I \quad (13)$$

wobei  $I$  die Matrixdarstellung des Einheitstensor ist.

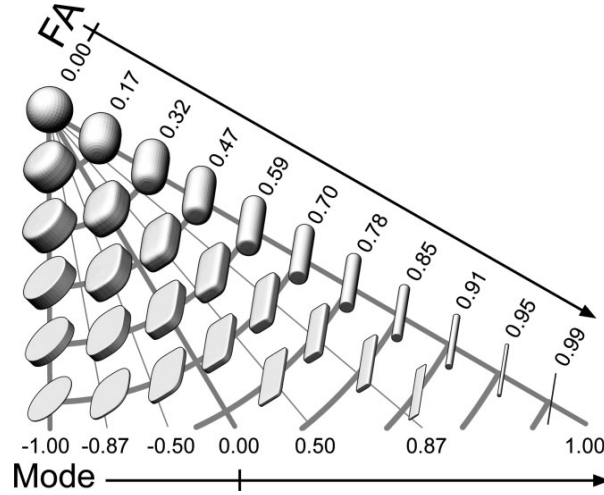


Abb. 1: Darstellung der fraktionalen Anisotropie und des Modus von Matrizen in Form von Superquadrics[14]. Die Fraktionale Anisotropie nimmt mit größerer Entfernung zum obersten linken Superquadric zu. Der Modus des Deviators wird abhängig vom Winkel dargestellt, wobei er links -1 beträgt und rechts 1. Entnommen aus [8, S. 140].

### 3.1.12 Modus von Matrizen

Der Verformungs-Modus [5] einer Matrix  $A$ , im Folgenden kurz Modus genannt, ist definiert als

$$mode(A) = 3\sqrt{6} \det(A \setminus norm(A)) \quad (14)$$

wobei  $\det()$  die Determinante ist. Im Folgenden wird meistens der Modus des Deviators von  $A$  verwendet.

Der Modus liegt im Bereich  $[-1, 1]$  und drückt das Verhältnis der Eigenwerte der Matrix zueinander aus:

- $mode(A) = 1$ : ein hoher, zwei niedrige Eigenwerte; lineare Anisotropie
- $mode(A) = 0$ : ein hoher, ein niedriger und mittlerer Eigenwert; Orthotropie
- $mode(A) = -1$ : zwei hohe, ein niedriger Eigenwert: planare Anisotropie

Um die Intuition hinter dem Modus zu verdeutlichen, sind in Abbildung 1 Superquadrics von Matrizen unterschiedlicher Modi dargestellt. Insbesondere wird dadurch betont, dass der Modus nicht von der Größe der Eigenwerte abhängt, sondern von deren Verteilung.

### 3.1.13 Gradient

Der Gradient einer skalaren Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  über einem kartesischen Koordinatensystem ist definiert als

$$\text{grad}(f) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (15)$$

also als Vektor aller partiellen Ableitungen in die Richtungen  $x_i$ . Analog ist der Gradient einer Skalarfunktion  $g : K^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ , wobei  $K^{m \times n}$  der Raum aller  $m \times n$  Matrizen ist, definiert als

$$\text{grad}(g) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial a_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial a_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial a_{mn}} \end{pmatrix} \quad (16)$$

wobei  $a_{ij}$  die Komponenten der Matrizen sind.

### 3.1.14 Orthogonalität von Matrizen

Zwei Matrizen  $U, V$  werden als orthogonal zueinander bezeichnet, wenn [8]

$$\text{tr}(U, V^T) = 0 \quad (17)$$

### 3.1.15 Matrixinvarianten

Als Invarianten werden zu mathematischen Objekten zugeordnete Größen bezeichnet, die invariant gegenüber der Anwendung bestimmten Transformationen auf die Objekte sind. Invarianten eines Tensors in Matrixdarstellung sind beispielsweise Größen, die sich unabhängig von der Wahl der Basis der Matrix nicht verändern[8]. Eine Invariante ist somit eine Funktion  $\Psi : M \rightarrow A$  die Objekten aus dem Vektorraum aller Matrizen  $M$  Objekte aus der Menge  $A$  zuordnet. In der Praxis wird für  $A$  meistens  $\mathbb{R}$  gewählt.

Da sich das vorliegende Paper auf symmetrische, dreidimensionale Tensoren 2. Grades und ausschließlich orthogonale Transformationen bezieht, werden die Invarianten eines

Tensors  $T$  durch seine Eigenwerte vollständig charakterisiert. Invarianten sind in diesem Spezialfall also auch als Funktion  $\Psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  der Form

$$\Psi : \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix} \rightarrow \mathbb{R} \quad (18)$$

darstellbar, wobei  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  die Eigenwerte von  $T$  sind. Die stimmt mit der Betrachtungsweise von Zobel und Scheuermann [18] überein.

### 3.1.16 Invariantensätze

Mengen von Invarianten werden als Invariantensätze bezeichnet. Matrixinvarianten  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  werden als orthogonal zueinander bezeichnet, wenn ihre Gradienten für jede mögliche Eingabematrix orthogonal sind. Die genauen Definitionen und Berechnungen dazu sind in ‘Orthogonal tensor invariants and the analysis of diffusion tensor magnetic resonance images’ von Ennis, Kindlmann et al. [8] nachzulesen. Da Gradienten von skalarwertigen Funktionen auf Matrizen wiederum Matrizen sind [8, S. 137], genügt zu zeigen dass diese orthogonal zueinander sind. Invariantensätze, deren Elemente paarweise orthogonal sind, werden als orthogonale Invariantensätze bezeichnet.

Für  $3 \times 3$  Matrizen enthalten alle orthogonalen Invariantensätze höchstens 3 Invarianten. In der Praxis spielen jedoch eine Vielzahl von Invariantensätzen eine Rolle, von denen im Folgenden einige erläutert werden:

**Die Eigenwerte** Eigenvektoren  $v_i$ ,  $1 \leq i \leq 3$  einer  $3 \times 3$  Matrix  $M$  sind vom Nullvektor verschiedene Vektoren, für die gilt

$$M \cdot v_i = \lambda_i v_i \quad (19)$$

Intuitiv bedeutet das, dass sich durch Multiplikation mit  $M$  ihre Richtung nicht verändert. Die zugehörigen  $\lambda_i$  werden als Eigenwerte bezeichnet und bilden einen orthogonalen Invariantensatz. Sie sind insbesondere in der Medizin sehr beliebt, da hohe Eigenwerte Hinweise auf Diffusionsbewegung in Gewebe liefern können.

**Der I-Invariantensatz** Das charakteristische Polynom  $\chi$  einer  $3 \times 3$  Matrix  $A$  hat die Form

$$\begin{aligned} \chi_A(\lambda) &= \det(\lambda I - A) \\ \chi_A(\lambda) &= -\lambda^3 + I_1 \lambda^2 - I_2 \lambda + I_3 \end{aligned} \quad (20)$$

wobei  $\lambda$  ein Element aus dem Körper von  $A$  und  $I$  die dreidimensionale Einheitsmatrix ist. Es wird häufig verwendet um die Eigenwerte von Matrizen zu bestimmen, da diese den Nullstellen entsprechen.

Eine weitere Eigenschaft ist, dass die Parameter  $I_1, I_2, I_3$  einen Invariantensatz darstellen. Wegen der Wichtigkeit des charakteristischen Polynoms werden sie häufig als ‘Hauptinvarianten’ bezeichnet. Alternativ können sie auch berechnet werden als

- $I_1(A) = \text{tr}(A)$  (Spur von  $A$ )
- $I_2(A) = \frac{1}{2}(\text{tr}(A)^2 - \text{tr}(A^2))$  (Summe der Hauptminoren von  $A$ )
- $I_3(A) = \det(A)$  (Determinante von  $A$ )

$I$  bildet jedoch keinen orthogonalen Invariantensatz.

**Der J-Invariantensatz** Die Berechnung der J-Invarianten ist identisch zum I-Invariantensatz, nur dass statt  $A$  der Deviator von  $A$  als Eingabe verwendet wird:

- $J_1(A) = \text{tr}(\tilde{A})$  (Spur des Deviators von  $A$ )
- $I_2(A) = \frac{1}{2}(\text{tr}(\tilde{A})^2 - \text{tr}(\tilde{A}^2))$  (Summe der Hauptminoren des Deviators von  $A$ )
- $I_3(A) = \det(\tilde{A})$  (Determinante des Deviators von  $A$ )

Dabei ist jedoch zu beachten, dass

$$\begin{aligned} \text{tr}(\tilde{A}) &= \text{tr}\left(A - \frac{1}{3}\text{tr}(A)I\right) \\ &= a_{11} - \frac{1}{3}\text{tr}(A) + a_{22} - \frac{1}{3}\text{tr}(A) + a_{33} - \frac{1}{3}\text{tr}(A) \\ &= a_{11} + a_{22} + a_{33} - \text{tr}(A) \\ &= \text{tr}(A) - \text{tr}(A) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{21}$$

weshalb statt  $J_1$  in der Regel  $I_1$  als Invariante verwendet wird. Ähnlich wie  $I$  ist auch  $J$  nicht orthogonal.

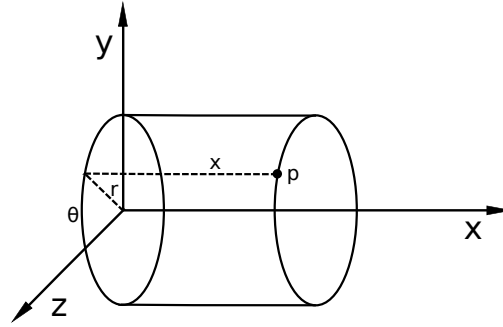


Abb. 2: In dieser Abbildung werden zylindrische Koordinaten innerhalb eines kartesischen Koordinatensystems dargestellt.  $x, y$  und  $z$  entsprechen dabei den kartesischen Achsen. Die Koordinaten des Punktes  $p$  sind angegeben als  $x, r, \theta$ .  $x$  entspricht der kartesischen Koordinate,  $r$  ist die Entfernung zwischen der Projektion von  $p$  auf die von  $y$  und  $z$  Achse aufgespannte Fläche und dem Koordinatenursprung und  $\theta$  entspricht dem Winkel zwischen Projektion von  $p$ , dem Koordinatenursprung und der  $x$ -Achse.

**Der K-Invariantensatz** Der K-Invariantensatz ist orthogonal und besteht aus den Invarianten  $K_1, K_2$  und  $K_3$ . Diese sind für eine Matrix  $A$  definiert als

- $K_1(A) = \text{tr}(A)$  (Spur von  $A$ )
- $K_2(A) = \text{norm}(\tilde{A})$  (Norm des Deviators von  $A$ )
- $K_3(A) = \text{mode}(\tilde{A})$  (Modus des Deviators von  $A$ )

Da  $K_1 \in [-\infty, \infty]$ ,  $K_2 \in [0, \infty]$ ,  $K_3 \in [-1, 1]$  bietet sich für den K-Invariantensatz eine Darstellung in einem zylindrischen Koordinatensystem an, wobei  $K_1$  eine Position auf einer zentralen Achse beschreibt,  $K_2$  die orthogonale Entfernung zu diesem Punkt und  $K_3$  den Winkel zu einer festgelegten, zur zentralen Achse orthogonalen, zweiten Achse. Sowohl ein zylindrisches als auch ein kartesisches Koordinatensystem sind in Abbildung ?? dargestellt.  $K_1$  entspricht dabei der zylindrischen  $x$ -Koordinate,  $K_2$  dem Radius  $r$  und  $K_3$  dem Winkel  $\theta$

**Der R-Invariantensatz** Der orthogonale R-Invariantensatz verwendet die Invarianten  $R_1, R_2$  und  $R_3$ . Für eine Matrix  $A$  sind sie definiert als

- $R_1(A) = \text{norm}(A)$  (Norm von  $A$ )
- $R_2(A) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\text{norm}(\tilde{A})}{\text{norm}(A)}$  (Fraktionale Anisotropie)
- $R_3(A) = \text{mode}(A)$  (Modus von  $A$ )

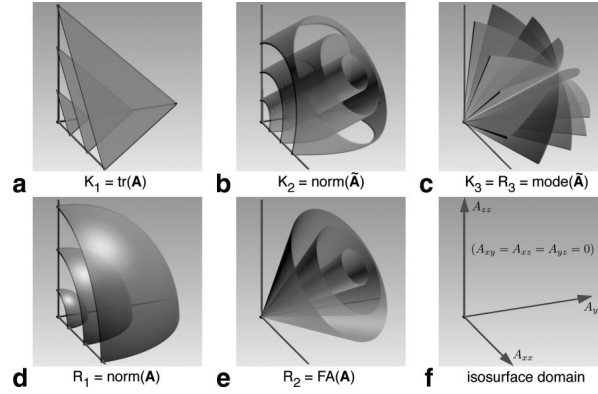


Abb. 3: Dargestellt sind Isoflächen der K und R Invarianten von diagonalisierten  $3 \times 3$  Matrizen (alle Werte ausserhalb der Hauptdiagonale sind 0). Die Koordinatenachsen entsprechen den drei Eigenwerten der Matrizen. Entnommen aus [8, S. 139]

Dabei fällt auf, dass  $R_3(A) = K_3(A) = mode(A)$ . Ähnlich wie der K-Invariantensatz kann auch R in einem zylindrischen Koordinatensystem dargestellt werden.

Sowohl K als auch R beschreiben die Verteilung, die Größe und das Verhältnis der Eigenwerte zueinander. Dies ist in Abbildung 3 dargestellt.

## 3.2 Mechanische Grundlagen

### 3.2.1 Physikalisches Feld

Ein physikalisches Feld ist eine physikalische Größe, die an verschiedenen Positionen im Raum unterschiedliche Werte annimmt[9, 1–2 Electric and magnetic fields]. Abstrahiert kann es als Funktion  $\mathbb{R}^n \rightarrow V$  beschrieben werden, wobei  $V$  eine beliebige Menge ist. Häufig wird für  $V$  jedoch  $\mathbb{R}$  (z.B. bei Temperaturen),  $\mathbb{R}^n$  (z.B. bei Strömungen) oder  $\mathbb{R}^{m \times n}$  (z.B. bei Verformungen) eingesetzt. Andere Beispiele für physikalische Felder sind elektromagnetische Felder oder Gravitationsfelder. Felder werden meist abhängig von ihrem Bild klassifiziert, so z.B. in Skalar-, Vektor- oder Tensorfelder.

Wenn Felder nicht in Form einer kontinuierlichen Funktion beschrieben werden können, zum Beispiel weil nur für endlich viele Punkte Messwerte vorhanden sind, kann ein Feld auf einem Gitter, das aus diesen Messpunkten besteht, definiert werden. Die Werte innerhalb der Zellen lassen sich dann durch Interpolation der Werte an den Eckpunkten berechnen.

Innerhalb der vorliegenden Arbeit werden Spannung und Verformung an Punkten von Objekten als Felder  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$  beschrieben.



### 3.2.2 Mechanische Spannung

In der Mechanik beschreibt Spannung (engl. stress) die Kraft, die Partikel innerhalb eines Objektes aufeinander auswirken. Um die Spannung an einem Punkt zu bestimmen, wird die Kraft, die auf infinitesimal kleine Flächenteile von Schnitten durch das Objekt wirkt, berechnet. Die Kraft ist dabei als Vektor formulierbar. Wenn die Schnitte entlang von 3 zueinander orthogonalen Ebenen durchgeführt werden, erhält man so drei Vektoren, die zusammen die Matrixdarstellung des Cauchy Tensors  $\sigma$  bilden:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad (22)$$

Jede Spalte des Cauchy Tensors entspricht dabei einem der Vektoren. Wie aus der Formel ersichtlich, ist die Matrix symmetrisch und enthält zwei Typen von Komponenten: Die  $\sigma$  entlang der Hauptdiagonale, die Kraft in Richtung der Normalen der jeweiligen Ebene angeben, und den  $\tau$ , die Scherspannungen angeben, die parallel zu den Schnittebenen verlaufen.

### 3.2.3 Mechanische Verformung

Wenn in einem Objekt Spannung vorliegt, so verformt es sich proportional zur Stärke der Spannung (Hookesches Gesetz). Durch einen Verformungstensor (auch Verzerrungstensor, engl. strain tensor) lässt sich die Verformung an einem Punkt durch Kraftanwendung angeben:

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_x & \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \frac{1}{2}\gamma_{xz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \epsilon_y & \frac{1}{2}\gamma_{yz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xz} & \frac{1}{2}\gamma_{yz} & \epsilon_z \end{bmatrix} \quad (23)$$

Ähnlich wie beim Spannungstensor drücken die  $\epsilon$  in der Hauptdiagonale Dehnungen oder Stauchungen des Objektes entlang der Hauptachsen aus, die  $\gamma$  Werte Scherungen, also Verschiebungen der Seitenflächen zueinander. Dabei ändern sich die Winkel der Kanten des Objektes zueinander.

## 4 Verwendete Verfahren und Technologien

### 4.1 FAnToM

FAnToM[1][17] ('Field Analysis using Topological Methods') ist ein Programm, dessen Entwicklung im Jahre 1999 begann. Obwohl es zu Anfang noch als Hilfsmittel für die

Analyse von Vektorfeldtopologien konzipiert war, entwickelte es sich über die Jahre hinweg zu einer Plattform für diverse Visualisierungen.

Erweiterungen von FAnToM werden in Form von sogenannten Algorithmen entwickelt. Dabei unterscheidet man 2 Arten: den ‘Data Algorithm’ und den ‘Visualization Algorithm’. Data Algorithms sind Erweiterungen, die Daten verarbeiten. Beispiele dafür sind ‘Load VTK’, eine Erweiterung die Daten aus dem VTK Format einliest, oder ‘Combine Scalar to Vector’, das mehrere Felder mit skalaren Werten zu einem einzelnen Feld mit Vektorwerten kombiniert, deren Komponenten den Skalaren entsprechen. Visualization Algorithms dagegen dienen dazu, Visualisierungen zu erzeugen. Interaktionen mit den Visualisierungen können entweder über die Maus oder über Optionen stattfinden.

Ein wesentliches Feature von FAnToM besteht darin, Algorithmen miteinander zu verknüpfen. Dies geschieht, indem Ausgabedaten von Algorithmen können als Eingabe für andere dienen können. Da viele Algorithmen mit Blick auf Wiederverwendbarkeit entwickelt wurden, können so mit wenig Aufwand aus bestehenden Algorithmen komplett neue Visualisierungspipelines entwickelt werden.

Erweiterungen können auf eine Vielzahl von mächtigen Werkzeugen zugreifen, die von FAnToM zur Verfügung gestellt werden. Besonders wichtig für die vorliegende Arbeit waren dabei das hoch entwickelte (ToDo: anderes Wort) Datenmodell, das viele Funktionen zum Verarbeiten von Feldern und Tensoren bietet, die bestehenden Schnittstellen für Qt und OpenGL sowie die große Bibliothek von wiederverwendbaren Algorithmen.

## 4.2 OpenGL

OpenGL[13] ist eine Spezifikation die das Verhalten eines rasterbasierten Renderingsystems beschreibt. Sie definiert eine Schnittstelle, gegen die von zwei Seiten entwickelt werden kann: Zum einen von Seiten der Hardwarehersteller, die Funktionen von OpenGL auf ihrer Hardware implementieren. Zum anderen von Programmierern, die durch OpenGL unabhängig von der Hardware, auf der das Programm am Ende laufen soll, entwickeln können.

Die Verarbeitungsschritte von der Übergabe von Daten zu OpenGL bis zum fertig gerenderten Bild wird als Renderpipeline bezeichnet. Seit Version 2.0 unterstützt OpenGL sogenannte ‘Shader’, kleine Programmstücke, die es Benutzern von OpenGL ermöglicht, die Renderpipeline sehr stark zu verändern. Shader bekommen drei Arten von Eingabedaten:

1. Die Ausgabe des vorherigen Schrittes in der Renderpipeline
2. Parameter aus dem Programm, das OpenGL verwendet (‘Uniforms’)
3. Daten, die aus dem vorhergehenden Shader übergeben wurden

Ein wichtiger Spezialfall von Uniforms sind Texturen, die in dem OpenGL verwendenden Programm geladen, an die Shader übergeben und dort verwendet werden können.

In der vorliegenden Arbeit wurden Vertex, Geometry und Fragment Shader entwickelt. Diese drei Typen sind folgend kurz erklärt.

**Vertex Shader** Vertex Shader bekommen als Eingabe aus der Renderpipeline die Punkte eines zu zeichnenden Grafikprimitivs, beispielsweise Punkte eines Liniensegmentes oder die Eckpunkte eines Dreiecks. Abhängig von den eingegebenen Uniforms können die Koordinaten dieser Punkte dann durch den Shader verändert werden. Dies ist beispielsweise üblich um die Sicht auf die Szene von der Position der Kamera aus zu berechnen. Vertex Shader werden einmal pro Punkt ausgeführt. Die Ausgabe des Vertex Shaders sind die neuen Koordinaten der Punkte der Primitive.

**Geometry Shader** Die Renderpipeline übergibt dem Geometry Shader für jedes Primitiv eine Liste der dazugehörigen Punkte, zum Beispiel eine Liste von 3 Punkten für ein Dreieck. Der Geometry Shader ist in der Lage, die Position und den Typ dieser Primitive beliebig zu verändern, und sogar neue Punkte zu erzeugen. So kann er beispielsweise aus einer Linie ein Dreieck erzeugen. Zusätzlich kann er pro Punkt Uniforms definieren, die an später ausgeführte Shader (Vertex Shader) weitergegeben werden. Pro Primitiv wird der Geometry Shader einmal ausgeführt.

**Fragment Shader** Fragment Shader bestimmen die Farben der Fragmente. Fragmente sind Stücke der projizierten Primitive, deren Größe von der Art der Rasterisierung abhängen (z.B. Supersampling). Die Eingaben sind der Mittelpunkt des Fragments und die für diesen Punkt interpolierten Attribute der Eckpunkte des Primitivs. Neben der Fragmentfarbe können auch Werte ausgegeben werden, zum Beispiel ein Tiefenattribut, das korrekte Überlappung von Primitiven ermöglicht.

Weitere im Folgenden verwendete Funktionen von OpenGL sind 'Blending', eine Funktion durch die Fragmente übereinander gezeichnet und ihre Farbwerte gewichtet kombiniert werden können, was z.B. für transparente Objekte wichtig ist sowie die Möglichkeit, gerenderte Bilder in einer Textur zu speichern.

Die meisten Implementierungen von OpenGL machen intensiven Gebrauch von Grafikkarten und deren Fähigkeit zur extremen Parallelisierung von Aufgaben. Dies, verbunden mit der Möglichkeit Ausgaben der Renderpipeline zurück in den Arbeitsspeicher zu laden und der Anpassbarkeit der Renderpipeline durch Shader ermöglicht es, OpenGL auch für andere rechenintensive, jedoch gut parallelisierbare Aufgaben zu benutzen und so Berechnungen stark zu beschleunigen.

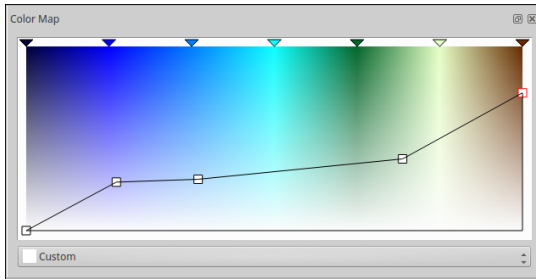


Abb. 4: Eine Implementierung einer interaktiven Transferfunktion in FAnToM.

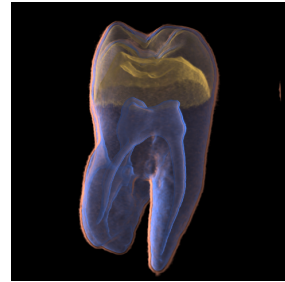


Abb. 5: Ein Direct Volume Rendering eines Zahns. Entnommen aus [7, S. 6]

### 4.3 Direct Volume Rendering

In der Computergrafik werden dreidimensionale Objekte üblicherweise durch Dreiecke dargestellt, durch die die Oberfläche der Objekte approximiert werden. Dies entfernt jedoch alle Informationen über Strukturen im Inneren der Objekte, so wie Bereiche unterschiedlicher Materialien oder Dichte. Durch das Berechnen und Zeichnen von Isoflächen kann dieses Problem behoben werden, dies erfordert jedoch hohe Rechenzeiten und gute Kenntnis der Datensätze, um geeignete Isowerte festzulegen.

Eine Alternative bietet das Direct Volume Rendering[7] (im Folgenden DVR). Als Eingabe wird ein Feld  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  verwendet, das Punkten im dreidimensionalen Raum skalare Werte zuordnet. Die Interpretation dieser Werte kann, abhängig vom Einsatzgebiet, unterschiedlich sein. Beispiele dafür sind die abgegebene Energie von Regionen in der Magnetresonanztomographie oder die Menge von absorbierter Röntgenstrahlung in der Computertomographie. Den skalaren Werte werden mittels einer ‘Transferfunktion’ Farbwerte und Transparenz zugeordnet.

Eine Implementierung einer Interaktiven Transferfunktion in FAnToM ist in Abbildung 4 zu sehen. Die horizontale Achse entspricht den skalaren Werten zwischen Minimum und Maximum im Datensatz sowie den zugeordneten Farben. Die vertikale Achse entspricht der Transparenz, von vollständig transparent am unteren Rand bis zu komplett intransparent am oberen Rand. Durch Position und Farbe der Dreiecke am oberen Rand der Transferfunktion kann die Farbzuzuordnung festgelegt werden. Die Quadrate stellen interaktiv ausgewählte Punkte dar, die Zuordnungen von Werten im Skalarfeld zu Farb- und Transparenzwerten entsprechen, zwischen denen entlang der verbindenden Linien interpoliert wird. So werden allen Werten im Feld eine Farbe und eine Transparenz zugeordnet.

Ziel des DVR ist es, mithilfe der Transferfunktion eine dreidimensionale Darstellung des Feldes zu erzeugen, in der Bereiche entsprechend der Transferfunktion Licht ausstrahlen, das von anderen Bereichen entsprechend ihrer Transparenz durchgelassen oder absorbiert wird. Dadurch ist es möglich, Strukturen im Inneren des Feldes sichtbar zu machen. Ein Beispiel für eine so erzeugtes Bild ist in Abbildung 5 dargestellt.

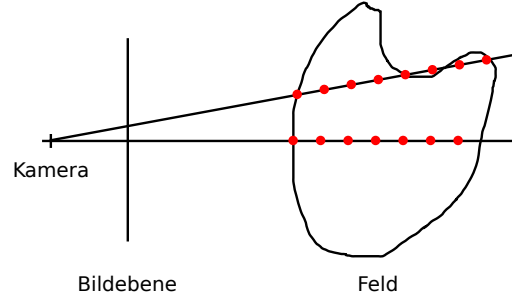


Abb. 6: Eine vereinfachte Darstellung eines optimierten Raycastings. Die Bildebene entspricht der Ebene, die durch die durch die imaginäre Position der Pixel gebildet wird. Die Roten Punkte entlang der Strahlen entsprechen den Samplepunkten.

Es existieren viele DVR Verfahren die sich in Laufzeit, Bildqualität und Anfälligkeit für Artefakte unterscheiden. In dieser Arbeit wurde Raycasting verwendet, was folgend erläutert wird.

#### 4.3.1 Raycasting

Beim Raycasting wird für jedes Pixel ein Strahl durch den Mittelpunkt des Pixels und die Position der Kamera berechnet. Entlang dieses Strahls wird an, nach ihrer Entfernung von der Kamera geordneten Punkten  $s_1, \dots, s_n$  ('Samplepunkten') der interpolierte Wert des Feldes  $v(s_i)$ ,  $1 \leq i \leq n$  berechnet. Der paarweise Abstand der Samplepunkte ist dabei konstant. Aus dem ermittelten Wert wird mithilfe der Transferfunktion die Farbe  $f(v(s_i))$  und die Transparenz  $t(v(s_i))$  für diesen Wert bestimmt.

Dabei sei die Transparenz ein Wert im Intervall  $[0, 1]$  und Farbe ein Vektorraum über  $\mathbb{R}$ , wie zum Beispiel im RGBA Farbmodell, für den die Multiplikation mit einem Skalar definiert ist. Die Farbe des Pixels  $p$  wird dann für die Samplepunkte entlang des entsprechenden Strahls berechnet als

$$p = \sum_{i=1}^n \left( f(s_i) \cdot \prod_{j=1}^i \frac{(1 - t(s_j))}{n} \right) \quad (24)$$

Das hat den Effekt, dass weiter von der Kamera entfernte Samplepunkte von näheren Punkten entsprechend ihrer Transparenz verdeckt werden. Insbesondere hat es die Konsequenz, dass, sobald genügend Punkte verarbeitet wurden, so dass die 'verbleibende Transparenz' einen Grenzwert unterschreitet, sich die Farbe des Pixels nicht mehr stark verändert, und die Berechnung frühzeitig beendet werden kann. Die verbleibende Transparenz wird durch die Gesamtzahl der Samplepunkte  $n$  geteilt, damit eine höhere Anzahl an Samplepunkten nicht zu einem schnelleren Verlust von Transparenz führt.

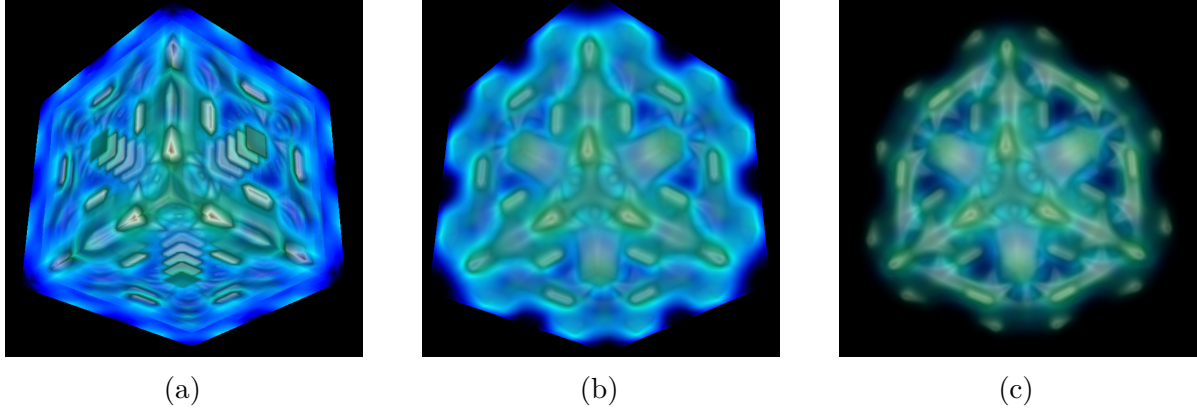


Abb. 7: Drei Raycastings des Felds  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}, f \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \cos(x \cdot y \cdot z)$ .

Eine weitere Optimierung besteht darin, die Samplepunkte erst nach dem Eintreten des Strahls in das Feld beginnen zu lassen und die Berechnung zu beenden, sobald alle verbleibenden Samplepunkte ausserhalb des Feldes liegen. Eine vereinfachte Darstellung dieses optimierten Verfahrens ist in 6 dargestellt.

Die Qualität eines Raycastings ist stark abhängig von der Anzahl an Samplepunkten pro Strahl und somit vom Abstand zwischen den Samplepunkten. Ein geringerer Abstand führt generell zu weniger Artefakten und macht kleine Strukturen besser erkennbar, erhöht jedoch den Rechenaufwand. Indem der Benutzer die Anzahl von Samplepunkten selbst auswählt, kann er seinen optimalen Tradeoff zwischen Rechenzeit und Bildqualität finden. In Abbildung 7a und 7b sind zwei Darstellungen desselben Skalarfeldes zu sehen, die durch Raytracing mit einer unterschiedlichen Anzahl von Samplepunkten erzeugt wurden. 7a wurde mit 20 Samplepunkten erstellt, wodurch visuelle, scheibenartige Artefakte entstanden. Bei einer höheren Menge von 200 Samplepunkten in 7b verschwinden diese Artefakte.

Eine weitere wichtige Einstellung ist, welche Zahl in Formel 24 für Variable  $n$  verwendet wird. Wenn  $n$  die Anzahl der Samplepunkte pro Strahl ist, kann dies, wenn die Blickrichtung der Kamera nicht senkrecht auf einer der Seitenflächen steht, dazu führen, dass Bereiche am Rand des Feldes transparenter dargestellt werden als in der Mitte. Das liegt daran, dass der Strahl am Rand weniger Samplepunkte produziert die innerhalb des Feldes liegen. Ein Beispiel dafür ist in 7c mit 200 Samplepunkten dargestellt.

Alternativ kann für  $n$  die Anzahl der Samplepunkte, die tatsächlich im Feld liegen, gewählt werden. Dies wurde in Abbildung 7b getan. Wenn man nun 7b und 7c miteinander vergleicht, fällt auf, dass die Pixel in der mitte der Darstellung etwa die gleichen Farben erhalten haben, 7c in Richtung Rand jedoch erheblich transparenter wird. Welche von beiden Varianten bevorzugt wird, hängt von der Art des Datensatzes ab sowie davon, wie wichtig es ist, korrekte Werte ablesen und vergleichen zu können.

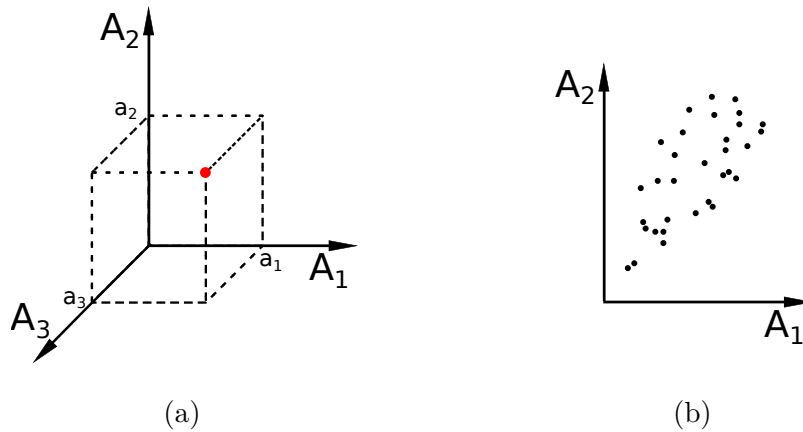


Abb. 8: Zwei Beispiele für Scatterplottings. In (a) wird ein Objekt mit den Attributwerten  $a_1, a_2, a_3$  als roter Punkt in einem dreidimensionalen Scatterplot dargestellt. Um die Attribute besser ablesen zu können, wurden gestrichelte Linien eingezeichnet. In (b) wurden mehrere Objekte mit unterschiedlichen Attributen im selben, zweidimensionalen Scatterplot als schwarze Punkte eingezeichnet.

## 4.4 Continuous Scatterplotting

### 4.4.1 Scatterplotting

Scatterplotting ist ein weiter verbreitetes Verfahren, um Attribute von Objekten relativ zueinander darzustellen. Es bildet eine Funktion auf einer Menge von Objekten  $M$  als  $\tau : M \rightarrow \mathbb{R}^n, n \in \{1, 2, 3\}$ , wobei das Bild eine Projektion auf einzelne oder zusammengesetzte Attribute der Objekte darstellt. Dazu wird pro Objekt ein Punkt in ein in zwei- oder dreidimensionales Koordinatensystem eingetragen, dessen Koordinatenachsen Attributwerten entsprechen. Beispiele für Scatterplottings sind in Abbildung 8 abgebildet. Das Bild von  $\tau$  ist auf maximal 3 Dimensionen beschränkt, da höherdimensionale Daten visuell nur schwer zu interpretieren sind.

Ein Vorteil von Scatterplottings ist die leichte Erkennbarkeit von Strukturen in den Datensätzen: Cluster, Outlier und funktionale Zusammenhänge zwischen den verwendeten Attributen sind leicht erkennbar.

Scatterplotting hat jedoch zwei gravierende Nachteile. Zum einen macht die geringe Dimensionalität des Bildes von  $\tau$  die Projektion auf eine Teilmenge der Attribute notwendig, zum anderen kann Scatterplotting nur endlich viele Objekte gleichzeitig darstellen.

Ein Beispiel für ein Urbild mit unendlich vielen Elementen ist  $\mathbb{R}^n$  bei physikalischen Feldern. Dort sind an jedem der unendlich vielen Punkte Werte definiert. Ein Scatterplot dieser unendlich vielen Elemente ist nun weder in endlicher Laufzeit möglich, noch wären einzelne Punkte in der entstehenden Darstellung erkennbar. Eine Alternative besteht

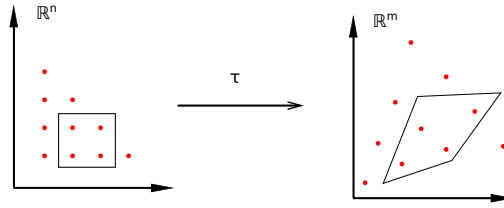


Abb. 9: Darstellung der Dichteverteilung im Urbild und Bild von  $\tau$ . Die roten Punkte deuten die Dichte in den beiden Scatterplots an, die zwei Vierecke sind ein Bereich des Urbilds, der durch  $\tau$  verformt wird. Zu erkennen ist, dass eine Streckung eines Bereichs zur Verringerung der Dichte und eine Stauchung zur Erhöhung der Dichte führt.

darin, nur den Scatterplot der Eckpunkte der Zellen zu erzeugen, doch damit gehen Informationen über die Punkte innerhalb der Zellen verloren.

#### 4.4.2 Erläuterung des Continuous Scatterplottings

Das Continuous Scatterplotting[2] stellt eine Erweiterung des Scatterplottings dar, so dass statt nur einer endlichen Anzahl von Objekten auch kontinuierliche Bereiche verarbeitet werden können. Dabei verwendet es einen Ansatz, der dem Verfahren bei der Herleitung der Kontinuumsmechanik aus Systemem mit diskreten Massepunkten ähnelt [2, S. 1429]. Das Ziel des Continuous Scatterplottings ist es eine Dichtefunktion  $\sigma : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  zu finden, die den Punkten des Bildraums, abhängig von  $\tau$ , Dichtewerte zuordnet. In Abbildung 9 ist der Effekt, den  $\tau$  auf die Dichtefunktion hat, dargestellt. Um  $\sigma$  berechnen zu können, werden 2 Annahmen getroffen:

Die erste Annahme ist, dass eine Dichtefunktion  $s : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  existiert, die jedem Punkt des Urbilds von  $\tau$  einen skalaren Wert, die Dichte an diesem Punkt, zuordnet. Der Einfachheit halber wird häufig eine uniforme Dichte im gesamten Urbild angenommen. Aus der Dichte an den Punkten lässt sich die Gesamtdichte  $M$ , auch bezeichnet als Masse, einer Teilmenge  $V \subset \mathbb{R}^n$  berechnen:

$$M = \int_V s(x) d^n x \quad (25)$$

Die zweite Annahme sagt aus, dass die Masse einer Teilmenge  $V \subset \mathbb{R}^n$  gleich der Masse ihres Bildes ist, also  $\tau$  die Gesamtdichte eines Bereichs nicht beeinflusst. Für  $\xi \in \mathbb{R}^m$  führen diese beiden Aussagen zu der Gleichung

$$M = \int_V s(x) d^n x = \int_{\phi=\tau(V)} \sigma(\xi) d^m \xi \quad (26)$$



wodurch  $\sigma$  eindeutig definiert ist.

## **5 Umsetzung**

### **5.1 Datenaufbereitung**

### **5.2 Die Rasterisierung**

### **5.3 Funktionen**

### **5.4 Handbuch**

### **5.5 Muss noch überarbeitet werden**

## **6 Ergebnisse**

### **6.1 title**

## **7 Ausblick**

Fehler reduzieren durch Berechnung der Größe des tatsächlich belegten Volumens pro Tetraeder und Voxel -> Supersampling???

## Bücher

- [4] Ray M Bowen und Chao-Cheng Wang. *Introduction to vectors and tensors*. Bd. 1. Courier Corporation, 2008.
- [9] Richard P Feynman, Robert B Leighton und Matthew Sands. *The Feynman lectures on physics, Vol. I: The new millennium edition: mainly mechanics, radiation, and heat*. Bd. 1. Basic books, 2011.
- [11] Keith D. Hjelmstad. *Fundamentals of Structural Mechanics*. 10. Aufl. Springer US Verlag KG, 2005. ISBN: 978-3-13-477010-0.
- [16] Norbert Kusolitsch. *Maß-und Wahrscheinlichkeitstheorie: Eine Einführung*. Springer-Verlag, 2014.

## Artikel

- [2] Sven Bachthaler und Daniel Weiskopf. “Continuous scatterplots”. In: *IEEE transactions on visualization and computer graphics* 14.6 (2008), S. 1428–1435.
- [3] Peter J Basser, James Mattiello und Denis LeBihan. “MR diffusion tensor spectroscopy and imaging”. In: *Biophysical journal* 66.1 (1994), S. 259–267.
- [5] John C Criscione u. a. “An invariant basis for natural strain which yields orthogonal stress response terms in isotropic hyperelasticity”. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48.12 (2000), S. 2445–2465.
- [6] Thierry Delmarcelle und Lambertus Hesselink. “Visualizing second-order tensor fields with hyperstreamlines”. In: *IEEE Computer Graphics and Applications* 13.4 (1993), S. 25–33.
- [7] Robert A Drebin, Loren Carpenter und Pat Hanrahan. “Volume rendering”. In: *ACM Siggraph Computer Graphics*. Bd. 22. 4. ACM. 1988, S. 65–74.
- [8] Daniel B Ennis und Gordon Kindlmann. “Orthogonal tensor invariants and the analysis of diffusion tensor magnetic resonance images”. In: *Magnetic resonance in medicine* 55.1 (2006), S. 136–146.
- [14] Gordon Kindlmann. “Superquadric tensor glyphs”. In: *Proceedings of the Sixth Joint Eurographics-IEEE TCVG conference on Visualization*. Eurographics Association. 2004, S. 147–154.
- [15] Gordon Kindlmann und David Weinstein. “Hue-balls and lit-tensors for direct volume rendering of diffusion tensor fields”. In: *Proceedings of the conference on Visualization’99: celebrating ten years*. IEEE Computer Society Press. 1999, S. 183–189.
- [17] Alexander Wiebel u. a. “Fantom-lessons learned from design, implementation, administration, and use of a visualization system for over 10 years”. In: (2009).

- [18] Valentin Zobel und Gerik Scheuermann. “Extremal curves and surfaces in symmetric tensor fields”. In: *The Visual Computer* (2017), S. 1–16.

## Internetressourcen

- [1] Universität Leipzig Abteilung für Bild- und Signalverarbeitung. *FAnToM Website*. URL: <http://www.informatik.uni-leipzig.de/fantom/content/about-fantom> (besucht am 25.03.2018).
- [13] The Khronos<sup>TM</sup> Group Inc. *OpenGL Website*. URL: <https://www.khronos.org/opengl/> (besucht am 28.03.2018).