

Masterarbeit

Schematische 2D Visualisierung von RNA-Protein Interaktionen

Niklas Teichmann

24. März 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

1	Einleitung	1
2	Verwandte Arbeiten	2
3	Grundlagen	3
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	13
4	Verwendete Verfahren und Technologien	14
5	Umsetzung	14
6	Ergebnisse	14
7	Ausblick	14
	Bücher	I
	Artikel	I

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[1], welche die Diffusion von Wasser in Gewebe wie z.B. dem Hirn untersucht, oder Verformungs-[8, S. 122] und Spannungstensoren[8, 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[9][7]:

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 [9, 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 [11], in dem es jedoch als weder neu noch besonders intuitiv beschrieben wird.

Die wohl verbreiteteste 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[10], 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[4] 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 Fritsch, ‘Visuelle Analyse kontinuumsmechanischer Simulationen durch kontinuierliche Streudiagramme’[7], erwähnt werden, auf der die vorliegende Arbeit direkt aufbaut. Fritsch 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 [2].

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[12]. 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_n 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[2, S. 85]:

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

also ϕ ein homogener Homomorphismus ist.

Die Menge aller linearen Abbildungen von V nach U wird mit $L(V, U)$ bezeichnet. [2, 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[2, S. 203].

Vektoren aus V werden als **kovariant** bezeichnet, Vektoren aus V^* als **kontravariant**[2, 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 φ linear in jeder Variable ist[2, 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 [2, S. 218]. Der Grad des Tensors ist definiert als die Anzahl an Variablen der Funktion. Die Tensoren über V bildet wiederum einen Vektorraum [2, 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 3×3 Matrix ergibt sich \bar{A} als

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

wobei I die Matrixdarstellung des Einheitstensor ist.

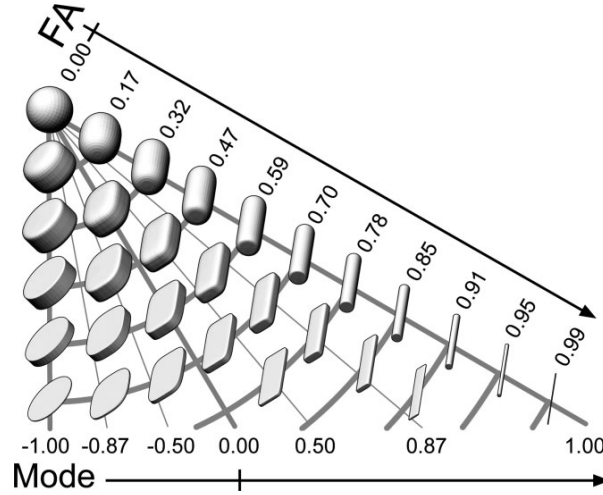


Abbildung 1: Darstellung der fraktionalen Anisotropie und des Modus von Matrizen in Form von Superquadrics[10]. Die Fraktionale Anisotropie nimmt mit größerer Entfernung zum obersten linken Superquadric zu. Der Modus des Deviators wird abhängig vom Winkel dargestellt, wobei er links -1 beträgt und rechts 1. Entnommen aus [5, S. 140].

3.1.12 Modus von Matrizen

Der Verformungs-Modus [3] 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 [5]

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

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[5]. 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 [13] überein.

3.1.16 Invariantensätze

Mengen von Invarianten werden als Invariantensätze bezeichnet. Matrixinvarianten Ψ_1 und Ψ_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. [5] nachzulesen. Da Gradienten von skalarwertigen Funktionen auf Matrizen wiederum Matrizen sind [5, S. 137], genügt zu zeigen dass diese orthogonal zueinander sind. Invariantensätze, deren Elemente paarweise orthogonal sind, werden als orthogonale Invariantensätze bezeichnet.

Für 3×3 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 3×3 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 λ_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 χ einer 3×3 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 λ 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.

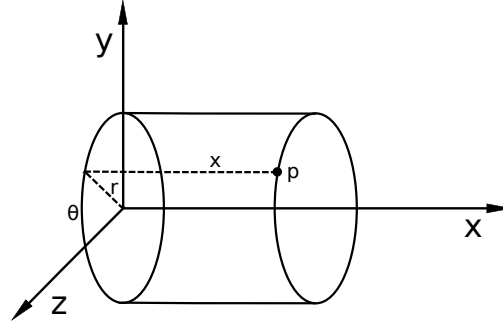


Abbildung 2: In dieser Abbildung werden zylindrische Koordinaten innerhalb eines kartesischen Koordinatensystems dargestellt. x, y und z entsprechen dabei den kartesischen Achsen. Die Koordinaten des Punktes p sind angegeben als x, r, θ . x entspricht der kartesischen Koordinate, r ist die Entfernung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

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)

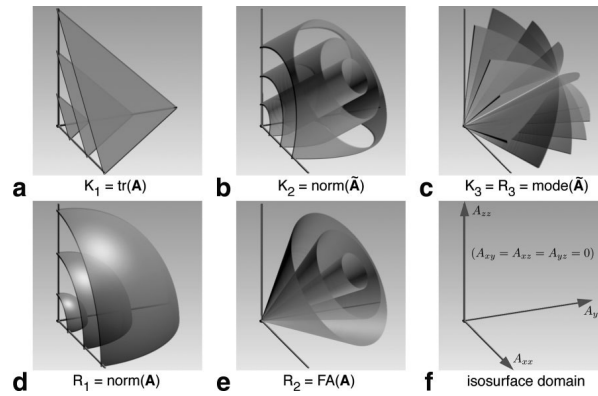


Abbildung 3: Dargestellt sind Isoflächen der K und R Invarianten von diagonalisierten 3×3 Matrizen (alle Werte ausserhalb der Hauptdiagonale sind 0). Die Koordinatenachsen entsprechen den drei Eigenwerten der Matrizen. Entnommen aus [5, S. 139]

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[6, 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.

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 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 σ 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 σ entlang der Hauptdiagonale, die Kraft in Richtung der Normalen der jeweiligen Ebene angeben, und den τ , die Scherspannungen angeben, die parallel zu den Schnittebenen verlaufen.

4 Verwendete Verfahren und Technologien

5 Umsetzung

6 Ergebnisse

7 Ausblick

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

Bücher

- [2] Ray M Bowen und Chao-Cheng Wang. *Introduction to vectors and tensors*. Bd. 1. Courier Corporation, 2008.
- [6] 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.
- [8] Keith D. Hjelmstad. *Fundamentals of Structural Mechanics*. 10. Aufl. Springer US Verlag KG, 2005. ISBN: 978-3-13-477010-0.
- [12] Norbert Kusolitsch. *Maß- und Wahrscheinlichkeitstheorie: Eine Einführung*. Springer-Verlag, 2014.

Artikel

- [1] Peter J Basser, James Mattiello und Denis LeBihan. “MR diffusion tensor spectroscopy and imaging”. In: *Biophysical journal* 66.1 (1994), S. 259–267.
- [3] 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.
- [4] Thierry Delmarcelle und Lambertus Hesselink. “Visualizing second-order tensor fields with hyperstreamlines”. In: *IEEE Computer Graphics and Applications* 13.4 (1993), S. 25–33.
- [5] 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.
- [13] Valentin Zobel und Gerik Scheuermann. “Extremal curves and surfaces in symmetric tensor fields”. In: *The Visual Computer* (2017), S. 1–16.